

# РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ АТОМА ЛИТИЯ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ ВАРИАЦИОННЫМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

*С. Б. Дома*<sup>a\*</sup>, *М. О. Шакер*<sup>b</sup>, *А. М. Фараг*<sup>b</sup>, *Ф. Н. Эль-Гаммаль*<sup>c\*\*</sup>

<sup>a</sup> *Университет Александрии  
21526, Александрия, Египет*

<sup>b</sup> *Университет Танты  
31527, Танта, Египет*

<sup>c</sup> *Университет Менофия  
32511, Шебин Эль-Ком, Египет*

Поступила в редакцию 26 апреля 2016 г.

(Перевод с английского)

## VARIATIONAL MONTE CARLO CALCULATIONS OF LITHIUM ATOM IN STRONG MAGNETIC FIELD

*S. B. Doma, M. O. Shaker, A. M. Farag, F. N. El-Gammal*

При помощи вариационного метода Монте-Карло исследованы основное состояние и некоторые возбужденные уровни атома лития и его ионов вплоть до  $Z = 10$  во внешнем магнитном поле в диапазоне  $\gamma = 0-100$  а. е. Изучена зависимость энергии основного состояния от напряженности внешнего поля и получены точные значения полей, отвечающих переходам между различными электронными конфигурациями атома лития. Расчеты основаны на использовании пробных волновых функций точного вида, предложенных для вычисления энергий в отсутствие магнитного поля. Также вычислено значение  $\gamma$ , при котором энергия основного состояния атома лития стремится к нулю. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с современными данными, а также с точными значениями.

DOI: 10.7868/S0044451017010011

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В течение последнего десятилетия предпринимались постоянные усилия, направленные на развитие различных методов и увеличение точности расчетов энергии атомов в магнитном поле нейтронных звезд. Интерес к этой тематике обусловлен в основном тем, что открытые в работах [1–3] особенности спектров теплового излучения одиночных нейтронных звезд могут возникать за счет поглощения фотонов тяжелыми атомами в горячей разреженной атмосфере этих сильно намагниченных космических объектов [4]. Особенности, характерные для более тяжелых

элементов, также могут присутствовать в спектрах магнитных белых карликов [5,6]. В то время как для атома водорода в сильных магнитных полях имеются обширные и точные данные (см. [7–10]), аналогичных данных для атомов и ионов с несколькими электронами существенно меньше. В последнее время был достигнут значительный успех в объяснении их многообразного спектра. В подробных расчетах водородных уровней энергии, выполненных в работе [11], также сохраняется разделение на области напряженности магнитного поля вследствие разложения электронных волновых функций или по сферическим (для слабых полей), или по цилиндрическим (для сильных полей) гармоникам. Эффективный способ описания низколежащих уровней энергии в промежуточном режиме, в частности, для атома водорода основан на контурных методах [12]. С другой стороны, проблема смешения симметрий в

\* E-mail: sbdoma@alexu.edu.eg

\*\* E-mail: fatma\_elzahraa4@yahoo.com

случае атомов с несколькими электронами оказывается еще более сложной, чем для атома водорода из-за большого различия кулоновских сил, действующих на разные электроны, которые в результате обладают различными одночастичными энергиями. Таким образом оказывается, что область промежуточных полей является суммой промежуточных областей для отдельных электронов. Сравнение стационарных переходов в атоме с положениями краев поглощения наблюдаемого спектра служит весомым доказательством наличия гелия в атмосфере белого карлика GD229 [13], который является наиболее значимым из необъясненных магнитных объектов. В ранних работах кулоновское поле рассматривалось в этом пределе фактически в виде возмущения для свободного электрона в сверхсильном магнитном поле. Движение электрона параллельно магнитному полю в адиабатическом приближении [14] задается одномерным квазикулоновским потенциалом с параметром, зависящим от напряженности магнитного поля.

Точные расчеты для двухэлектронных атомов при произвольной напряженности поля были выполнены в работах [15, 16] с помощью двумерного контурного метода Хартри–Фока (ХФ). Основное состояние, а также несколько возбужденных состояний атома гелия были недавно исследованы при помощи квантового метода Монте-Карло [17]. Несколько важных методик для исследования некоторых спектроскопических свойств атомов во внешнем магнитном поле было предложено в работах [18–22]. Применяв двумерный контурный метод ХФ, авторы этих работ получили результаты по основному состоянию и нескольким возбужденным уровням атомов лития, углерода, бериллия и бора, а также ионов  $\text{Be}^+$  и  $\text{B}^+$  во внешнем однородном магнитном поле в диапазоне напряженностей от нуля до  $2.35 \cdot 10^8$  Тл с различными наборами проекций спинов  $S_z = -1, -2, -3$ ,  $S_z = 0, -1, -2$  и  $S_z = -1/2, -3/2, -5/2$ . Имеется несколько работ, посвященных исследованию атома гелия, помещенного в магнитное поле  $B = 0\text{--}100$  а. е. [23–26]. При помощи полного метода конфигурационного взаимодействия с использованием нелинейно оптимизированного анизотропного гауссова базисного набора одночастичных функций были рассчитаны полные энергии основного состояния и первых четырех возбужденных уровней атома гелия в каждом подпространстве, а также одноэлектронные энергии ионизации для магнитных квантовых чисел  $M = 0, -1$  с положительной и отрицательной  $z$ -четностью и синглетной и триплетной спиновой симметрией. Также были представле-

