

УДК 539.17

Численное исследование дискретного спектра оператора Гамильтона водородоподобного атома в квантовой механике Курышкина

А. А. Гусев^{*}, А. В. Зорин[†], К. П. Ловецкий[†], Н. П. Третьяков[†]

^{*} Объединённый институт ядерных исследований
Россия, 141980, Моск. область, Дубна, ул. Жолио Кюри, 6

[†] Российский университет дружбы народов
Россия, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6

В работе обсуждается поведение потенциала одночастичного приближения уравнения Шредингера для описания оптического спектра многоэлектронного атома с одним оптическим электроном. Свойства дискретного и непрерывного спектра Гамильтона-Курышкина позволяет применить для численного вычисления собственных значений два альтернативных метода. Сравнение результатов и их обсуждение свидетельствуют о перспективности использования предложенной модели для описания оптических характеристик атомных систем с одним оптическим электроном.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: оптические характеристики атомной системы, потенциал одночастичного приближения, мультипольное представление.

Введение

Атом с более чем одним элементом представляет собой сложную систему взаимодействующих друг с другом электронов в поле ядра. Для такого случая подается строгому рассмотрению лишь состояния системы в целом характеризующиеся полным орбитальным моментом $\vec{L}$ постоянным спином $\vec{S}$. Тем не менее, с хорошей точностью определяются состояния отдельного электрона в эффективном поле ядра и остальных электронов, образующих атомный остаток. Состояния электрона зависят от орбитального момента l , они нумеруются в порядке возрастания энергии с помощью главного квантового числа n . При этом последовательность возрастания уровней энергии E_n с различными l в сложных атомах отличается от последовательности возрастания уровней энергии в атоме водорода, когда E_n не зависит от l и при $n_1 > n_2$ имеет место $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$. В этом смысле, о распределении электронов в атоме по состояниям с различными n и l говорят, как об электронной конфигурации. О совокупности электронов, заполняющих все состояния с заданными n и l говорят, как о замкнутой оболочке типа (n, l) . При одинаковой электронной конфигурации (n, l) с различными значениями L и S , энергии атомных уровней различаются на малую величину, обусловленную взаимодействием электронов. Взаимное расположение таких термов удовлетворяет «правилу заполнения Бора» (его часто называют правилом Маделунга или эмпирическим правилом Хунда): наименьшей энергией обладает терм с наибольшим значением S , а при заданном S — наибольшим значением L .

Такая структура атомных уровней дается описанием релятивистских эффектов в применении к атомным термам.

На сдвиге уровней оказывает влияние как поляризация «атомного остова», так и его размазанность. Статистический метод Томаса-Ферми дает хорошие качественные и удовлетворительное количественное описание этих сдвигов. Тем же статистическим методом Клечковский доказал зависимость энергетических термов от пар $(n + l, n)$. Этому соответствует описание атомных объектов с одним

внешним электроном в параболических и сплюснутых сфероидальных координатах [1]. В работе [2] В. А. Фок рассмотрел приближенную внутреннюю симметрию водородной задачи для многоэлектронного атома. При этом эффективное поля для всех электронов заполненной оболочки с заданным главным числом n считалось кулоновским с некоторым эффективным зарядом ядра Z^* , который рассматривался как варьируемый параметр. Это позволило с хорошей точностью рассчитать согласованное поле для валентного электрона щелочных металлов.

Ю.Н. Демков и В.Н. Островский в работах [3, 4] развили этот подход, основанный на изучении скрытых симметрий. Они выбирали эмпирический одноэлектронный потенциал в форме

$$V(r) = -\frac{RN(N+1)}{2r(r+R)^2}$$

с некоторой константой R и $N = n + l$. При выборе $\frac{1}{4}R^2N(N+1) \cdot 2 = ZR^3$ получается $R = N(N+1)/2Z$, и потенциал ведет себя в нуле как

$$V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -Z/r,$$

а на бесконечности как $(-c/r^3)$.

Рассмотренный модельный потенциал позволил объяснить правило Маделунга $(n+l, n)$ для нейтральных атомов без привлечения феноменологических рассуждений.

