

## УРОВНИ ЭНЕРГИИ В АТОМЕ ГЕЛИЯ

Д. Т. Азнабаев<sup>a, б, 1</sup>, А. К. Бекбаев<sup>a, б</sup>, И. С. Ишмухамедов<sup>a, б</sup>, В. И. Коробов<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>б</sup> Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алма-Ата, Казахстан

В работе выполнен расчет нерелятивистских уровней энергии ионизации атома гелия для  $S$ -,  $P$ - и  $D$ -состояний. Расчеты основаны на вариационном методе «экспоненциального» разложения. Исследуется сходимость вычисляемых уровней энергии в зависимости от числа базисных функций  $N$ . Это позволяет утверждать, что полученные значения энергии имеют точность 20 значащих цифр, в том числе для состояний с ненулевым угловым моментом.

In our work the nonrelativistic ionization energies of helium atom are calculated for  $S$ ,  $P$  and  $D$  states. The calculations are based on the variational method of “exponential” expansion. Convergence of the numerical values of variational energies is studied by increasing a number of the basis functions  $N$ . That allows to claim that the obtained energy values have 20 significant digits, both for  $S$  states and for states of nonzero angular moment.

PACS: 31.15.A-; 31.15.ac; 31.15.xt

### ВВЕДЕНИЕ

Квантовая задача трех тел с кулоновским взаимодействием является одной из наиболее известных неинтегрируемых задач квантовой механики. Вместе с тем задача на связанные состояния для системы трех частиц допускает ультраточные численные решения на современных компьютерах. К примеру, нерелятивистская энергия основного состояния гелия с ядром бесконечной массы известна в настоящее время с точностью 46 значащих цифр [1].

В данной работе рассматривается разновидность вариационного метода, называемая «экспоненциальным» разложением, которое позволяет вычислять квантовую кулоновскую задачу трех тел с очень высокой точностью, в том числе для состояний с ненулевым угловым моментом. Данный метод используется для вычисления нерелятивистских энергий ионизации атома гелия для  $S$ -,  $P$ - и  $D$ -состояний. Показано, что разрабатываемый метод является эффективным универсальным средством для исследования кулоновских систем. Исследование сходимости доказывает высокую точность метода, демонстрируя, что нерелятивистские значения энергии на уровне 20 значащих цифр легко достижимы.

---

<sup>1</sup>E-mail: aznabaev@theor.jinr.ru

Развитие таких высокоточных методов важно еще и потому, что имеется широкий класс физических задач, которые представляют практический интерес. Например, в физике экзотических атомов и молекул исследуется атом антипротонного гелия  $\text{He}^+\bar{p}$  [2]. В этом атоме антипротон замещает один из электронов атома гелия и при определенных условиях формирует метастабильные состояния со временем жизни в несколько микросекунд! Кроме того что это рекордное время жизни для античастицы, находящейся в обычной (реальной) среде, это также астрономическое время по меркам атомной физики, где время жизни  $2P$ -состояния атома водорода всего 10 нс. Это позволяет использовать для исследования структуры спектра атома антипротонного гелия методы прецизионной лазерной спектроскопии.

Следует отметить такой важный аспект, как взаимное влияние атомной и ядерной физики [3], при определении статических характеристик ядер. Так, к примеру, среднеквадратичный радиус заряда гелия, полученный из экспериментов по рассеянию электронов на ядрах, имеет точность порядка 1–3 %. В то же время экспериментальное определение радиуса заряда  $^4\text{He}$  из спектроскопии мюонных атомов позволяет уменьшить погрешность этой величины в 10 и более раз.

Работа построена следующим образом: в разд. 1 и 2 подробно описывается использование вариационного метода для решения стационарной задачи Шредингера, в частности вариационное «экспоненциальное» разложение, используемое в практических расчетах. Далее в разд. 3 рассмотрен один из наиболее эффективных вычислительных методов для решения дискретизованной задачи с конечным базисом — метод обратной итерации. В последнем разделе дается исследование сходимости численных расчетов и приводятся окончательные теоретические результаты для 11 состояний атома гелия.