ны результаты расчетов энергии электромагнитных переходов внутри подпространства  $M = -1$  и между подпространствами  $M = -1$  и  $M = 0$  [23, 24]. В работе [25] исследовано значительное число состояний атома гелия с высшими значениями орбитального момента. Были также изучены синглетные и триплетные спиновые состояния с положительной и отрицательной  $z$ -четностью для магнитных квантовых чисел  $M = \pm 2$  и состояния с положительной  $z$ -четностью для  $M = \pm 3$ . Кроме того, они подробно изучили вероятности электромагнитных переходов для атома гелия в сильном магнитном поле и изменение силы осциллятора с увеличением напряженности поля [26]. В работах [27, 28] проведены расчеты для магнитных квантовых чисел  $M = 0, -1, -2, -3$  в диапазоне магнитного поля  $B = 100\text{--}10000$  а. е. с положительной и отрицательной  $z$ -четностью для синглетной и триплетной симметрий. В работе [29] исследовано влияние магнитного поля малой и средней напряженности на ряд спектроскопических свойств атома натрия. Представляет интерес работа [30], в которой содержатся расчеты основного состояния и нескольких низколежащих возбужденных уровней атома лития в слабых и промежуточных полях. Недавно в работе [31] для вычисления энергии основного состояния литиевоподобных ионов вплоть до  $Z = 10$  во внешнем поле был использован двумерный метод Хартри–Фока в сочетании с диффузионным квантовым методом Монте-Карло.

Вариационный метод Монте-Карло успешно применялся для исследования основного и возбужденных состояний атомов гелия и лития как в отсутствие, так и при наличии слабого магнитного поля [32–34]. В настоящей работе мы распространяем применение этого метода на изучение трехэлектронной системы в присутствии слабого, промежуточного и сильного внешнего магнитного поля. Данный метод позволяет проводить вычисления с приблизительно одинаковой точностью для промежуточных и сильных полей. Нашей главной задачей является изучение основного состояния атома лития и его ионов вплоть до  $Z = 10$ .

## 2. МЕТОДИКА ВЫЧИСЛЕНИЙ

Вариационный метод Монте-Карло (ВМК) основан на сочетании двух идей, а именно, вариационного принципа и оценки интегралов методом Монте-Карло с использованием выборки по значимости на основе алгоритма Метрополиса. Метод ВМК,

являющийся простейшим из всех квантовых алгоритмов Монте-Карло, используется для вычисления средних значений оператора с данной пробной волновой функцией  $\Psi_T$ . В частности, среднее значение гамильтониана является вариационной энергией

$$E_{VMC} = \frac{\int \Psi_T^*(\mathbf{R}) \hat{H} \Psi_T(\mathbf{R}) d\mathbf{R}}{\int \Psi_T^*(\mathbf{R}) \Psi_T(\mathbf{R}) d\mathbf{R}}, \quad (1)$$

которая определяется в виде [36]

$$E_{VMC} = \int \rho(\mathbf{R}) E_L(\mathbf{R}) d\mathbf{R}, \quad (2)$$

где  $\Psi_T$  — пробная волновая функция, а  $\mathbf{R} = (\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \dots, \mathbf{R}_N)$  —  $3N$ -мерный вектор, задающий координаты всех  $N$  частиц в системе. Векторы  $\{\mathbf{R}_i\}$  выбираются из многомерной плотности вероятности

$$\rho(\mathbf{R}) = |\Psi_T(\mathbf{R})|^2 / \langle \Psi_T | \Psi_T \rangle.$$

Слагаемое

$$E_L(\mathbf{R}) = [H\Psi_T](\mathbf{R}) / \Psi_T(\mathbf{R})$$

обычно называется локальной энергией. Вариационный принцип требует, чтобы пробная волновая функция для данного состояния давала энергию, превышающую точное значение для этого состояния, т.е.  $E_{VMC} \geq E_{exact}$ . Предполагается, что пробная волновая функция должна быть как можно ближе к настоящей волновой функции основного состояния системы или, в более общем виде, к точному собственному состоянию гамильтониана. Для вычисления интегралов в уравнении (1) сначала строится пробная волновая функция  $\Psi_T^\alpha(\mathbf{R})$ , зависящая от набора варьируемых параметров  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$ , а затем эти параметры варьируются для достижения минимума энергии.

При определении среднего значения локальной энергии  $E_{VMC}$  не требуется аналитическое интегрирование и, поскольку для оценки локальной энергии необходимо только дифференцирование пробной волновой функции, ее можно выбирать в любом удобном виде. После достаточного количества оценок энергии  $E_{VMC}$  ее приближенное значение выражается в виде

$$E_{VMC} = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^L E_L(\mathbf{R}_{ij}), \quad (3)$$

где  $L$  — размер ансамбля случайных чисел  $\{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_L\}$ , которые можно генерировать различными методами [37, 38], а  $N$  — число ансамблей. Сгенерированные таким образом ансамбли должны отображать саму функцию распределения. Каждый ансамбль выбирается в соответствии с алгоритмом Метрополиса [35] с использованием случайных чисел. При оценке энергии системы важно вычислить ее стандартное отклонение, определяемое выражением [36]

$$\sigma = \sqrt{\frac{\langle E_L^2 \rangle - \langle E_L \rangle^2}{L(N-1)}}. \quad (4)$$

### 3. ГАМИЛЬТониАН СИСТЕМЫ

В настоящей работе масса ядра считается бесконечной и, таким образом, вычисления проводятся в рамках приближения Борна–Оппенгеймера в магнитном поле, направленном вдоль оси  $z$ . Уравнение Шредингера системы можно записать в виде

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (5)$$

где  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  — координаты электронов по отношению к ядру. Задача состоит в решении уравнения Шредингера для атома лития во внешнем магнитном поле с целью вычисления собственных значений энергии основного состояния в зависимости от величины магнитного поля. Нерелятивистский гамильтониан атома лития в отсутствие магнитного поля (в атомных единицах, а. е.) [39] задается выражением

$$H = - \sum_{i=1}^3 \left( \frac{1}{2} \nabla_i^2 + \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i=1}^3 \sum_{j>i}^3 \frac{1}{r_{ij}}, \quad (6)$$

где  $Z$  — заряд ядра (в нашем случае  $Z = 3$ ),  $r_i$  — расстояние от  $i$ -го электрона до ядра Li,  $r_{ij}$  — расстояния между электронами.

