

УДК 530.145.6 + 539.128.2

М. ДИНЕЙХАН, С. А. ЖАУТАШЕВА, Г. Г. САЙДУЛЛАЕВА

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА С УЧЕТОМ РЕЛЯТИВИСТСКОГО ХАРАКТЕРА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Предложен метод определения релятивистской поправки к энергетическому спектру связанного состояния, состоящего из  $n$  частиц. В рамках этого подхода вычислен энергетический спектр и конститuentные массы составляющих частиц. В частности вычислен энергетический спектр иона молекулы водорода  $H_2^+$ ,  $HD^+$  и конститuentной массы электрона. Получены численные результаты, которые удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

**Введение.** В последние несколько лет в рамках эксперимента по лазерной спектроскопии [1], с большой точностью определен энергетический спектр иона молекулы водорода  $H_2^+$  и  $HD^+$  как основного, так и возбужденного состояний. Энергетический спектр этих молекул определяется в рамках различных методов вычисления: вариационный подход [2], неадиабатические методы вычисления [3], традиционная молекулярная физика [4], а также использованы методы координаты Hylleraas [5]. Все эти подходы при определении энергетического спектра ограничиваются низшим порядком константы электромагнитного взаимодействия  $\alpha_{em}$ , т.е.  $\alpha_{em}^6$  порядка.

В нашем подходе мы не проводим разложения по степени  $\alpha_{em}$ , а исходим из релятивистского гамильтониана, который удовлетворяет условию ковариантности относительно группы Лоренца.

Работа построена следующим образом. Во втором пункте изложены детали определения массового спектра релятивистского связанного состояния, состоящего из  $n$ -частиц. В третьем пункте вычислен энергетический спектр системы. В четвертом пункте предложены основные результаты и обсуждения.

**2. Определение массового спектра релятивистского связанного состояния, состоящего из  $n$ -частиц.** Рассмотрим взаимодействие  $n$  заряженных, скалярных частиц во внешнем калибровочном поле. Массу связанного состояния определим на основе исследования асимптотического поведения функции поляризованной петли для  $n$  заряженных скалярных частиц во внешнем калибровочном поле. Функция поляризованной петли для  $n$  скалярных частиц записывается следующим образом:

$$\Pi(x-y) = \langle G_{m_1}(x, y|A) G_{m_2}(y, x|A) \times G_{m_3}(x, y|A) \dots G_{m_n}(x, y|A) \rangle_A \quad (1)$$

Здесь проводится усреднение по внешнему калибровочному полю  $A_\alpha(x)$ . Функция Грина  $G_m(y, x|A)$  для скалярной частицы во внешнем калибровочном поле определяется из уравнения:

$$\left[ \left( i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + \frac{g}{c\hbar} A_\alpha(x) \right)^2 + \frac{c^2 m^2}{\hbar^2} \right] (x, y|A) = \delta(x-y), \quad (2)$$

где  $m$  - масса скалярной частицы,  $g$  - константа связи. При усреднении по внешнему калибровочному полю  $A_\alpha(x)$  ограничивается только низшим порядком, т.е. учитываем только двухточечный Гауссов коррелятор:

$$\langle \exp \left\{ i \int dx A_\alpha(x) J_\alpha(x) \right\} \rangle_A$$

$$\exp \left\{ -\frac{1}{2} \iint dx dy J_\alpha(x) D_{\alpha\beta}(x-y) J_\beta(y) \right\}, \quad (3)$$

здесь  $J_\alpha(x)$  - реальный ток, а пропатор  $D_{\alpha\beta}(x-y)$  калибровочного поля:

$$D_{\alpha\beta}(x-y) = \langle A_\alpha(x) A_\beta(y) \rangle_A \quad (4)$$

Массу связанного состояния обычно определяют через  $\Pi(x-y)$  функцию - петли следующим образом:

$$M_B = - \lim_{|x-y| \rightarrow \infty} \frac{\ln \Pi(x-y)}{|x-y|}. \quad (5)$$

Таким образом, если мы определим функцию - петли, то сможем определить массу  $n$ -частичного связанного состояния. Из (1) видно, что для

определения функции-петли, прежде всего, необходимо определить функцию Грина.