Данный подход был развит в работах [5, 6]. Авторы преобразовали уравнение Демкова-Островского в новую форму с сокращением всех динамических симметрий, однако допускающую лучшее приближение спектральных данных. В заключение авторы [5, 6] отметили хорошее качественное совпадение своей модели с экспериментом и удовлетворительное количественное, а так же отметим, что их модификация модели Демкова-Островского не единственна.

В данной работе мы предлагаем, исходя из совершенно других предпосылок, ещё одну модель описания водородоподобных атомных объектов.

1. Квантовая модель Курышкина задачи Кеплера

В квантовой механике Курышкина (КМК) правило квантования задается с помощью вспомогательной функции [7–9]. В первых работах [10–13], посвященных конкретизации правила квантования, В.В. Курышкин и его ученики использовали метод теории возмущений и представление вспомогательных функций в виде(сферически-симметричных) прямоугольных ступенек. В последующем развитие вычислительной техники и создание программных средств для аналитических вычислений позволили расширить класс функций, которые можно использовать в качестве вспомогательных.

В цикле работ [14–17], при участии одного из соавторов, были проведены исследования о количестве и виде вспомогательных функций при квантовании по правилу Курышкина задачи Кеплера. В итоге оказалось, что функции, впервые рассмотренные В.А. Фоком [18], а впоследствии названные Штурмовскими [19–21], лучше других подходят для моделирования водородоподобных квантовых объектов с одним оптическим электроном.

Квантовая модель Курышкина задачи Кеплера описывается [16, 17] оператором Гамильтона вида

$$O(H) = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z}{r} + Z \sum_k C_k^2 \left(\frac{1}{2b_k^2} + V_k(r, \cos \theta) \right). \quad (1)$$

В этом разложении выполняется условие квантования Курышкина $\sum C_k^2 = 1$.

Явный вид оператора $O(H)$ был получен с помощью аналитических вычислений в рамках пакета символьных вычислений QDF01, разработанный с

участием двух соавторов. С работой пакета можно познакомиться на сайте <http://www.mathmod.sci.pfu.edu.ru/> научно-исследовательской Лаборатории вычислительной физики и математического моделирования РУДН.

Одной из движущих целей данной работы является моделирование оптических свойств атомных объектов с одним оптическим электроном. Чтобы более детально приступить к решению данной задачи, напомним некоторые классические результаты описания спектральных характеристик атомных объектов, опубликованные в книгах [22–24]. Наиболее приближенным к целям данной работы являются результаты, изложенные в [23], о «мультипольном виде» эвристического потенциала взаимодействия оптического электрона с атомным остатком. Именно мультипольное разложение возникает при моделировании по правилу квантования Курышкина задачи Кеплера. Причем в возникающем при этом мультипольном разложении потенциала оператора Гамильтона присутствуют только четные мультипольности.

Факт мультипольности потенциала в операторе Гамильтона-Курышкина не зависит от вида и количества вспомогательных функций.

Во всех вариантах квантовой модели Курышкина задачи Кеплера оператор Гамильтона-Курышкина является существенно самосопряженным ограниченным снизу оператором, дискретный спектр которого целиком расположен ниже существенно непрерывной части спектра [14, 15]. В качестве вспомогательных функций использовались скалярные кратные Штурмовских функций, совпадающие с обычными Штурмовскими функциями [20, 21], деленными на радиус r , я последующей заменой $r \mapsto r/b_k$, так что первые пять имеют вид:

$$\begin{aligned}\varphi_1(r, \theta, \varphi) &= c_1 S_{10}(r/b_1) Y_{00}(\theta, \varphi), \\ \varphi_2(r, \theta, \varphi) &= c_2 S_{20}(r/b_2) Y_{00}(\theta, \varphi), \\ \varphi_3(r, \theta, \varphi) &= c_3 S_{21}(r/b_3) Y_{10}(\theta, \varphi), \\ \varphi_4(r, \theta, \varphi) &= c_4 S_{21}(r/b_4) Y_{11}(\theta, \varphi), \\ \varphi_5(r, \theta, \varphi) &= c_5 S_{21}(r/b_5) Y_{1-1}(\theta, \varphi).\end{aligned}$$

