

УДК 539.171.11

СЛАБОСВЯЗАННЫЕ ТРЕХАТОМНЫЕ LiHe_2 МОЛЕКУЛЫ

© 2020 г. Е. А. Колганова^{1,2,*}, В. Руднев³

¹Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московской области “Университет “Дубна”, Дубна, Россия

³Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Санкт-Петербургский государственный университет”, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: kea@theor.jinr.ru

Поступила в редакцию 30.10.2019 г.

После доработки 25.11.2019 г.

Принята к публикации 27.12.2019 г.

Исследованы свойства трехатомных кластеров LiHe_2 . В рамках дифференциальных уравнений Фаддева рассчитаны энергии связи и длины рассеяния атома на слабосвязанном димере.

DOI: 10.31857/S0367676520040158

ВВЕДЕНИЕ

Слабосвязанные трехатомные кластеры, взаимодействие которых описывается потенциалами ван-дер-ваальсового типа, представляют собой системы, в которых наиболее вероятно проявление эффекта Ефимова [1]. Межатомное парное взаимодействие является короткодействующим, убывая быстрее, чем $1/r^6$, где r расстояние между атомами, и вполне может быть резонансным, поскольку парные длины рассеяния в десятки, а иногда и в сотни раз больше, чем эффективный радиус взаимодействия. Наличие именно этих условий хотя бы в двух парных подсистемах тримера необходимо, чтобы в трехчастичной системе возникло эффективное дальнедействующее притяжение, которое может поддерживать вплоть до бесконечного количества связанных состояний. Качественный анализ, сделанный Ефимовым [1], показал, что число связанных состояний системы трех бозонов пропорционален логарифму отношения двухчастичной длины рассеяния к эффективному радиусу взаимодействия парных сил. В случае трехчастичной системы, состоящей из атомов ^4He — тримера гелия, оценка Ефимова позволяет ожидать существование одного возбужденного состояния в молекуле тримера гелия (см. обсуждение в [2, 3]). Действительно, результаты численных расчетов с различными реалистическими атом-атомными потенциалами показали, что система $^4\text{He}_3$ обладает единственным возбужденным состоянием Ефимовского типа [2–13].

Экспериментальные исследования слабосвязанных молекул очень сложны и многие годы вопрос о существовании связанного состояния димера гелия оставался открытым. Впервые димер гелия был открыт в независимых экспериментах [14] и [15] и была дана экспериментальная оценка его энергии связи — порядка 1 мК [16]. Позднее, измерения среднего значения длины связи, $\langle r \rangle = 52 \pm 4 \text{ \AA}$, показали, что димер гелия является самой протяженной среди известных двухатомных молекул [17]. В той же работе были измерены энергии связи димера $1.1_{-0.2}^{+0.3}$ мК и длина рассеяния $104_{-18}^{+8} \text{ \AA}$ [17]. Однако, недавние эксперименты [18], основанные на комбинации техники визуализации кулоновского взрыва [19] и селекции кластеров по массе с помощью дифракции [15], дают несколько другую оценку энергии связи димера — $1.76_{-0.15}^{+0.15}$ мК. Такая неопределенность в экспериментальных результатах не позволяет выбрать предпочтительную потенциальную модель, поскольку различные потенциальные модели дают примерно тот же разброс в предсказаниях энергии связи. Очевидно, что дальнейшие эксперименты по определению энергии связи димера необходимы, чтобы прояснить ситуацию.

В эксперименте [20], была впервые дана оценка размеров основного состояния трехатомной молекулы $^4\text{He}_3$, которая равна 11_{-5}^{+4} \AA , что соответствует теоретическим предсказаниям. Лишь недавно в эксперименте [21] с использованием той же методики, что и в [17] была измерена разность

между энергиями связи возбужденного состояния тримера и основного состояния димера, которая оказалась равной 0.98 ± 0.2 мК, что находится в очень хорошем согласии с результатами численных расчетов [2–12]. Теоретические исследования механизма возникновения возбужденного состояния в ⁴He₃, проведенные в [6, 7, 11, 12] показали, что это состояние является состоянием Ефимовского типа.