В наших расчетах гамильтониан выражается в координатах Хиллерааса следующим образом [40]:

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + \sum_{i=1}^3 \frac{2}{r_i} \frac{\partial}{\partial r_i} + \sum_{i<j}^3 2 \frac{\partial^2}{\partial r_{ij}^2} + \right. \\
 & + \sum_{i<j}^3 \frac{4}{r_{ij}} \frac{\partial}{\partial r_{ij}} + \sum_{i \neq j}^3 \frac{r_i^2 + r_{ij}^2 - r_j^2}{r_i r_{ij}} \frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_{ij}} + \\
 & + \sum_{i \neq j}^3 \sum_{k>j}^3 \frac{r_{ij}^2 + r_{ik}^2 - r_{jk}^2}{r_{ij} r_{ik}} \frac{\partial^2}{\partial r_{ij} \partial r_{ik}} + \\
 & + \sum_{i=1}^3 \frac{1}{r_i} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2} + \sum_{i=1}^3 \frac{1}{r_i^2 \sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} + \sum_{i=1}^3 \frac{\text{ctg}}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial \theta_i} + \\
 & + \sum_{j \neq 1}^3 \left( \frac{2r_j}{r_i r_{ij}} \frac{\cos \theta_j}{\sin \theta_i} + \text{ctg} \theta_i \frac{r_{ij}^2 - r_i^2 - r_j^2}{r_i^2 r_{ij}} \right) \frac{\partial^2}{\partial \theta_i \partial r_{ij}} + \\
 & + \sum_{j \neq 1}^3 2 \frac{r_j}{r_i r_{ij}} \frac{\sin \theta_j}{\sin \theta_i} \sin(\varphi_i - \varphi_j) \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i \partial r_{ij}} \Big) + \\
 & + \sum_{i=1}^3 \frac{-z}{r_i} + \sum_{1=i<j}^3 \frac{1}{r_{ij}}. \quad (7)
 \end{aligned}$$

В присутствии магнитного поля гамильтониан  $\mathcal{H}$  для атома Li принимает вид

$$\mathcal{H} = H + \left[ \frac{\gamma^2 \rho^2}{8} + \frac{\gamma(L_z + 2S_z)}{2} \right], \quad (8)$$

где  $\rho^2 = \rho_1^2 + \rho_2^2 + \rho_3^2 = (x_1^2 + y_1^2) + (x_2^2 + y_2^2) + (x_3^2 + y_3^2)$ ,  $\gamma$  — параметр магнитного поля,

$$L_z = \sum_{i=1}^3 l_{iz}, \quad S_z = \sum_{i=1}^3 s_{iz}$$

—  $z$ -компоненты соответственно полного орбитального момента и спина,  $\gamma^2 \rho^2 / 8$  — диамагнитный вклад,  $(\gamma/2)L_z$  и  $\gamma S_z$  — орбитальный и спиновый зеемановские члены,  $-z/r_1 - z/r_2 - z/r_3$  — кулоновские взаимодействия с ядром.

#### 4. ПРОБНЫЕ ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ

В данном разделе вводятся пробные волновые функции, используемые в расчетах основного состояния атома лития и его ионов вплоть до  $Z = 10$  во внешнем магнитном поле. В слабом поле используются следующие волновые функции:

$$\Psi_1 = A [\psi_i(r_1, r_2, r_3) \chi(s)], \quad (9)$$

где  $\chi(s)$  — спиновая функция, в обычных обозначениях задаваемая выражением [41]

$$\chi = \alpha(1)\beta(2)\alpha(3) - \beta(1)\alpha(2)\alpha(3),$$

а  $A$  — трехчастичный антисимметризатор

$$A = I - P_{12} - P_{13} - P_{23} + P_{231} + P_{312}.$$

Здесь  $P_{ij}$  обозначает перестановку  $i \leftrightarrow j$ , а  $P_{ijk}$  — перестановку 123 в  $ijk$ . Волновые функции  $\psi_i$  в уравнении (9) задаются выражениями

$$\begin{aligned}
 \psi_1(r_1, r_2, r_3) = & (1 + \beta_1 r_3 + \gamma_1 r_{13}) \times \\
 & \times \exp \{ -\alpha_1 r_1 - \alpha_2 r_2 - \alpha_3 r_3 - \alpha_{12} r_{12} - \\
 & - \alpha_{13} r_{13} - \alpha_{23} r_{23} \} \quad \text{для } Z = 3, \quad (10)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \psi_2(r_1, r_2, r_3) = & (1 + \beta_1 r_3) \times \\
 & \times \exp \{ -\alpha_1 r_1 - \alpha_2 r_2 - \alpha_3 r_3 - \alpha_{12} r_{12} - \\
 & - \alpha_{13} r_{13} - \alpha_{23} r_{23} \} \quad \text{для } Z = 3, \dots, 10. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Множитель перед экспонентой линейно зависит от своих аргументов, в то время как параметры  $\alpha_i$  и  $\alpha_{ij}$  являются нелинейными. Волновая функция такого вида, предложенная в работе [42] для вычисления энергии основного состояния атома лития без магнитного поля, дает хорошее приближение к соответствующим точным значениям.