## 1. ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

Сформулируем сначала вариационный принцип для связанных состояний, а также опишем вариационный метод, который определяет вид базисных функций разложения решения и стратегию выбора вариационных параметров при построении волновой функции. В дальнейшем этот метод будем называть «экспоненциальным» разложением.

Отправной точкой в решении вариационными методами стационарного уравнения Шредингера

$$H\psi = E\psi \quad (1)$$

для некоторого гамильтониана является вариационный принцип Хиллерааса–Ундгейма, более известный в математике как вариационный принцип Рэля–Ритца, который считается универсальным методом при получении приближенного решения. Основными задачами вариационного исчисления являются задачи на определение экстремумов или стационарных значений функционалов. Сущность этого метода состоит в замене задачи поиска стационарных значений функционалов принципиально более простой задачей поиска стационарных значений функций нескольких переменных [4].

Пусть имеется самосопряженный оператор, определенный в гильбертовом пространстве, для которого выполнено условие ограниченности снизу

$$H \geq cI, \quad (2)$$

где  $c$  — некоторая константа. Далее определим функционал

$$\Phi(\psi) = \frac{(\psi, H\psi)}{(\psi, \psi)}, \quad (3)$$

этот функционал ограничен снизу значением константы  $c$ .

**Теорема [4].** Пусть  $H$  — самосопряженный оператор, удовлетворяющий условию (2). Определим

$$\mu_n(H) = \max_{\dim \chi = n-1} \min_{\Psi \in \chi^\perp} \Phi(\Psi), \quad (4)$$

где  $\chi^\perp$  — подпространство, ортогональное  $\chi$ ;  $\mathcal{D}(H)$  — область определения оператора  $H$ . Тогда для каждого фиксированного  $n$ :

а) либо существует  $n$  собственных значений (считая вырожденные значения столько раз, какова их кратность), находящихся ниже края существенного спектра, а  $\mu_n(H)$  есть с учетом кратности  $n$ -е собственное значение;

б) либо  $\mu_n(H)$  — нижний край существенного спектра.

Нахождение собственных значений, т. е. энергии связанных состояний стационарного уравнения Шредингера, сводится к вычислению седловых точек функционала (4). Утверждение теоремы называют «принципом минимакса».

Сделаем несколько замечаний относительно принципа минимакса.

1. Принцип минимакса — удобное средство для сравнения собственных значений операторов. Оно позволяет выводить количественные и качественные следствия, определяющие местоположение различных участков спектра (дискретный, непрерывный спектры, кратность).

2. Этот метод может быть полезен для определения места, где начинается существенный спектр.

3. В некоторых случаях известно, что существенный спектр принадлежит интервалу  $\sigma_{\text{ess}} = [a, \infty)$  в некотором определенном  $a$ , тогда если  $\mu_n < a$ , то можно заключить, что оператор  $H$  имеет по крайней мере  $n$  собственных значений. Таким образом устанавливается существование дискретного спектра.

Рассмотрим теперь метод, использующий вариационный принцип Рэлея–Ритца для практического решения задач на собственные значения и называемый «процессом Ритца». Пусть  $\phi_k$  — полная последовательность векторов в гильбертовом пространстве, подчиненная двум требованиям:

- 1) векторы  $\phi_k$  принадлежат области определения оператора  $H$ ;
- 2) при любом  $n$  векторы  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$  линейно независимы.

Предположим, что  $u_n = \sum_{k=1}^n x_k \phi_k$ , где  $x_k$  — скалярные коэффициенты. Подставляя  $u_n$  при фиксированном  $n$  в функционал  $\Phi(\cdot)$ , получаем функцию, зависящую от конечного набора параметров  $\{x_n\}_1^n$ :

$$\Phi(x) = \left( \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j \right) / \left( \sum_{i,j=1}^n b_{ij} x_i x_j \right),$$

где

$$a_{ij} = (\phi_i, H\phi_j), \quad b_{ij} = (\phi_i, \phi_j).$$

Тем самым поиск минимаксных решений сводится к вычислению соответствующих собственных значений обобщенной задачи на собственные значения:

$$\mathbf{A}x = \lambda \mathbf{B}x, \quad (5)$$

матрицы  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  составлены из коэффициентов  $a_{ij}$  и  $b_{ij}$  соответственно.