Использование таких функций приводит к следующему виду частичных потенциалов:

$$\begin{aligned}V_1(r, \theta, \varphi) &= \frac{Ze^2 \exp\left(-\frac{2r}{b_1}\right) (r + b_1)}{b_1 r} - \frac{Ze^2}{r}, \\ V_2(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \frac{Ze^2 \exp\left(-\frac{2r}{b_2}\right) (3b_2^2 r + 2b_2^3 + 2r^2 b_2 + 2r^3)}{b_2^3 r} - \frac{Ze^2}{r}, \\ V_3(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{2} Ze^2 (-b_3^2 r^3 - 4b_3^3 r^2 + 12 \cos(\theta)^2 b_3^2 r^3 + 9b_3^5 \cos(\theta)^2 + \\ &\quad + 18 \cos(\theta)^2 b_3^3 r^2 + 18b_3^4 \cos(\theta)^2 r + 2r^5 \cos(\theta)^2 + 6r^4 \cos(\theta)^2 b_3 - \\ &\quad - 3b_3^5 - 6b_3^4 r) \exp\left(-\frac{2r}{b_3}\right) / (b_3^3 r^3) - \frac{Ze^2}{r} - \frac{9}{2} \frac{Ze^2 b_3^2 \cos(\theta)^2}{r^3} + \frac{3Ze^2 b_3^2}{2r^3}, \\ V_4(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{4} Ze^2 (-10b_4^2 r^3 - 10b_4^3 r^2 - 6r^4 b_4 - 2r^5 + 12 \cos(\theta)^2 b_4^2 r^3 + \\ &\quad + 9b_4^5 \cos(\theta)^2 + 18 \cos(\theta)^2 b_4^3 r^2 + 18b_4^4 \cos(\theta)^2 r + 2r^5 \cos(\theta)^2 + \\ &\quad + 6r^4 \cos(\theta)^2 b_4 - 3b_4^5 - 6b_4^4 r) \exp\left(-\frac{2r}{b_4}\right) / (b_4^3 r^3) - \frac{Ze^2}{r} + \\ &\quad + \frac{9}{4} \frac{Ze^2 b_4^2 \cos(\theta)^2}{r^3} - \frac{3Ze^2 b_4^2}{4r^3}, \\ V_5(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{4} Ze^2 (-10b_5^2 r^3 - 10b_5^3 r^2 - 6r^4 b_5 - 2r^5 + 12 \cos(\theta)^2 b_5^2 r^3 +\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 9b_5^5 \cos(\theta)^2 + 18 \cos(\theta)^2 b_5^3 r^2 + 18b_5^4 \cos(\theta)^2 r + 2r^5 \cos(\theta)^2 + \\
& + 6r^4 \cos(\theta)^2 b_5 - 3b_5^5 - 6b_5^4 r \exp\left(-\frac{2r}{b_5}\right) / (b_5^3 r^3) - \frac{Ze^2}{r} + \\
& + \frac{9Ze^2 b_5^2 \cos(\theta)^2}{4r^3} - \frac{3Ze^2 b_5^2}{4r^3}.
\end{aligned}$$

Отметим, что потенциалы V_4 и V_5 совпадают, если не считать различными варьируемые параметры b_4 и b_5 .

Чтобы облегчить обсуждение свойств получившегося оператора, приведем асимптотики частичных мультипольных вкладов потенциала.