Поскольку волновые функции и энергии состояний существенно зависят от величины магнитного поля, оно также сильно влияет на соответствующие электронные конфигурации. С увеличением напряженности поля основное состояние претерпевает два фазовых перехода между тремя различными конфигурациями [22]. В действительности, конфигурация  $1s^2 2s$  описывает основное состояние атома лития только в относительно слабых полях. При промежуточных значениях поля конфигурация основного состояния изменяется на  $1s^2 2p_{-1}$ , а в сильном поле становится  $1s 2p_{-1} 3d_{-2}$ . В наших расчетах для представления атомной конфигурации всех электронов в промежуточном магнитном поле выбираются другие пробные волновые функции водородоподобного типа [43]:

$$\begin{aligned}
 \Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \\
 = A \left[ \phi(\mathbf{r}_1) \phi(\mathbf{r}_2) \phi(\mathbf{r}_3) \chi(s) \prod_{j>i} f(r_{ij}) \right], \quad (12)
 \end{aligned}$$

где  $\phi(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$  — обычные водородоподобные функции  $nl$ -состояния. Множитель  $f(r_{ij})$ , выражающий корреляцию между электронами  $i$  и  $j$  за счет кулоновского отталкивания, имеет вид

$$f(r_{ij}) = \exp \left( \frac{r_{ij}}{\alpha(1 + \beta r_{ij})} \right), \quad (13)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  являются варьируемыми параметрами.

Для представления одночастичных базисных функций в сильном поле удобно выбрать цилиндрические координаты в соответствии с аксиальной симметрией по отношению к направлению магнитного поля. Таким образом, для высокоточных расчетов в случае сильного поля хорошо подходит следующая аксиально симметричная базисная пробная волновая функция Хиллерааса – Гаусса [23]:

$$\Psi_3(\rho, \varphi, z) = A \left[ \rho^{n_{\rho i}} Z^{n_{z i}} e^{-\alpha_i^2 \rho^2 - \beta_i^2 z^2} e^{i m_i \varphi} \chi(s) \right], \quad (14)$$

где  $\alpha_i, \beta_i$  – положительные нелинейные варьируемые параметры, а показатели степеней  $n_{\rho i}$  и  $n_{z i}$  удовлетворяют следующим условиям:

$$n_{\rho i} = |m_i| + 2k_i; \quad k_i = 0, 1, 2, \dots$$

для  $m_i = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$

$$n_{z i} = \pi_{z i} + 2l_i; \quad l_i = 0, 1, 2, \dots \text{ для } \pi_{z i} = 0, 1.$$

Базисная функция является собственной функцией  $z$ -компоненты орбитального момента с собственным значением  $m_i$  и  $z$ -четности с собственным значением  $(-1)^{\pi_{z i}}$ . Выражение гауссового вида  $\rho^{|m_i|} \exp^{-\alpha_i^2 \rho^2}$  эквивалентно зависимости от  $\rho$  нижнего уровня Ландау в магнитном поле  $\mathbf{B}$  (если выбрать  $\alpha_i = \mathbf{B}/4$ ) и, таким образом, представляет собой учет внешнего магнитного поля. Множители  $\rho^{2k_i}$  и  $z^{n_{z i}}$  могут также описывать возбуждения. Однако в сильном магнитном поле, нарушающем сферическую симметрию задачи, использование изотропного базисного набора функций оказывается неэффективным. В режиме сильного поля выбирается распределение  $\alpha_i$  с максимумом вблизи  $\mathbf{B}/4$ , в то время как величины  $\beta_i$  принимают не слишком большие значения [23].

Интегралы, получаемые при решении уравнения Шредингера для атома лития, или вычисляемые нашим методом соответствующие средние значения можно легко использовать для получения энергий при помощи волновых функций  $\Psi_1, \Psi_2$  и  $\Psi_3$ , задаваемых выражениями (9), (12) и (14).

## 5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

При помощи описанного метода ВМК были рассчитаны энергии основного состояния атома лития в магнитном поле в диапазоне от 0 до 100 а. е., а также литиевоподобных ионов до  $Z = 10$ . Основное внимание уделялось основному состоянию атома Li. Все энергии получены в атомных единицах

( $m_e = e = \hbar = 1$ ) на основе набора из  $1 \cdot 10^7$  точек интегрирования по методу Монте-Карло для достижения как можно меньшей статистической погрешности.

### 5.1. Основное состояние атома лития

Уравнение Шредингера для атома лития в магнитном поле решается в приближении бесконечной массы ядра. Расчеты для основного и некоторых возбужденных состояний во внешнем магнитном поле основаны на использовании пробных волновых функций  $\Psi_1, \Psi_2$  и  $\Psi_3$ . Результаты для полной энергии при различных величинах напряженности магнитного поля  $\gamma$  представлены в табл. 1. Для сравнения также приведены данные, полученные ранее в работах [22, 30, 44]. Из таблицы следует, что наши результаты для всех значений  $\gamma$  находятся в прекрасном согласии с соответствующими данными из предыдущих работ. Очевидно, что значения энергий основного состояния атома лития без магнитного поля для состояний  $1s^2 2s$  и  $1s^2 2p_{-1}$  ближе к величинам, полученным в работе [30]. Поскольку в работе [22] приведены округленные результаты, не представляется возможным сказать, лежат они выше или ниже значений, полученных нами для различных напряженностей поля  $\gamma$ . На рис. 1 показаны зависимости полной энергии основного состояния от напряженности магнитного поля  $\gamma$  (в а. е.) для трех состояний:  $1s^2 2s, 1s^2 2p_{-1}, 1s 2p_{-1} 3d_{-2}$ . На рисунке видны точки переходов атома лития с увеличением напряженности поля из состояния  $1s^2 2s$  в  $1s^2 2p_{-1}$  при  $\gamma = 0.18$  и из состояния  $1s^2 2p_{-1}$  в  $1s 2p_{-1} 3d_{-2}$  при  $\gamma = 2.0718$ . В слабом поле  $0 < \gamma \leq 0.18$  атом лития находится в основном состоянии  $1s^2 2s$ . Это состояние является сильно связанным, поскольку включает в себя две сильно связанные орбитали  $1s$ -типа. Распределение зарядовой плотности  $2s$ -орбитали вдоль оси  $z$  слегка растягивается в слабом поле. Также необходимо отметить, что полная энергия уменьшается вследствие спинового эффекта Зеемана. С другой стороны, с ростом поля система стремится к сжатию, и при увеличении орбитального момента внешнего электрона в атоме может увеличиваться электронное разделение. На рис. 1 также видно, что полная энергия состояния  $1s^2 2s$  проходит через минимум при  $\gamma \approx 0.1954$ . При промежуточных значениях поля обнаружено наличие перехода из конфигурации  $1s^2 2s$  в  $1s^2 2p_{-1}$  при значении  $\gamma = 0.18$ . Очевидно, что полная энергия этого состояния также достигает минимума при  $\gamma \approx 1.38$ , расположенного выше минимума основного состо-