Другими естественными трехчастичными системами Ефимовского типа могут быть Ван-дер-Ваальсовские молекулы, состоящие из двух атомов гелия и атома щелочных металлов. Взаимодействие между атомами гелия и щелочных металлов, как и в случае димера гелия, поддерживает одно слабосвязанное состояние и в таких трехчастичных системах вполне могут существовать Ефимовские уровни. В настоящей работе мы рассматриваем системы ⁴He₂⁶Li и ⁴He₂⁷Li и, используя уравнения Фаддеева в представлении полного углового момента [22, 23], проводим расчеты энергий связи и длин рассеяния с использованием реалистических атом-атомных потенциалов [24–26].

МЕТОД ОПИСАНИЯ ТРЕХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

Конфигурационное пространство системы трех частиц после отделения движения центра масс удобно описывать с помощью приведенных координат Якоби $\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha, \alpha = 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned} \bar{x}_\alpha &= \left[\frac{2m_\beta m_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \right]^{1/2} (\bar{r}_\beta - \bar{r}_\gamma), \\ \bar{y}_\alpha &= \left[\frac{2m_\alpha (m_\beta + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma} \right]^{1/2} \left(\bar{r}_\alpha - \frac{m_\beta \bar{r}_\beta + m_\gamma \bar{r}_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

где \bar{r}_α – радиус-векторы частиц с массами m_α , а (α, β, γ) образуют циклическую перестановку индексов (1, 2, 3). Якобиевские вектора с другими индексами получают с помощью преобразования поворота [22, 23].

Полную волновую функцию Ψ трех-частичной системы можно записать в виде суммы компонент Фаддеева Φ_α

$$\Psi(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha) = \sum_\alpha \Phi_\alpha(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha) \quad (2)$$

которые удовлетворяют системе дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} (-\Delta_{\bar{x}_\alpha} - \Delta_{\bar{y}_\alpha} + V_\alpha(|\bar{x}_\alpha|) - E)\Phi_\alpha(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha) = \\ = -V_\alpha(|\bar{x}_\alpha|) \sum_{\beta \neq \alpha} \Phi_\beta(\bar{x}_\beta, \bar{y}_\beta), \end{aligned} \quad (3)$$

где V_α – потенциал взаимодействия в паре α , а E – полная энергия системы. В случае нулевого полного углового момента степени свободы, связанные с вращением трех-частичной системы как целой, можно отделить [23], в результате получится следующая система трехмерных дифференциальных уравнений для соответствующей проекции компоненты Фаддеева [23]

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} - \frac{\partial^2}{\partial y_\alpha^2} - \left(\frac{1}{x_\alpha^2} + \frac{1}{y_\alpha^2} \right) \frac{\partial}{\partial z_\alpha} (1 - z_\alpha^2) \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial}{\partial z_\alpha} + V_\alpha(x_\alpha) - E \right) \Phi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha) = \\ = -V_\alpha(x_\alpha) \sum_{\beta \neq \alpha} \Phi_\beta(x_\beta, y_\beta, z_\beta), \end{aligned} \quad (4)$$

где x_α, y_α и z_α связаны с соответствующими координатами Якоби:

$$\begin{aligned} x_\alpha &= |\bar{x}_\alpha|, \quad y_\alpha = |\bar{y}_\alpha|, \quad z_\alpha = \frac{(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha)}{x_\alpha y_\alpha}, \\ x_\alpha, y_\alpha &\in [0, \infty), \quad z_\alpha \in [-1, 1]. \end{aligned}$$

В случае, когда две частицы в трех-частичной системе тождественны, уравнения Фаддеева (4) упрощаются. Например, в рассматриваемом случае системы ⁴He₂Li, частицы 1 и 2, соответствующие атомам ⁴He, тождественны и компоненты Фаддеева $\Phi_1(x_1, y_1, z_1)$ и $\Phi_2(x_2, y_2, z_2)$ преобразуются друг в друга с помощью соответствующего преобразования поворота. Поэтому достаточно рассматривать только две независимые компоненты Фаддеева.