$$\begin{aligned}
V_1(r \mapsto 0, \theta, \varphi) &= -\frac{Z}{b_1} + \frac{2Z}{3b_1^3} r^2 - \frac{2Z}{3b_1^4} r^3 + \frac{2Z}{5b_1^5} r^4 + O(r^5), \\
V_2(r \mapsto 0, \theta, \varphi) &= -\frac{Z}{4b_2} + \frac{Z}{12b_2^3} r^2 - \frac{Z}{12b_2^4} r^3 + \frac{7Z}{160b_2^5} r^4 + O(r^5), \\
V_3(r \mapsto 0, \theta, \varphi) &= -\frac{Z}{4b_3} - \frac{Z(3 \cos^2 \theta - 1)}{120b_3^3} r^2 + \frac{Z(10 \cos^2 \theta - 1)}{1120b_3^5} r^4 + O(r^5), \\
V_4(r \mapsto 0, \theta, \varphi) &= -\frac{Z}{4b_4} + \frac{Z(3 \cos^2 \theta - 1)}{240b_4^3} r^2 - \frac{Z(5 \cos^2 \theta - 4)}{1120b_4^5} r^4 + O(r^5),
\end{aligned}$$

а также

$$\begin{aligned}
V_1(r \mapsto \infty, \theta, \varphi) &= -\frac{Z}{r} + O\left(\exp\left(-\frac{2r}{b_1}\right)\right), \\
V_2(r \mapsto \infty, \theta, \varphi) &= -\frac{Z}{r} + O\left(\exp\left(-\frac{r}{b_2}\right)\right), \\
V_3(r \mapsto \infty, \theta, \varphi) &= -\frac{Z}{r} - \frac{6Zb_3^2(3 \cos^2 \theta - 1)}{r^3} + O\left(\exp\left(-\frac{r}{b_3}\right)\right), \\
V_4(r \mapsto \infty, \theta, \varphi) &= -\frac{Z}{r} + \frac{3Zb_4^2(3 \cos^2 \theta - 1)}{r^3} + O\left(\exp\left(-\frac{r}{b_3}\right)\right).
\end{aligned}$$

Обсуждение будет опубликовано в одной из следующих публикаций.

2. Зависимость спектра Оператора Гамильтона–Курышкина от параметров модели

В работах [25–27] получены оценки собственных значений оператора $O(H)$. Уточнить их можно лишь применив тот или иной метод численного решения уравнения $O(H)\psi = \lambda\psi$. Дискретный спектр оператора $O(H)$ расположен ниже его непрерывного спектра [26, 27]. Благодаря этому факту минимаксный метод Рэля, применимый к ограниченным снизу самосопряженным в существенном операторам [28], вначале приводит к собственным значениям, а лишь после их исчерпания — к нижней границе непрерывного спектра. Численная реализация метода Рэля возможна после конечномерной аппроксимации матрицей Ритца исходного оператора $O(H)$. В качестве координатных функций для построения матрицы Ритца мы выбираем Штурмовские функции, зависящие от энергетического параметра E [20], так как они образуют ортонормированный базис в пространстве представления оператора $O(H)$.

Матрица Ритца $\mathbf{M}_N[c_1, \dots, c_n; b_1, \dots, b_n; E](H)$ размерности $N \times N$ в координатных функциях $S_{nl}(r; E)Y_{lm}(\theta, \varphi)$, зависящих от параметра $E \in (-\infty, 0)$, для оператора $O(H)$, зависящего от $2n$ параметров $(c_1, \dots, c_n; b_1, \dots, b_n)$ и вспомогательных функций $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$, вычисляется с помощью уже упомянутого пакета QDF01. При всех значениях операторов матрица $M_N(H)$ является эрмитовой

сильно разреженной (например, в случае матриц размера 30×30 , из 900 элементов порядка 800 равны нулю), почти диагональной матрицей (см., например, [29, 30]). Спектр $\lambda_1^N, \dots, \lambda_N^N$ матрицы $M_N(H)$ можно вычислить приближенно с помощью различных алгоритмов, мы выбрали метод Якоби, который работает успешно для комплексных матриц. Вычисленные собственные значения λ_j зависят от параметров $(c_1, \dots, c_n; b_1, \dots, b_n; E)$.