Решение уравнения (2) представляется в виде функционального интеграла следующим образом (подробно см. [6]):

$$G_m(x, y|A) = \int_0^\infty \frac{ds}{(4s\pi)^2} \exp\left\{-sm^2 - \frac{(x-y)^2}{4s}\right\} \times \int d\sigma_\beta \cdot \exp\left\{ig \int_0^x d\xi \cdot \frac{\partial Z_\alpha(\xi)}{\partial \xi} \cdot A_\alpha(\xi)\right\}, \quad (6)$$

где введены обозначения:

$$Z_\alpha(\xi) = (x-y)_\alpha \xi + y_\alpha - 2\sqrt{s}B_\alpha(\xi),$$

$$d\sigma_\beta = N\delta B_\beta \exp\left\{-\frac{1}{2} \int_0^1 d\xi B^2(\xi)\right\} \quad (7)$$

с нормировкой:

$$B_\alpha(0) = B_\alpha(1) = 0, \quad \int d\sigma_\beta = 1.$$

Подставляя (5) в (1) и проводя усреднение по внешнему фоновому полю  $A_\alpha(x)$  для функции – петли, имеем:

$$\Pi(x) = \int \int_0^\infty \dots \int_0^\infty \frac{d\mu_1 d\mu_2 \dots d\mu_n}{(8\pi^2 x)^n} \cdot J(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n) \times \exp\left\{-\frac{|x|}{2} \left(\frac{m_1^2}{\mu_1} + \mu_1\right) - \frac{|x|}{2} \left(\frac{m_2^2}{\mu_2} + \mu_2\right) - \dots - \frac{|x|}{2} \left(\frac{m_n^2}{\mu_n} + \mu_n\right)\right\}. \quad (8)$$

Здесь

$$J(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n) = N_1 N_2 \dots N_n \int \int \dots \int \delta r_1 \delta r_2 \dots \delta r_n \times \exp\left\{-W_{1,1} - W_{2,2} - \dots - W_{n,n} + 2 \sum_{i,j=1;i \neq j} W_{i,j}\right\} \times (9)$$

$$\times \exp\left\{-\frac{1}{2} \int_0^x d\tau [\mu_1 \dot{r}_1^2(\tau) + \mu_2 \dot{r}_2^2(\tau) + \dots + \mu_n \dot{r}_n^2(\tau)]\right\},$$

где

$$W_{i,j} = (-1)^{i+j} \frac{g^2}{2} \int_0^x \int_0^x d\tau_1 d\tau_2 \dot{Z}_\alpha^{(i)}(\tau_1) \times \times D_{\alpha\beta} \left\{Z^{(i)}(\tau_1) - Z^{(j)}(\tau_2)\right\} \dot{Z}_\beta^{(j)}(\tau_2). \quad (10)$$

Мы определили функцию – петли для  $n$  скалярных частиц с массами  $m_1, m_2, \dots, m_n$ , которые взаимодействуют между собой обменным калибровочным полем. Существуют два типа взаимодействия: первое – взаимодействие составляющих частиц посредством калибровочного поля, вклад которого определяется непосредственно  $W_{i,j} (j \neq i)$ , второе – взаимодействие составляющих частиц самих с собой, т.е. диаграмма собственной энергии, вклад которой определяется  $W_{1,1}, W_{2,2}, \dots, W_{n,n}$ . В нерелятивистском пределе величина  $W_{i,j}$  соответствует потенциальным взаимодействиям, а  $W_{1,1}, W_{2,2}, \dots, W_{n,n}$  соответствуют не потенциальным взаимодействиям, определяющим вклад в массу собственной энергии. С другой стороны, функциональный интеграл (9) похож на Фейнмановский интеграл по траекториям для движения  $n$  заряженных частиц с массами  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$  в нерелятивистской квантовой механике [7]. Взаимодействия между этими частицами описывается выражением (10), которое содержит как потенциальные, так и не потенциальные взаимодействия. Тогда соответствующий гамильтониан взаимодействия записывается в виде:

$$H = \frac{1}{2\mu_1} \vec{P}_1^2 + \frac{1}{2\mu_2} \vec{P}_2^2 + \dots + \frac{1}{2\mu_n} \vec{P}_n^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n). \quad (11)$$