**Таблица 1.** Полные энергии основного и некоторых возбужденных состояний атома лития, полученные с использованием трех волновых функций из выражений (9), (12) и (14) в диапазоне магнитных полей  $\gamma = 0-100$ . Для полученных результатов также приведено стандартное отклонение  $\sigma$ . Приведены наши результаты и данные других работ

$\gamma$	$1s^22s$				$1s^22p_{-1}$			$1s^22p_{-1}3d_{-2}$	
	Наша работа $E, \text{ а. е.}$ $\sigma$	$E, \text{ а. е.}$ Работа [22]	$E, \text{ а. е.}$ Работа [30]	$E, \text{ а. е.}$ Работы [44–46]	Наша работа $E, \text{ а. е.}$ $\sigma$	$E, \text{ а. е.}$ Работа [22]	$E, \text{ а. е.}$ Работа [30]	Наша работа $E, \text{ а. е.}$ $\sigma$	$E, \text{ а. е.}$ Работа [22]
0.0000	-7.432748 $7 \cdot 10^{-5}$	-7.43275	-7.4327	-7.477766 [44] -7.47806032310 [45]	-7.365089 $3 \cdot 10^{-5}$	-7.36509	-7.3651	-5.083787 $8 \cdot 10^{-5}$	-5.08379
0.0010	-7.433196 $5 \cdot 10^{-5}$	-7.43326		-7.478032 [44]	-7.366089 $3 \cdot 10^{-5}$	-7.36609		-5.086787 $8 \cdot 10^{-5}$	-5.08679
0.0018	-7.433624 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.43365	-7.4337		-7.366887 $3 \cdot 10^{-5}$	-7.36689	-7.3669	-7.089148 $6 \cdot 10^{-5}$	-5.08915
0.0020	-7.433893 $2 \cdot 10^{-5}$	-7.43375			-7.367088 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.36709		-7.089759 $6 \cdot 10^{-5}$	-5.08976
0.0050	-7.435158 $5 \cdot 10^{-4}$	-7.43522			-7.370017 $3 \cdot 10^{-5}$	-7.37002		-5.098518 $7 \cdot 10^{-5}$	-5.09852
0.0090	-7.437062 $3 \cdot 10^{-4}$	-7.43713	-7.4371		-7.373875 $3 \cdot 10^{-5}$	-7.37387	-7.3738	-5.109880 $7 \cdot 10^{-5}$	-5.10988
0.0100	-7.437693 $7 \cdot 10^{-4}$	-7.43760		-7.482888 [44]	-7.374806 $3 \cdot 10^{-5}$	-7.37481		-5.112679 $8 \cdot 10^{-5}$	-5.11268
0.0180	-7.441323 $5 \cdot 10^{-4}$	-7.44125	-7.4412		-7.382177 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.38218	-7.3832	-5.134329 $8 \cdot 10^{-5}$	-5.13433
0.0200	-7.442008 $4 \cdot 10^{-4}$	-7.44214		-7.490983 [44]	-7.383969 $7 \cdot 10^{-5}$	-7.38397		-5.139600 $7 \cdot 10^{-5}$	-5.13960
0.0500	-7.453947 $7 \cdot 10^{-4}$	-7.45398		-7.502724 [44]	-7.408443 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.40844		-5.212807 $6 \cdot 10^{-5}$	-5.21281
0.0540	-7.455361 $5 \cdot 10^{-4}$	-7.45537	-7.4553		-7.411407 $5 \cdot 10^{-5}$	-7.41141	-7.4114	-5.221989 $7 \cdot 10^{-5}$	-5.22199
0.1000	-7.468596 $6 \cdot 10^{-4}$	-7.46857		-7.517154 [44] -7.5137817 [46]	-7.441757 $5 \cdot 10^{-5}$	-7.44176		-5.321401 $6 \cdot 10^{-5}$	-5.32140
0.1260	-7.473900 $5 \cdot 10^{-4}$	-7.47408	-7.4739		-7.456497 $5 \cdot 10^{-5}$	-7.45650	-7.4565	-5.373668 $6 \cdot 10^{-5}$	-5.37371
0.17633	-7.481644 $3 \cdot 10^{-4}$	-7.48162			-7.481618 $5 \cdot 10^{-5}$	-7.48162		-5.467545 $6 \cdot 10^{-5}$	
0.1800	-7.482032 $4 \cdot 10^{-4}$	-7.48204	-7.4814		-7.482032 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.48330	-7.4832	-5.475678 $6 \cdot 10^{-5}$	-5.47568
0.2000	-7.484008 $3 \cdot 10^{-4}$	-7.48400		-7.533495 [44]	-7.492219 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.49220		-5.511508 $6 \cdot 10^{-5}$	-5.51151
0.5000	-7.47740 $5 \cdot 10^{-4}$	-7.47741		-7.528055 [44] -7.5235946 [46]	-7.587890 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.58790		-5.970519 $7 \cdot 10^{-5}$	-5.97052
0.5400	-7.473515 $8 \cdot 10^{-4}$	-7.47351	-7.4731		-7.597086 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.59709	-7.5965	-6.024139 $7 \cdot 10^{-5}$	-6.02414