Следующим этапом моделирования оптических свойств водородоподобных атомных объектов является фиттирование вычисленного спектра $\{\lambda_j\}$ матрицы Рэлея–Ритца к экспериментально наблюдаемому спектру конкретного элемента. С этой целью по параметрам $(\vec{c}, \vec{b}, E)$ минимизируем целевую функцию

$$F[\vec{c}, \vec{b}, E] = \sum_{j=1}^{N_0 < N} \left(\lambda_j(\vec{c}, \vec{b}, E) - \lambda_j^{\text{эксп}} \right)^2 / \left(\lambda_j^{\text{эксп}} \right)^2.$$

Для начала мы взяли экспериментальные спектры лития и натрия из Atomic Spectra Database Levels (<http://physics.hist.gov/PhysRefData/Handbook/index.html>) и посмотрели на зависимость целевой функции от параметров. Выяснилось, что наиболее чувствительной она оказалась к параметру E координатных функций, и в области физически интерпретируемых значений $E \in (-\infty, 0)$ целевая функция является унимодальной, выпуклой вниз. Этот характер выполняется при любом наборе вспомогательных функций и при любой размерности матрицы Ритца.

Для более детального изучения мы остановились на пяти вспомогательных функциях и на размерностях матрицы Ритца равных 30×30 и 55×55 , когда численные процедуры диагонализации матрицы и минимизации целевой функции выполняются с помощью пакета **Maple** на персональном компьютере.

При размерности матриц Ритца 55×55 с точностью до третьего знака моделировались первые пять экспериментальных спектральных линий, при размерности 30×30 с такой же точностью моделировались экспериментальные данные с фиксированным значением $n + l$. Для моделирования всего экспериментально измеримого спектра требуются матрицы Рэлея–Ритца на порядок большей размерности. Для численной реализации в пакете **QDF01** создана процедура экспорта формируемой матрицы в код языка **Fortran** и языка **C++**.

Результаты предварительного моделирования в рамках **QDF01** спектральных линий нейтрального лития с $n + l = 2$ привели к локальному минимуму: $E = -0,88$, $b_1 = b_3 = 1.333400002$, $c_1 = 1/6$, $c_3 = 5/6$, $c_2 = c_4 = c_5 = 0$ (последние равенства исключают из процедуры вычислений параметры b_2, b_4, b_5).

Аналогичные вычисления для первых пяти спектральных линий натрия привели к локальному минимуму: $E = -0,44$, $b_1 = b_3 = 1.375187695$, $c_1 = 0.2499898275$, $c_3 = 1.0 - c_1$.

Получившиеся при этом собственные значения матрицы $M_N(H)$ сравнивались с соответствующими собственными значениями оператора $O(H)$, вычисленными с помощью программы **FECCDE**, разработанной в ОИЯИ с участием одного из соавторов данной работы.

3. Вычисление спектра методом Канторовича

Гамильтониан (1) представим в следующем виде

$$O(H) = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z}{r} + B_0(r, c_1, c_2, c_3, c_4, b) + B_2(r, c_3, c_4, b) \cos^2 \theta. \quad (2)$$

Решение уравнения Шредингера

$$O(H)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (3)$$

ищем в виде разложения Галёркина

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{l_{\max}} \chi_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4)$$

где $Y_{lm} \in \mathbf{L}_2(\mathbf{S}_2)$ базис сферических функций, а выбор необходимого количества базисных функций $l_{\max}$ зависит от значений параметров c_1, c_2, c_3, c_4, b и значения требуемой точности вычисления $R_{tol} = \varepsilon$ собственных значений и собственных функций. В результате подстановки (4) в (3) и усреднения по конечному базису получаем систему $l_{\max} + 1$ обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка относительно неизвестных коэффициентов $\chi^T(r) = \{\chi_0(r), \chi_1(r), \dots, \chi_{l_{\max}}(r)\}$:

$$(H^{(0)} + H^{(1)}(r, c_1, c_2, c_3, c_4, b) - E)\chi(r) = 0 \quad (5)$$

с граничными условиями на конечном интервале

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \chi(r) = 0, \quad \chi(r_{\max}) = 0 \quad (6)$$

и условием нормировки

$$\int_0^{r_{\max}} \chi^T(r) \chi(r) = 1, \quad (7)$$

аппроксимирующие решение исходной задачи на полуоси.