Асимптотические граничные условия с учетом единственности связанного состояния каждой парной подсистемы имеют вид

$$\begin{aligned} \Phi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha) &= \Psi_d(x_\alpha) \exp(i\sqrt{E - \varepsilon_d} y_\alpha) a_0(z_\alpha) + \\ &+ A\left(\frac{y_\alpha}{x_\alpha}, z_\alpha\right) \exp(i\sqrt{E} \rho) / \sqrt{\rho}, \end{aligned} \quad (5)$$

где Ψ_d и ε_d волновая функция и энергия связи соответствующего димера, а $\rho = \sqrt{x_\alpha^2 + y_\alpha^2}$ – гиперрадиус. Коэффициенты $a_0(z_\alpha)$ и $A(y_\alpha/x_\alpha, z_\alpha)$ описывают вклад каналов упругого рассеяния (2 + 1) и трех-частичного развала (1 + 1 + 1). Последним слагаемым в (5) при энергии ниже трех-частичного порога развала можно пренебречь.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для описания взаимодействия между атомами гелия использовался недавно предложенный потенциал PRZ [22]. КТТУ потенциалы [23] использовались для описания взаимодействия атома He с атомами щелочных металлов. В табл. 1 приведены результаты расчетов энергии связи димеров,

Таблица 1. Абсолютное значение энергии связи димеров $|\epsilon_d|$ и длины рассеяния $\ell_{sc}^{(1+1)}$, вычисленные с He–He потенциалом PRZ [22] и с КТТУ потенциалами [23], описывающими взаимодействие атома He с атомами щелочных металлов

Димер	${}^4\text{He}_2$	${}^4\text{He}^6\text{Li}$	${}^4\text{He}^7\text{Li}$	${}^4\text{He}^{23}\text{Na}$	${}^4\text{He}^{39}\text{K}$	${}^4\text{He}^{85}\text{Rb}$	${}^4\text{He}^{133}\text{Cs}$
$ \epsilon_d $, мК	1.620	1.515	5.622	28.97	11.20	10.27	4.945
$\ell_{sc}^{(1+1)}$, Å	90.28	89.42	48.84	23.37	33.32	34.02	45.32

Таблица 2. Абсолютные значения энергии связи димера гелия $|\epsilon_d|$ (мК), основного $|E_0|$ (мК) и возбужденного $|E_1|$ (мК) состояний системы ${}^4\text{He}_2^7\text{Li}$ и длина рассеяния атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}^7\text{Li}$, $\ell_{sc}^{(1+2)}$ (Å), вычисленные с He–Li потенциалом КТТУ [23]

	*	[29]	[30]	[33]	[33]	[35]	[36]
He–He потенциал	PRZ [22]	HFD-B [31]	ТТУ [32]	Jeziorska [34]	Jeziorska [34]	LM2M2 [37]	LM2M2 [37]
$ \epsilon_d $, мК	1.62	1.68	1.32	1.74	1.74	1.31	1.31
$ E_0 $, мК	80.60	81.03	80.0	81.29	76.32	79.36	78.73
$ E_1 $, мК	5.654			5.67	5.51	5.642	5.685
$\ell_{sc}^{(1+2)}$, Å	553						

которые показывают, что взаимодействие между атомами гелия и щелочных металлов, как и в случае димера гелия, поддерживает лишь одно слабосвязанное состояние. Вычисленная энергия связи димера гелия, 1.62 мК, довольно близка к экспериментальному значению 1.76 ± 0.15 мК, полученному в работе [15]. Энергия связи димера ${}^4\text{He}^6\text{Li}$ меньше по абсолютному значению, чем в димере ${}^4\text{He}_2$ и в трех-частичной системе ${}^4\text{He}_2^6\text{Li}$ порогом развала будет энергия димера гелия, в то время как в системе ${}^4\text{He}_2^7\text{Li}$ таким порогом будет энергия связи ${}^4\text{He}^7\text{Li}$. Заметим, что энергия связи ${}^4\text{He}^{133}\text{Cs}$ также довольно мала и соответствующий тример ${}^4\text{He}_2^{133}\text{Cs}$ вполне может быть близок к Ефимовскому типу. Длины рассеяния $\ell_{sc}^{(1+1)}$, приведенные в табл. 1, довольно велики и составляют десят-

ки ангстрем, хотя с увеличением массы атома увеличивается и эффективный радиус взаимодействия, поэтому вероятность появления второго возбужденного состояния Ефимовского типа мала.