Векторы  $\phi_k$  могут зависеть от нелинейных параметров  $\omega$ . В этом случае для каждого фиксированного  $\omega$  и конкретного номера собственного значения  $k$  решается задача (5) и выбирается  $\lambda_k(\omega)$ , затем данная величина минимизируется по всем значениям нелинейных параметров:

$$\lambda_k = \inf_{\omega} \lambda_k(\omega).$$

Для оценок Ритца выполнено одно важное свойство:

$$\mu_k(H) \leq \lambda_k. \quad (6)$$

Отсюда можно сделать вывод, что оценки Ритца являются оценками сверху. Для базисных функций, зависящих от нелинейных параметров, неравенство (6) следует из

$$\mu_k(H) \leq \inf_{\omega} \lambda_k(\omega) = \lambda_k.$$

Строгое доказательство применимости вышеприведенной теоремы к задачам нерелятивистской квантовой механики с гамильтонианом вида

$$H = - \sum_{i=1}^n \frac{\Delta_i}{2m_i} + V(r_1, \dots, r_n) \quad (7)$$

и потенциалом достаточно общего вида, включающего в том числе кулоновский потенциал взаимодействия между частицами, получено в работах Т. Като [5].

## 2. ОБОБЩЕННОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ХИЛЛЕРААСА

Для состояний с произвольным полным орбитальным моментом системы  $L$  мы используем обобщенное разложение Хиллерааса [8]

$$\psi(r_1, r_2) = \sum_{l_1+l_2=\mathcal{L}} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(r_1, r_2) \left[ e^{-\alpha r_1 - \beta_2 - \gamma r_{12}} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{lmn} r_1^l r_2^m r_{12}^n \right], \quad (8)$$

где  $\mathcal{L} = L$  для состояний «нормальной» пространственной четности  $\Pi = (-1)^L$  и  $\mathcal{L} = L + 1$  для состояний «аномальной» пространственной четности  $\Pi = (-1)^{L+1}$ . Здесь функции  $\mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}$  есть *регулярные биполярные сферические гармоника* [6], зависящие от двух угловых координат:

$$\mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(r_1, r_2) = r_1^{l_1} r_2^{l_2} \{Y_{l_1}(\hat{r}_1) \otimes Y_{l_2}(\hat{r}_2)\}_{LM};$$

оператор пространственной четности  $P\psi = \pi\psi$  действует на пространственные координаты следующим образом:  $P(r_1, r_2) \rightarrow (-r_1, -r_2)$ . Удобство использования функций  $\mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}$  обусловлено тем, что они правильно воспроизводят поведение волновой функции при  $r_1 \rightarrow 0$  (или  $r_2 \rightarrow 0$ ), оставляя для выражения, входящего в квадратные скобки в уравнении (8), разумное требование ограниченности функции в области изменения переменных.

Происхождение названий «нормальной» и «аномальной» пространственной четности объясняется следующими соображениями. Как можно видеть из разложения (8), состояния «аномальной» четности могут распадаться на кластеры с угловым моментом связанной пары  $l \geq 1$ . В атомной физике основное состояние пары частиц обладает нулевым угловым моментом, а граница непрерывного спектра в системе трех частиц определяется энергией основного состояния пары с наиболее глубоким уровнем энергии либо нулевой энергией в случае отсутствия связанных пар. Из этого следует, что связанные состояния «аномальной» четности располагаются ниже порога кластера с возбужденным состоянием пары и обычно присутствуют в непрерывном спектре системы трех частиц. Поэтому включение в гамильтониан любого оператора взаимодействия, нарушающего пространственную четность, приводит к тому, что эти состояния растворяются в непрерывном спектре, образуя резонансы.