Матричные элементы матриц $H^{(0)}$ и $H^{(1)}$ размерностью $(l_{\max} + 1) \times (l_{\max} + 1)$ заданы выражениями

$$H_{ll'}^{(0)}(r) = \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right] \delta_{ll'},$$

$$H_{ll'}^{(1)}(\tilde{r}) = B_0(r, c_1, c_2, c_3, c_4, b) \delta_{ll'} + B_2(r, c_3, c_4, b) \langle l | \cos^2 \theta | l' \rangle,$$

$$\begin{aligned} \langle l | \cos^2 \theta | l' \rangle = & \left\{ 1 - \left[1 - \frac{(l+1)^2}{4(l+1)^2 - 1} - \frac{l^2}{4l^2 - 1} \right] \right\} \delta_{ll'} - \\ & - \left\{ -\frac{1}{4\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \frac{(l+l'+1)^2 - 1}{(l+l'+1)} \right\} \delta_{2, |l' - l|}. \end{aligned}$$

Граничные условия для вектор-функции $\chi(r)$ следуют из ограниченности решения (4) на границах области определения $0 \leq r < \infty$ и определяются условием ограниченности произведения $\lim_{r \rightarrow 0} |\tau V| < \infty$, элемента объема $\tau = r^2$ и матриц потенциалов V (потенциальная часть $H^{(0)}$ и потенциалы $H^{(1)}$) в окрестности $r = 0$ [31].

При значении параметра $b = 0$ собственные функции и собственные значения невозмущенного водородоподобного атома с зарядом Z известны (в атомных единицах):

$$\chi_l^n(\tilde{r}, 0) = N_l R_{nl}(\tilde{r}), \quad E_n = \frac{Z^2}{2n^2},$$

где

$$N_l = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}} \left(\frac{2Z}{n} \right)^{3/2},$$

$$R_{nl}(\tilde{r}) = \left(\frac{2Zr}{n} \right)^l \exp \left(-\frac{2Zr}{n} \right) \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} {}_1F_1 \left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2Zr}{n} \right),$$

N_l — нормировочная константа и ${}_1F_1$ — вырожденная гипергеометрическая функция.

Для $b \neq 0$ задача на собственные значения решается численно с помощью программы FESSDE, реализующей метод конечных элементов. При малых значениях b для получения результата в аналитическом виде можно использовать программу Pointfield, реализующую теорию возмущений в терминах неприводимых представлений алгебры $so(4, 2)$.

В таб. 1, 2 приведены основные результаты.

Таблица 1

Полученные значения энергетических уровней лития при $b = 1.333400002$, $\alpha_1 = 1/6$: p — программа `pot_Li_2_0.mws`; g — метод Галёркина; m — магнитное число, σ — чётность

e	p		g	m	σ
−0.198141308	−0.1981413057	−0.1983859156810		0	0
−0.130234483	−0.1075886207	−0.1088798840814		0	1

Таблица 2

Полученные значения энергетических уровней натрия при $b = 1.375187695$, $\alpha_1 = 0.2499898275$: e — экспериментальные значения; p — программа `pot_Na_first_5_levels.mws`; g — метод Галёркина; m — магнитное число, σ — чётность

e	p		g	m	σ
−0.188858429	−0.1990045847	−0.1990024860015		0	0
−0.111561249	−0.1136718750	−0.1155306355929		0	0
−0.111561249	−0.1001797687	−0.1018830623981		0	0
−0.111561249	−0.1001797686				
−0.071578399	−0.07251607689	−0.0718488753176		0	1
−0.055937079	−0.04310045553	−0.0550965418591		0	1
−0.055937079	−0.04150270976	−0.0540875552820		0	1
−0.055937079	−0.04150270974	−0.0508331941748		0	1
−0.055937079	−0.03529903967				
−0.055937079	−0.03529903967				

4. Заключение

Среди квантовых моделей водородоподобных атомных объектов до сих пор нет ни одной модели, явно выделяющейся среди остальных в лучшую сторону. До сих пор остается открытой проблема адекватного моделирования оптических спектральных характеристик многоэлектронных атомов. Предлагаемая нами модель обладает потенциальными возможностями для улучшения количественных характеристик. Даже при небольших наборах вспомогательных функций правило квантования Курышкина оказывается удовлетворительным для описания оптических спектров атомов щелочных металлов. Альтернативные алгоритмы приближенного вычисления спектров адаптированных операторов показывают хорошее совпадение результатов численных экспериментов.