Для вычисления энергии связи систем ${}^4\text{He}_2^6\text{Li}$ и ${}^4\text{He}_2^7\text{Li}$ мы решаем уравнения (4) с граничными условиями (5). Детали используемой численной процедуры описаны в [7, 9, 27, 28]. Полученные результаты в сравнении с результатами других авторов приведены в табл. 2 и 3.

Во второй и третьей строках табл. 2 и 3 приведены используемые в расчетах модели He–He взаимодействия и энергия связи димера гелия, которую они дают. В работах [29, 30] вычисления проводились методом Монте Карло с использованием He–He потенциалов HFD-B [31] и ТТУ [32]. В работе [33] для вычисления спектра с ис-

Таблица 3. Абсолютные значения энергии связи димера гелия $|\epsilon_d|$ (мК), основного $|E_0|$ (мК) и возбужденного $|E_1|$ (мК) состояний системы ${}^4\text{He}_2^6\text{Li}$ и длина рассеяния атома ${}^6\text{Li}$ на димере ${}^4\text{He}_2$, $\ell_{sc}^{(1+2)}$ (Å), вычисленные с He–Li потенциалом КТТУ [23]

	*	[29]	[33]	[35]
He–He потенциал	PRZ [22]	HFD-B [31]	Jeziorska [34]	LM2M2 [37]
$ \epsilon_d $, мК	1.62	1.68	1.74	1.31
$ E_0 $, мК	58.38	58.72	58.88	57.23
$ E_1 $, мК	2.049		2.09	1.937
$\ell_{sc}^{(1+2)}$, Å	144			

пользованием потенциала Jeziorska [34] использовались методы адиабатического гиперсферического разложения (колонка 5 табл. 2 и колонка 4 табл. 3) и разложения по функциям Гаусса (колонка 6 табл. 2). Адиабатический гиперсферический метод использовался также в работах [35, 36] с использованием модели He–He взаимодействия LM2M2 [37]. Для полноты следует отметить работу [38] в которой впервые была дана оценка верхней границы основного состояния – 45.7 мК для ⁴He₂Li и –31.4 мК для ⁴He₂Li используя адиабатический гиперсферический метод, а также предсказания [39] существования возбужденного состояния в системе ⁴He₂Li полученные на основе идеи скейлинга и модели нулевого радиуса.