Таблица 1. Продолжение

$\gamma$	$1s^2 2s$			$1s^2 2p_{-1}$			$1s^2 2p_{-1} 3d_{-2}$		
	Наша работа $E$ $\sigma$	$E$ , а. е. Работа [22]	$E$ , а. е. Работа [30]	$E$ , а. е. Работы [44–46]	Наша работа $E$ , а. е. $\sigma$	$E$ , а. е. Работа [22]	$E$ , а. е. Работа [30]	Наша работа $E$ , а. е. $\sigma$	$E$ , а. е. Работа [22]
0.9000	-7.424827 $5 \cdot 10^{-4}$	-7.42504	-7.4240		-7.656279 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.65628	-7.6563	-6.460608 $7 \cdot 10^{-5}$	-6.46061
1.0000	-7.408674 $3 \cdot 10^{-4}$	-7.40879		-7.458550 [44]	-7.666529 $3 \cdot 10^{-5}$	-7.66653		-6.570809 $7 \cdot 10^{-5}$	-6.57081
1.2600	-7.361833 $4 \cdot 10^{-4}$	-7.36226	-7.3609		-7.682878 $3 \cdot 10^{-5}$	-7.68288	-7.6820	-6.841219 $8 \cdot 10^{-5}$	-6.84122
1.8000	-7.245712 $3 \cdot 10^{-4}$	-7.24603	-7.2446		-7.676569 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.67657	-7.6747	-7.347228 $8 \cdot 10^{-5}$	-7.34723
2.0000	-7.195953 $2 \cdot 10^{-4}$	-7.19621		-7.244919 [44]	-7.662457 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.66246		-7.520029 $8 \cdot 10^{-5}$	-7.52003
2.071814	-7.177415 $3 \cdot 10^{-4}$	-7.17745			-7.656002 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.65600		-7.656002 $8 \cdot 10^{-5}$	-7.58047
2.5000	-7.056177 $3 \cdot 10^{-4}$	-7.05619			-7.603509 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.60351		-7.925319 $8 \cdot 10^{-5}$	-7.92532
3.0000	-6.895463 $4 \cdot 10^{-4}$	-6.89559			-7.515081 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.51516		-8.299185 $8 \cdot 10^{-5}$	-8.29920
3.6000	-6.678665 $5 \cdot 10^{-4}$	-6.67874	-6.6640		-7.376351 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.37638	-7.3627	-8.714637 $8 \cdot 10^{-5}$	-8.71464
5.0000	-6.088033 $1 \cdot 10^{-4}$	-6.08811		-6.136918 [44]	-6.942290 $4 \cdot 10^{-5}$	-6.94230		-9.576938 $8 \cdot 10^{-5}$	-9.57694
5.4000	-5.901022 $4 \cdot 10^{-4}$	-5.90113	-5.8772	-5.949297 [44]	-7.795135 $4 \cdot 10^{-5}$	-7.79517	-6.7747	-9.801466 $7 \cdot 10^{-5}$	-9.80147
7.0000	-5.088876 $2 \cdot 10^{-4}$	-5.08909			-6.126681 $4 \cdot 10^{-5}$	-6.12670		-10.625777 $8 \cdot 10^{-5}$	-10.62578
10.00	-3.357665 $4 \cdot 10^{-4}$	-3.35777		-3.406556 [44]	-4.617673 $4 \cdot 10^{-5}$	-4.61777		-11.939017 $8 \cdot 10^{-5}$	-11.93902
20.00	3.491142 $4 \cdot 10^{-4}$	3.49120			1.705552 $4 \cdot 10^{-5}$	1.70565		-15.162585 $7 \cdot 10^{-5}$	-15.16260
50.00	27.690166 $5 \cdot 10^{-4}$	27.6916			24.97934 $4 \cdot 10^{-5}$	24.97942		-21.050462 $6 \cdot 10^{-5}$	-21.0505
100.00	71.806551 $5 \cdot 10^{-4}$	71.807			68.17336 $4 \cdot 10^{-5}$	68.1735		-27.019183 $7 \cdot 10^{-5}$	-27.0192

яния в слабом поле. В режиме сильного поля при  $\gamma > 2.071814$  атом оказывается в основном состоянии с конфигурацией  $1s^2 2p_{-1} 3d_{-2}$ . Для этой конфигурации, в которой все одноэлектронные энергии связи неограниченно растут при  $\gamma \rightarrow \infty$ , также заметен процесс стягивания распределения электрон-

ной плотности в направлении  $z$ . В целом видно, что для каждой отдельной конфигурации эффект увеличения напряженности поля состоит в сжатии распределения электронной плоскости по направлению к оси  $z$ , при котором возникает сильное нарушение сферической симметрии атома.

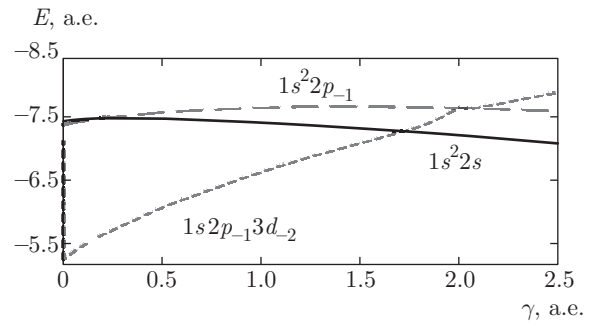
**Таблица 2.** Величины  $\gamma$ , при которых полная энергия основного состояния стремится к нулю. Также приведено стандартное отклонение  $\sigma$