Вычисление матричных элементов сводится к вычислению интегралов вида

$$\Gamma_{lmn}(\alpha, \beta, \gamma) = \int \int r_1^l r_2^m r_{12}^n e^{-\alpha r_1 - \beta r_2 - \gamma r_{12}} dr_1 dr_2 dr_{12}. \quad (9)$$

Дифференцируя по  $\alpha$  под знаком интеграла, получаем, что

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) \Gamma_{l-1, mn}(\alpha, \beta, \gamma) = \Gamma_{lmn}(\alpha, \beta, \gamma),$$

и таким образом все интегралы могут быть вычислены из  $\Gamma_{000}$  простым дифференцированием:

$$\begin{aligned} \Gamma_{lmn}(\alpha, \beta, \gamma) &= \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^l \left(-\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial \gamma}\right)^n \Gamma_{000}(\alpha, \beta, \gamma) = \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^l \left(-\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial \gamma}\right)^n \left[ \frac{2}{(\alpha + \beta)(\beta + \gamma)(\gamma + \alpha)} \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Далее, следуя работе [7], используем рекуррентное соотношение:

$$\Gamma_{lm}(\alpha, \beta) = \frac{1}{\alpha + \beta} \left[ l\Gamma_{l-1, m} + m\Gamma_{l, m-1} + \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^l \left(-\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^m f(\alpha, \beta) \right].$$

Применяя его поочередно к каждой паре переменных  $\alpha, \beta$  и  $\gamma$ , приходим к рекуррентной схеме вычисления интегралов для неотрицательных значений параметров  $(l, m, n)$ :

$$\begin{aligned} \Gamma_{lmn} &= \frac{1}{\alpha + \beta} [l\Gamma_{l-1, m, n} + m\Gamma_{l, m-1, n} + B_{lmn}], \\ B_{lmn} &= \frac{1}{\alpha + \beta} [lB_{l-1, m, n} + mB_{l, m-1, n} + A_{lmn}], \\ A_{lmn} &= \delta_{l0} \frac{2(m+n)!}{(\beta + \gamma)^{m+n+1}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Важной особенностью соотношений (11) является положительность входящих в них величин  $A_{lmn}$ ,  $B_{lmn}$  и  $\Gamma_{lmn}$ , что делает рекуррентную схему (11) вычисления интегралов устойчивой к погрешностям округления в компьютерных вычислениях.

Усреднение по угловым переменным для состояний с ненулевым полным орбитальным моментом системы, сводящее вычисление матричных элементов к интегралам вида (9), было рассмотрено Г. Дрейком [8]. Позднее В. Д. Эфрос [9] предложил компактную и эффективную рекуррентную схему, реализующую эту редукцию.

Вариационные разложения, которые рассматривались выше, наиболее эффективны для исследования систем, состоящих из двух электронов и тяжелого ядра. Далее подробнее рассмотрим их разновидность, называемую «экспоненциальное разложение». Для  $S$ -состояний это разложение выглядит так:

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}, \quad (12)$$

параметры в экспоненте выбираются тем или иным образом. В ранних работах [10], в которых использовано разложение (12), полученное представление связывали с дискретизацией интегрального представления волновой функции:

$$\psi(x_1, \dots, x_A) = \int \varphi(x_1, \dots, x_A; \alpha) f(\alpha) d\alpha, \quad (13)$$

предложенного еще Дж. Грифффином и Дж. Уилером [11] в 1957 г. При этом параметры  $\alpha_n$ ,  $\beta_n$  и  $\gamma_n$  выбирались в соответствии с различными квадратурными формулами интегрирования (13). Систематическое исследование разложения (12) с использованием параметров, генерируемых с помощью псевдослучайных чисел, было дано в [12]. В предлагаемом подходе нелинейные параметры из уравнения (12) генерируются с помощью следующих простых формул:

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\alpha} \right] (A_2 - A_1) + A_1 \right], \\ \beta_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\beta} \right] (B_2 - B_1) + B_1 \right], \\ \gamma_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\gamma} \right] (C_2 - C_1) + C_1 \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