Различные методы дают довольно близкие результаты, не смотря на использование различных потенциальных моделей для взаимодействия между атомами гелия. В обеих рассматриваемых трехчастичных системах имеется лишь одно возбужденное состояние, которое лежит довольно близко к парному порогу развала, поэтому и соответствующие длины рассеяния довольно велики (см. последнюю строку табл. 2 и 3). Таким образом, на основе полученных данных нельзя исключить наличия Ефимовских состояний в этих трехатомных системах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ефимов В.Н. // ЯФ. 1970. Т. 12. С. 1080.
2. Kolganova E.A., Motovilov A.K., Sandhas W. // Few-Body Syst. 2011. V. 51. P. 249.
3. Kolganova E.A., Motovilov A.K., Sandhas W. // Few-Body Syst. 2017. V. 58. P. 35.
4. Колганова Е.А., Мотовилов А.К., Зандхас В. // ЭЧАЯ. 2009. Т. 40. С. 396; Kolganova E.A., Motovilov A.K., Sandhas W. // Phys. At. Nucl. 2009. V. 40. P. 206.
5. Naidon P., Endo Sh. // Rep. Prog. Phys. 2017. V. 80. Art. № 056001.
6. Колганова Е.А., Мотовилов А.К. // ЯФ. 1999. Т. 62. С. 1253; Kolganova E.A., Motovilov A.K. // Phys. Atom. Nucl. 1999. V. 62. P. 1179.
7. Roudnev V., Cavagnero M. // J. Phys. B. 2012. V. 45. Art. № 025101.
8. Hiyama E., Kamimura M. // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. Art. № 062505.
9. Roudnev V.A., Yakovlev S.L., Sofianos S.A. // Few-Body Systems. 2015. V. 37. P. 179.
10. Salci M., Yarevsky E., Levin S.B. et al. // Int. J. Quant. Chem. 2007. V. 107. P. 464.
11. Lazauskas R., Carbonell J. // Phys. Rev. A. 2006. V. 73. Art. № 062717.
12. Kievsky A., Garrido E., Romero-Redondo C. et al. // Few-Body Systems. 2011. V. 51. P. 259.
13. Deltuva A. // Few-Body Systems. 2015. V. 56. P. 993.
14. Luo F., McBane G.C., Kim G. et al. // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 9687.
15. Schöllkopf W., Toennies J.P. // Science. 1994. V. 266. P. 1345.
16. Luo F., Giese C.F., Gentry W.R. // J. Chem. Phys. 1996. V. 104. P. 1151.
17. Grisenti R., Schöllkopf W., Toennies J.P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 2284.
18. Zeller S., Kunitski M., Voigtsberger J. et al. // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 2016. V. 113. P. 14651.
19. Vager Z., Naaman R., Kanter E.P. // Science. 1989. V. 244. P. 426.
20. Brühl R., Kalinin A., Kornilov O. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. Art. № 063002.
21. Kunitski M., Zeller S., Voigtsberger J. et al. // Science. 2015. V. 348. P. 551.
22. Меркурьев С.П., Фаддеев Л.Д. Теория рассеяния для систем нескольких частиц. Наука, М., 1985.
23. Kostykin V.V., Kvinstinsky A.A., Merkuriev S.P. // Few-Body Syst. 1989. V. 6. P. 97.
24. Przybytek M., Cencek W., Komasa J. et al. // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 104. Art. № 183003.
25. Kleinekathöfer U., Lewerenz M., Mladenoc M. // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. P. 4717.
26. Tang K.T., Toennies J.P., Yiu C.L. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. P. 1546.
27. Kolganova E.A., Roudnev V., Cavagnero M. // Phys. Atom. Nucl. 2012. V. 75. P. 1240.
28. Kolganova E.A., Roudnev V. // Few-Body Syst. 2019. V. 60. P. 32.
29. Stipanović P., Vranješ Markić L., Zarić D., Boronat J. // J. Chem. Phys. 2017. V. 146. Art. № 014305.
30. Di Paola C., Gianturco F.A., Paesani F. et al. // J. Phys. B. 2002. V. 35. P. 2643.
31. Aziz R.A., McCourt F.R.W., Wong C.C.K. // Mol. Phys. 1987. V. 61. P. 1487.
32. Tang K.T., Toennies J.P., Yiu C.L. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. P. 1546.
33. Suno H., Hiyama E., Kamimura M. // Few-Body Syst. 2013. V. 54. P. 1557.
34. Jeziorska M., Cencek C., Patkowski K. et al. // J. Chem. Phys. 2007. V. 127. Art. № 124303.
35. Suno H. // Phys. Rev. A. 2017. V. 96. Art. № 012508.
36. Wu M.-S., Han H.-L., Li Ch.-B., Shi T.-Y. // Phys. Rev. A. 2014. V. 90. Art. № 062506.
37. Aziz R.A., Slaman M.J. // J. Chem. Phys. 1991. V. 94. P. 8047.
38. Yuan J.M., Lin C.D. // J. Phys. B. 1998. V. 31. P. L637.
39. Delfino A., Frederico T., Tomio L. // J. Chem. Phys. 2000. V. 113. P. 7874.