Наиболее строгие и очень сложные модели расчетов спектральных характеристик многоэлектронных систем, описание, например, в книгах [23, 24], приводят к мультипольному представлению одноэлектронного потенциала в приближенном уравнении Шредингера для вычисления радиальных функций, участвующих в расчетах вероятностей радиационных переходов. Модель Курышкина задачи Кеплера приводит именно к такому виду модельного потенциала. Расчеты переходных вероятностей будут приведены в одной из следующих публикаций.

В настоящее время представляет значительный интерес вычисление вероятностей радиационных переходов в присутствии сильных магнитных полей. При

этом упомянутое выше уравнение Шредингера из [23] становится более сложным для численной реализации. Изучаемая нами модель оптических характеристик щелочных металлов имеет единообразную форму как в отсутствие, так и в присутствии внешнего магнитного поля. Это ещё одно преимущество изучаемой нами модели.

Литература

1. Комаров И. В., Пономарев Л. И., Славянов С. Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. — М.: Наука, 1976.
2. Фок В. А. Атом водорода и неевклидова геометрия // Изв. АН СССР, ОМОН. — Вып. 2. — 1935. — С. 169–179.
3. Демков Ю. Н., Островский В. Н. Внутренняя симметрия задачи Максвелла о «рыбьем глазе» и группа Фока для атома водорода // ЖЭТФ. — Т. 6. — 1971. — С. 2011–2018.
4. Демков Ю. Н., Островский В. Н. Правило заполнения $n+1$ в периодической системе Менделеева и фокусирующие потенциалы // ЖЭТФ. — Т. 62. — 1972. — С. 125–132.
5. Kitagawara Y., Barut A. O. On the dynamical symmetry of the periodic table: II. Modified Demkov-Ostrovsky atomic model // J. Phys. B. — Vol. 16. — 1983. — Pp. 3305–3327.
6. Kitagawara Y., Barut A. O. Period doubling in the $n+1$ filling rule and dynamical symmetry of the Demkov-Ostrovsky atomic model // J. Phys. B. — Vol. 17. — 1984. — Pp. 4251–4259.
7. Курьшкин В. В. Квантовые функции распределения. Дисс. — канд. физ.-мат. наук. — УДН, 1969.
8. Kuryshkin V. V. La mécanique quantique avec une fonction nonnegative de distribution dans l'espace des phases // Annales Inst. Henri Poincaré. — Vol. 17, No 1. — 1972. — Pp. 81–95.
9. Kuryshkin V. V. Some problems of quantum mechanics possessing a non-negative phase-space distribution function // Int. J. Theor. Phys. — Vol. 7, No 6. — 1973. — Pp. 451–466.
10. Kuryshkin V. V., Zaparovanny Y. I. L'atome d'hydrogene dans mecanique quantique a fonction de distribution non-negative dans l'espace des phases // Compt. Rend. Acad. Sc. Paris. — Vol. 277, Serie B. — 1974. — Pp. 17–21.
11. Сорокин В. А., Запарованный Ю. И. К задаче об атоме водорода в квантовой механике с неотрицательной КФР // В сб. «Современные задачи в точных науках». — Вып. 1. — 1975. — С. 84–88.
12. Запарованный Ю. И., Курьшкин В. В. К задаче о гармоническом осцилляторе в квантовой механике с неотрицательной КФР // В кн. Проблемы статистической физики и теории поля. — М.: УДН, 1976. — С. 97–101.
13. Запарованный Ю. И., Курьшкин В. В. К реализации предельных переходов в квантовой механике с неотрицательной КФР // В кн. Проблемы статистической физики и теории поля. — М.: УДН, 1980. — С. 107–112.
14. Зорин А. В., Курьшкин В. В., Севастьянов Л. А. Описание спектра водородоподобного атома // Вестник РУДН, сер. Физика. — Т. 6, № 1. — 1998. — С. 62–66.
15. Жидков Е. П., Зорин А. В. Описание спектра водородоподобного атома в квантовой механике с последовательно вероятностной интерпретацией // Сообщения ОИЯИ 2000 – P11-2000-316. — Дубна: Изд-во ОИЯИ, 2000. — 19 с.
16. Zhidkov E. P., Zorin A. V. Quantum Theory with Statistical Interpretation: The Hydrogen-like atom Problem // Journ. Comp. Meth. Sci. Engin. — Vol. 2, No 1-2. — 2002. — Pp. 293–307.
17. Зорин А. В., Севастьянов Л. А. Математическое моделирование квантовой механики с неотрицательной КФР // Вестник РУДН, Физика. — Т. 11, № 2. — 2003. — С. 81–87.
18. Фок В. А. Начала квантовой механики. — М.: Наука, 1976.