$[\cdot]$  обозначает дробную часть, а  $p_\alpha, p_\beta$  и  $p_\gamma$  — некоторые простые числа. Преимущество этих простых генераторов псевдослучайных чисел состоит в воспроизводимости результатов вариационных вычислений. Скорость сходимости экспоненциального разложения с псевдослучайной стратегией выбора нелинейных параметров (14) необычайно высока на наборах базисных функций умеренных размерностей (до 100–200 пробных функций). К недостаткам метода следует отнести быстрое вырождение базиса, что приводит к потере устойчивости вычислений в арифметике двойной точности уже при размерностях базиса  $N = 200$ .

Для удобства дальнейших ссылок выпишем экспоненциальное вариационное разложение в полном виде с учетом угловой зависимости волновой функции, описывающей

вращательные степени свободы:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{l_1+l_2=\mathcal{L}} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}), \\ G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}) &= \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}},\end{aligned}\quad (15)$$

где  $\mathcal{L} = L$  или  $L + 1$  в зависимости от пространственной четности состояния, а комплексные параметры в экспоненте генерируются псевдослучайным образом (14).

Как уже отмечалось выше, замедление сходимости наблюдается при вычислении основного состояния атома гелия. Это обусловлено тем, что волновая функция при  $r_1, r_2 \rightarrow 0$  имеет логарифмическую особенность:  $\rho^2 \ln \rho$ , где  $\rho = \sqrt{r_1^2 + r_2^2}$  — гиперрадиус двух электронов [13]. Чтобы исправить создавшееся положение, необходимо строить многослойное вариационное разложение, состоящее из нескольких независимых наборов базисных функций, оптимальные вариационные нелинейные параметры для которых ищутся независимым образом. Так, каждый набор базисных функций определяет оптимальное приближение в определенной области координат системы. В случае с атомом гелия области следует выбирать вложенные друг в друга, все более компактные по гиперрадиусу ( $\rho < \rho_n = a^n$ , где  $a \approx 0,1$ ,  $n = 1, 2, 3 \dots$ ). Подобная стратегия приводит к тому, что экспоненциальное разложение становится эффективным и универсальным методом решения для связанных состояний в квантовой задаче трех тел с кулоновским взаимодействием. Возможности этого метода были продемонстрированы в [14, 15].

### 3. МЕТОД ОБРАТНОЙ ИТЕРАЦИИ

Как было показано в разд. 1, стационарное уравнение Шредингера с помощью процедуры Ритца сводится к обобщенной симметричной задаче на собственные значения:

$$\mathbf{A}x = \lambda \mathbf{B}x, \quad (16)$$

где  $\mathbf{A}$  — симметричная,  $\mathbf{B}$  — симметричная положительно определенная матрицы. В принципе для решения уравнения (16) можно использовать стандартную процедуру диагонализации. Для этого матрица  $\mathbf{B} = L \cdot L^T$  раскладывается в произведение верхней и нижней треугольных матриц, и задача сводится к стандартной симметричной задаче на собственные значения:

$$\mathbf{A}'y = \lambda y, \quad (17)$$

$$\mathbf{A}'y = L^{-1} \mathbf{A} L^{-T}, \quad x = L^T y. \quad (18)$$

Однако этот метод является излишне трудоемким ( $\sim 20N^3$  операций умножения) и менее устойчивым к погрешностям вычислений. Если требуется только одно собственное значение (собственный вектор), то эффективным методом решения ( $\sim N^3/6$  операций умножения) является метод обратной итерации

$$(A - \mu)x_k^{(n+1)} = s^{(n)} x_k^{(n)}, \quad (19)$$

здесь скалярный множитель  $s^{(n)}$  выбирается так, чтобы  $\|x_k^{(n+1)}\| = 1$ . Если  $\mu$  близко к точному собственному значению  $\lambda_k$ , то последовательность векторов  $x_k^{(n)}$  быстро сходится к точному собственному вектору  $x_k$ , а  $\lambda_k^{(n)} = (x_k^{(n)}, Ax_k^{(n)})$  — к точному значению  $\lambda_k$ .