$\gamma$ , а. е.	$E(\Psi_3)$ , а. е.	$\sigma$
13.0	-1.655740	$3 \cdot 10^{-4}$
13.545	-1.003530	$4 \cdot 10^{-4}$
14.565	-1.000246	$4 \cdot 10^{-4}$
14.779	-0.000003	$4 \cdot 10^{-4}$
14.780	-0.000001	$3 \cdot 10^{-4}$
14.781	0.000000	$2 \cdot 10^{-4}$
14.782	0.000001	$2 \cdot 10^{-4}$
14.785	0.000044	$4 \cdot 10^{-4}$
14.788	0.000048	$4 \cdot 10^{-4}$
14.8	0.000276	$4 \cdot 10^{-4}$
14.9	0.000388	$3 \cdot 10^{-4}$
15.0	0.000566	$2 \cdot 10^{-4}$
17.0	1.765694	$4 \cdot 10^{-4}$

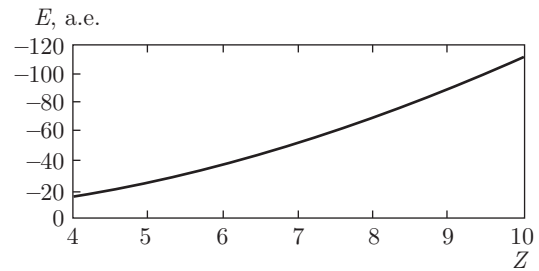
Для оценки величины  $\gamma$ , при которой полная энергия основного состояния стремится к нулю, были вычислены полные энергии, соответствующие различным значениям  $\gamma$  в диапазоне от 13 до 17 а. е. Полученные результаты представлены в табл. 2. Интересно отметить, что энергия основного состояния оказывается равной нулю при  $\gamma = 14.781$  а. е. при стандартном отклонении  $\sigma = 2 \cdot 10^{-4}$ .

### 5.2. Основные состояния литиевоподобных ионов с зарядом до $Z = 10$

При помощи пробной волновой функции  $\Psi_1$  рассчитаны зависимости полных энергий ионов лития с зарядом до  $Z = 10$  от напряженности магнитного поля  $\gamma$ . В табл. 3 содержатся значения полных энергий для ионов лития с различными  $Z$ , полученные при определенных значениях  $\gamma$ . Данные наших расчетов приводятся в сравнении с результатами работы [31]. Большинство приведенных в табл. 3 результатов хорошо согласуется с точными значениями. Кроме того, благодаря большому числу пробных точек соответствующие стандартные отклонения очень малы и находятся в интервале  $10^{-5}$ - $10^{-4}$ . Более того, из табл. 3 следует, что наш результат для атома лития ( $Z = 3$ ) составляет  $-7.69085$  а. е.,



**Рис. 1.** Полная энергия в зависимости от напряженности магнитного поля  $\gamma$  для состояний  $1s^2 2s$ ,  $1s^2 2p_{-1}$  и  $1s 2p_{-1} 3d_{-2}$



**Рис. 2.** Полные энергии литиевоподобных ионов (при  $\gamma = 0.122$ ) в зависимости от  $Z$  до  $Z = 10$

что близко к величине из работы [31]. С целью графической демонстрации поведения полной энергии иона лития в зависимости от  $Z$  она была вычислена для каждого  $Z$  при фиксированном значении  $\gamma = 0.12212$ . Полученные результаты приведены в табл. 4. На рис. 2 показана зависимость полной энергии атома лития от  $Z$ , полученная с использованием пробной волновой функции  $\Psi_1$ .

### 6. ВЫВОДЫ

В настоящей работе при помощи хорошо известного вариационного метода Монте-Карло изучены атом лития и литиевоподобные ионы с зарядом до  $Z = 10$  в магнитном поле. Данный метод оказывается достаточно универсальным для получения точных результатов в произвольном магнитном поле. Были проведены расчеты для основного и некоторых возбужденных состояний в диапазоне магнитных полей от нуля до  $\gamma = 100$ . Для слабых полей вычисления были основаны на использовании компактных пробных волновых функций с небольшим числом параметров, которые можно считать наиболее точными из известных для атома и ионов лития. Изучено влияние магнитного поля на основное



**Таблица 3.** Напряженность магнитного поля  $\gamma$  и энергия  $E$ , полученные для ионов лития с использованием пробной волновой функции  $\Psi_1$ . Также приведены стандартное отклонение  $\sigma$  и полные энергии из работы [31]

$Z$	3	4	5	6	7	8	9	10
$\gamma$	0.12212	0.14229	0.15510	0.16404	0.17059	0.17556	0.17947	0.18266
$E$ , а. е.	-7.69085	-15.0576	-24.9326	-37.3084	-52.1764	-69.545	-89.114	-111.653
$\sigma$	$1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-5}$	$4 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$6 \cdot 10^{-5}$	$4 \cdot 10^{-5}$	$7 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-6}$
$E$ , а. е. работа [31]	-7.6905	-15.0670	-24.9386	-37.309	-52.184	-69.551	-89.418	-111.783

**Таблица 4.** Полные энергии ионов лития в зависимости от  $Z \leq 10$  для фиксированного значения  $\gamma = 0.122$  а. е. с соответствующим стандартным отклонением  $\sigma$ 

$Z$	4	5	6	7	8	9	10
$E$ , а. е.	-15.0563	-24.8867	-37.256	-52.1563	-69.487	-89.106	-111.617
$\sigma$	$7 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-4}$

состояние. С увеличением напряженности магнитного поля основное состояние испытывает два перехода между тремя различными электронными конфигурациями. При малых значениях  $\gamma$  (в слабых полях) основным состоянием является конфигурация  $1s^2 2s$ , в то время как для промежуточных и сильных полей оно изменяется соответственно на  $1s^2 2p_{-1}$  и  $1s 2p_{-1} 3d_{-2}$ . Определены точные значения параметра  $\gamma$ , соответствующие переходам между различными конфигурациями основного состояния. С этой целью для повышения универсальности представления различных атомных конфигураций, возникающих при увеличении магнитного поля и связанного с этим установления цилиндрической симметрии, были использованы соответствующие пробные волновые функции нескольких видов. Полученные в работе результаты для полной энергии основного состояния находятся в хорошем согласии с существующими в литературе данными. Также представлены новые расчеты, демонстрирующие стремление энергии основного состояния атома лития к нулю и позволяющие найти значение  $\gamma$ , при котором эта энергия обращается в нуль.