19. *Rothenberg M.* Application of Sturmian functions to the Schroedinger three-body problem // *Ann. Phys (N.Y.)*. — Vol. 19. — 1962. — Pp. 262–278.
20. *Rothenberg M.* Theory and application of Sturmian functions // *Adv. At. Molec. Phys.* — Vol. 6. — 1970. — Pp. 233–268.
21. *Христенко С. В.* Штурмовские разложения функций Грина для простейших систем // *ТМФ*. — Т. 22. — 1975. — С. 31–45.
22. *Фриш С. Э.* Оптические спектры атомов. — М.: Физматгиз, 1963.
23. *Собельман И. И.* Введение в теорию атомных спектров. — М.: Физматгиз, 1963.
24. *Веселов М. Г., Лабзовский Л. Н.* Строение электронных оболочек. — М.: Наука, 1986.
25. *Зорин А. В., Севастьянов Л. А.* Метод оценок снизу для собственных значений дифференциального оператора Гамильтона в квантовой механике Курышкина // *Вестник РУДН, сер. Прикладная и компьютерная математика*. — Т. 1, № 1. — 2002. — С. 134–144.
26. *Зорин А. В., Севастьянов Л. А.* Спектральные свойства операторов Гамильтона в квантовой механике с неотрицательной КФР // Тезисы 2 Международн. конф. «Функциональный анализ и дифференциальные операторы». — М.: Физматлит, 2003. — С. 169–170.
27. *Зорин А. В.* Метод исследования существенного и дискретного спектров оператора Гамильтона водородоподобного атома в квантовой механике Курышкина // *Вестник РУДН, сер. Прикладная и компьютерная математика*. — Т. 3, № 1. — 2004. — С. 121–131.
28. *Зорин А. В., Севастьянов Л. А., Беломестный Г. А.* Аналитическое вычисление матриц наблюдаемых водородоподобного атома в квантовой механике Курышкина // *Вестник РУДН, сер. Прикладная и компьютерная математика*. — Т. 3, № 1. — 2004. — С. 106–120.
29. *Zorin A. V., Sevastianov L. A., Belomestny G. A.* Numerical search for the states with minimal dispersion in quantum mechanics with non-negative quantum distribution function // *Lect. Notes in Comp. Sci.* — Vol. 3401. — 2005. — Pp. 613–621.
30. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. — М.: Мир, 1978. — Т. 4.
31. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1977.

UDC 539.17

Numerical Investigation of the Discrete Spectrum of Hamiltonian Operators of the Hydrogen-Like Atoms in Kuryshkin's Quantum Mechanics

A. A. Gusev ^{*}, A. V. Zorin [†], K. P. Lovetsky [†], N. P. Tretyakov [†]

^{*} *Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow Region, 141980, Russia*

[†] *Peoples' Friendship University of Russia
6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, 117198, Russia*

The behaviour of the potential of one-particle approximation of the Schroedinger equation is discussed for the description of the optical spectrum of a many-electron atom with one optical electron. Properties of discrete and continuum spectra of Hamilton-Kuryshkin operator let to use for its numerical calculation two alternative methods. The comparison of the results and their discussion shows the perspectives of the proposed model for the description of optical characteristics of atomic systems with one optical electron.