Чтобы показать это, можно без ограничения общности считать, что матрица  $\mathbf{A}$  — диагональная, тогда решение можно выписать в явном виде

$$x_k^{(n)} = c_n \left( \left( \frac{\lambda_k - \mu}{\lambda_1 - \mu} \right)^n u_1, \dots, u_k, \dots, \left( \frac{\lambda_k - \mu}{\lambda_n - \mu} \right)^n u_n \right)^T. \quad (20)$$

Из уравнения (20) видно, что все компоненты вектора  $x_k^{(n)}$  стремятся к нулю, кроме  $u_k$ , который остается равным единице, при данных условиях нормировки. Практические вычисления показывают, что этот метод является также наиболее устойчивым к погрешностям округления, или вычислительным погрешностям.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты численных расчетов энергии ионизации для  $S$ -,  $P$ - и  $D$ -состояний атома гелия приводятся в табл.1. Вычисления были выполнены с помощью метода обратной итерации. Вариационные параметры оптимизировались вручную. Следует отметить,

Таблица 1. Нерелятивистские уровни энергии  $S$ -,  $P$ - и  $D$ -состояний атома гелия.  $N$  — число базисных функций

Состояние	Базис ( $N$ )	$E_{nr}$
$1^1S$	2000	-2,903 724 377 034 119 598 28
$1^1S$	3000	-2,903 724 377 034 119 598 31
$2^1S$	2000	-2,145 974 046 054 417 415 77
$2^1S$	3000	-2,145 974 046 054 417 415 81
$2^3S$	1500	-2,175 229 378 236 791 305 74
$2^3S$	2500	-2,175 229 378 236 791 305 74
$2^1P$	3000	-2,123 843 086 498 101 359 24
$2^1P$	4000	-2,123 843 086 498 101 359 25
$2^3P$	3000	-2,133 164 190 779 283 205 11
$2^3P$	4000	-2,133 164 190 779 283 205 14
$3^1S$	2500	-2,061 271 989 740 908 650 15
$3^1S$	3000	-2,061 271 989 740 908 650 72
$3^3S$	2500	-2,068 689 067 472 457 192 00
$3^3S$	3000	-2,068 689 067 472 457 192 00
$3^1P$	3000	-2,055 146 362 091 943 536 74
$3^1P$	4000	-2,055 146 362 091 943 536 89
$3^3P$	2500	-2,058 081 084 274 275 331 26
$3^3P$	3500	-2,058 081 084 274 275 331 34
$3^1D$	3000	-2,055 620 732 852 246 489 39
$3^1D$	4000	-2,055 620 732 852 246 489 39
$3^3D$	3000	-2,055 636 309 453 261 327 11
$3^3D$	4000	-2,055 636 309 453 261 327 11

Таблица 2. Исследование сходимости нерелятивистской энергии  $1^1S$ -состояний атома гелия

Базис ( $N$ )	$E_{nr}$	$\Delta E_{nr}$
1600	-2,903 724 377 034 119 597 961	
1800	-2,903 724 377 034 119 598 225	264
2000	-2,903 724 377 034 119 598 282	57
2400	-2,903 724 377 034 119 598 307	25
3000	-2,903 724 377 034 119 598 311	4

Таблица 3. Исследование сходимости нерелятивистской энергии  $2^1P$ -состояний атома гелия

Базис ( $N$ )	$E_{nr}$	$\Delta E_{nr}$
2000	-2,123 843 086 498 101 358 687	
2500	-2,123 843 086 498 101 359 180	493
3000	-2,123 843 086 498 101 359 237	57
4000	-2,123 843 086 498 101 359 246	9

что оптимальные вариационные параметры для разных состояний отличаются друг от друга, при этом точность расчетов существенно зависит (выигрыш 5–8 знаков) от выбора оптимальных вариационных параметров для данного связанного состояния. Оптимизация вариационных параметров осуществлялась на базисах с  $N = 1500, 2000, 2500, 3000$  функций. При вычислении приведенных в таблице состояний было использовано от трех до пяти «слоев» базисных функций.