Построены графики зависимости полной энергии от величины магнитного поля  $\gamma$ . В заключение можно сделать вывод о том, что представленное в данной работе исследование подтверждает эффективность метода ВМК для изучения системы с тремя электронами в сильном магнитном поле.

## ЛИТЕРАТУРА

1. F. Haberl, A. D. Schwope, V. Hambaryan, G. Hasinge, and C. Motch, *Astron. Astrophys. L* **19**, 403 (2003).
2. V. Hambaryan, R. Neuhäuser, F. Haberl, M. M. Hohle, and A. D. Schwope, *Astron. Astrophys. L* **9**, 497 (2009).
3. V. Hambaryan, V. Suleimanov, A. D. Schwope, R. Neuhäuser, K. Werner, and A. Y. Potekhin, *Astron. Astrophys. A* **74**, 534 (2011).
4. W. Becker, *Neutron Stars and Pulsars, Astrophysics and Space Science Library*, Vol. **357** ISBN 978-3-540-76965-1, Springer-Verlag (2009).
5. B. Külebi, S. Jordan, F. Euchner, B. T. Gänsicke, and H. Hirsch, *Astron. Astrophys.* **506**, 1341 (2009).
6. S. O. Kepler, I. Pelisoli, S. Jordan, S. J. Kleinman, D. Koester, B. Külebi, V. Peçanha, B. G. Castanheira, A. Nitta, J. E. S. Costa, D. E. Winget, A. Kanaan, and L. Fraga, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **429**, 2934 (2013).
7. H. Ruder, G. Wunner, H. Herold, and F. Geyer, *Astronomy and Astrophysics Library*, ISBN 3-540-57699-1, Springer-Verlag (1994).
8. L. B. Zhao and P. C. Stancil, *J. Phys. B* **40**, 4347 (2007).
9. Y. P. Kravchenko, M. A. Liberman, and B. Johansson, *Phys. Rev. A* **54**, 287 (1996).

10. Y. P. Kravchenko, M. A. Liberman, and B. Johansson, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 619 (1996).
11. W. Rösner, G. Wunner, H. Herold, and H. Ruder, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **17**, 29 (1984).
12. M. V. Ivanov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 447 (1988).
13. S. Jordan, P. Schmelcher, W. Becken, and W. Schweizer, *Astron. Astrophys. L* **33–L 36**, 336 (1998).
14. R. J. Elliot and R. Loudon, *J. Phys. Chem. Sol.* **15**, 196 (1960).
15. M. V. Ivanov, *Opt. Spectr.* **70**, 148 (1991).
16. M. V. Ivanov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27**, 4513 (1994).
17. D. Meyer, S. Boblest, and G. Wunner, *Phys. Rev. A* **87**, 032515 (2013).
18. M. V. Ivanov and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **61**, 022505 (2000).
19. M. V. Ivanov and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **60**, 3558 (1999).
20. M. V. Ivanov and P. Schmelcher, *Eur. J. Phys. D* **14**, 279 (2001).
21. M. V. Ivanov and P. Schmelcher, *J. Phys. B* **34**, 2031 (2001).
22. M. V. Ivanov and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **57**, 3793 (1998).
23. W. Becken, P. Schmelcher, and F. K. Diakonov, *J. Phys. B* **32**, 1557 (1999).
24. W. Becken and P. Schmelcher, *J. Phys. B* **33**, 545 (2000).
25. W. Becken and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **63**, 053412 (2001).
26. W. Becken and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **65**, 033416 (2002).
27. O. A. Al-Hujaj and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **67**, 023403 (2003).
28. O. A. Al-Hujaj and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **68**, 053403 (2003).
29. R. Gonzalez-Ferez and P. Schmelcher, *Eur. J. Phys. D* **23**, 189 (2003).
30. M. D. Jones, G. Ortiz, and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. A* **54**, 219 (1996).
31. S. Boblest, C. Schimeczek, and G. Wunner, *Phys. Rev. A* **89**, 012505 (2014).
32. S. B. Doma and F. N. El-Gammal, *Acta. Phys. Pol. A* **122**(1), 42 (2012).
33. S. B. Doma and F. N. El-Gammal, *J. Theor. Appl. Phys.* **6**, 28 (2012).
34. S. B. Doma, M. O. Shaker, A. M. Farag, and F. N. El-Gammal, *Acta. Phys. Pol. A* **126**, 700 (2014).
35. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, N. M. Rosenbluth, A. M. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
36. S. Pottorf, A. Puzer, and M. Y. Chou, *Eur. J. Phys.* **20**, 205 (1999).
37. R. W. Hamming, *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, McGraw-Hill, New York (1973).
38. A. Papoulis, *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes*, McGraw-Hill, New York (1965).
39. S. Larsson, *Phys. Rev.* **169**, 49 (1968).
40. M. B. Ruiz, *Int. J. Quantum Chem.* **101**, 246 (2005).
41. M. Puchalski and K. Pachucki, *Phys. Rev. A* **73**, 022503 (2006).
42. N. L. Guevara, F. E. Harris, and A. V. Turbiner, *Int. J. Quantum Chem.* **109**, 3036 (2009).
43. D. Ruenn Su, *Chin. J. Phys.* **27**, 157 (1989).
44. O. A. Al-Hujaj and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **70**, 033411 (2004).
45. Z. C. Yan and G. Drake, *Phys. Rev. A* **52**, 3711 (1995).
46. X. Guan and B. Li, *Phys. Rev. A* **63**, 043413 (2001).