Чтобы решить проблему численной неустойчивости расчетов при больших значениях  $N$ , использовались разработанные одним из авторов данной статьи модули программ четверной и шестерной точности (соответственно 32 и 48 десятичных цифр).

В табл. 2 и 3 исследуется сходимость значения нерелятивистской энергии в зависимости от числа базисных функций  $N$ . В третьей колонке приводится разность между двумя соседними значениями, вычисленная по последним приведенным в табл. 1 цифрам. Из табл. 1–3 хорошо видно, что скорость сходимости высокая, и это позволяет получать результаты с очень высокой точностью.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вариационные волновые функции связанных состояний были получены решением уравнения Шредингера для квантовой задачи трех тел с кулоновским взаимодействием с помощью вариационного подхода, основанного на экспоненциальном разложении с параметрами экспонент, выбираемыми псевдослучайным образом. Представлены расчеты нерелятивистских уровней энергий для атома гелия. Численные результаты расчетов приведены в табл. 1. Были произведены исследования сходимости в зависимости от числа пробных функций, что позволяет утверждать, что точность достигает  $10^{-19} - 10^{-20}$  а. е. Эта точность достаточна для получения надежных теоретических предсказаний.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schwartz C. Further Computations of the He Atom Ground State. arXiv:math-ph/0605018. 2006.
2. Hori M. et al. Two-Photon Laser Spectroscopy of Antiprotonic Helium and the Antiproton-to-Electron Mass Ratio // Nature. 2011. V. 475. P. 484.

3. *Friar J. L.* The Structure of Light Nuclei and Its Effect on Precise Atomic Measurements // *Can. J. Phys.* 2002. V. 80. P. 1337.
4. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Т. 4. М.: Мир, 1982.
5. *Kato T.* Fundamental Properties of Hamiltonian Operators of Schrödinger Type // *Trans. Am. Math. Soc.* 1951. V. 70. P. 195.
6. *Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента М.: Наука, 1975.
7. *Sack R. A., Roothaan C. C. J., Kolos W.* Recursive Evaluation of Some Atomic Integrals // *J. Math. Phys. A.* 1967. V. 8. P. 1093.
8. *Drake G. W. F.* Angular Integrals and Radial Recurrence Relations for Two-Electron Matrix Elements in Hylleraas Coordinates // *Phys. Rev. A.* 1978. V. 18. P. 820.
9. *Эфрос В. Д.* Задача трех тел. Обобщенное экспоненциальное разложение, произвольные состояния в коррелированном базисе и энергии связи мезомолекул // *ЖЭТФ.* 1985. Т. 90. С. 10.
10. *Rosenthal C. M.* The Reduction of the Multi-Dimensional Schrödinger Equation to a One-Dimensional Integral Equation // *Chem. Phys. Lett.* 1971. V. 10. P. 381–386.
11. *Griffin J. J., Wheeler J. A.* Collective Motions in Nuclei by the Method of Generator Coordinates // *Phys. Rev.* 1957. V. 108. P. 311.
12. *Thakkar A. J., Smith V. H., Jr.* Compact and Accurate Integral-Transform Wave Functions. The  $1^1S$  State of the Helium-Like Ions from  $H^-$  through  $Mg^{10+}$  // *Phys. Rev. A.* 1977. V. 15. P. 1.
13. *Bartlett J. H.* The Helium Wave Equation // *Phys. Rev.* 1937. V. 51. P. 661;  
*Фок В. А.* Об уравнении Шредингера для атома гелия // *Изв. АН СССР. Сер. физ.* 1954. Т. XVIII. С. 161.
14. *Korobov V. I.* Coulomb Three-Body Bound-State Problem: Variational Calculations of Nonrelativistic Energies // *Phys. Rev. A.* 2000. V. 61. P. 064503.
15. *Korobov V. I.* Nonrelativistic Ionization Energy for the Helium Ground State // *Phys. Rev. A.* 2002. V. 66. P. 024501.

Получено 17 марта 2015 г.