Из уравнения Шредингера (УШ)

$$H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = E(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \quad (12)$$

будем определять  $E(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$  собственные значения. Согласно (5) интеграл (9) можем представить в виде:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} J(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n) = \exp\{-xE(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)\}. \quad (13)$$

В этом приближении интеграл, представленный в (8), в пределе  $|x| \rightarrow \infty$  вычисляется методом перевала. Для масс связанного состояния получаем:

$$M = \frac{1}{2} \min_{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n} \left\{ \frac{m_1^2}{\mu_1} + \mu_1 + \frac{m_2^2}{\mu_2} + \mu_2 + \dots + \frac{m_n^2}{\mu_n} + \mu_n + 2E(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n) \right\}, \quad (14)$$

а для  $\mu_j$  - конститuentных масс составляющих имеем систему уравнений:

$$\mu_j - \frac{m_j^2}{\mu_j} + 2\mu_j \frac{dE(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)}{d\mu_j} = 0; \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (15)$$

Параметры  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$  рассматриваются как конститuentные массы составляющих в связанном состоянии. Эти массы отличаются от  $m_1, m_2, \dots, m_n$  - масс исходного (свободного) состояния.

При дальнейших вычислениях вводим инвариантную массу двух-, трех- и  $n$ -тельных систем следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{M_2} &= \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}; & \frac{1}{M_3} &= \frac{1}{\mu_1 + \mu_2} + \frac{1}{\mu_3}; \\ & & \frac{1}{M_4} &= \frac{1}{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3} + \frac{1}{\mu_4}; \\ & & & \dots \\ \frac{1}{M_n} &= \frac{1}{\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_{n-1}} + \frac{1}{\mu_n}. \end{aligned} \quad (16)$$

Тогда массовый спектр связанного состояния с помощью этих масс выражается в виде:

$$M = \mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n + M_2 \frac{dE}{dM_2} + M_3 \frac{dE}{dM_3} + \dots + M_n \frac{dE}{dM_n}. \quad (17)$$

В этом случае для конститuentной массы  $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$  получаем:

$$\begin{aligned} 1 - \frac{m_1^2}{\mu_1^2} + \frac{2M_2^2 dE}{\mu_1^2 dM_2} + \frac{2M_3^2 dE}{(\mu_1 + \mu_2)^2 dM_3} + \dots + \\ + \frac{2M_n^2 dE}{(\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_{n-1})^2 dM_n}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 1 - \frac{m_2^2}{\mu_2^2} + \frac{2M_2^2 dE}{\mu_2^2 dM_2} + \frac{2M_3^2 dE}{(\mu_1 + \mu_2)^2 dM_3} + \dots + \\ + \frac{2M_n^2 dE}{(\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_{n-1})^2 dM_n}; \\ 1 - \frac{m_3^2}{\mu_3^2} + \frac{2M_3^2 dE}{\mu_3^2 dM_3} + \frac{2M_4^2 dE}{(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3)^2 dM_4} + \dots + \\ + \frac{2M_n^2 dE}{(\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_{n-1})^2 dM_n}; \\ \vdots \\ 1 - \frac{m_{n-1}^2}{\mu_{n-1}^2} + \frac{2M_{n-1}^2 dE}{\mu_{n-1}^2 dM_{n-1}} + \frac{2M_n^2 dE}{(\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_{n-1})^2 dM_n}; \\ 1 - \frac{m_n^2}{\mu_n^2} + \frac{2M_n^2 dE}{\mu_n^2 dM_n}. \end{aligned} \quad (18)$$

Из (17) и (18) видно, что для определения массы и конститuentной массы релятивистского связанного состояния, прежде всего, нужно определить собственные значения  $E(M_2, M_3, \dots, M_n)$  релятивистского гамильтониана из (12).

Системы уравнения представленные в (18), при конкретных значениях  $n$ , определяются аналитически, в частности для  $n = 2$  имеем:

$$M = \mu_1 + \mu_2 + M_2 \frac{dE(M_2)}{dM_2} + E(M_2); \quad \frac{1}{M_2} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}. \quad (19)$$

$$\mu_1 = \sqrt{m_1^2 - 2M_2^2 \frac{dE}{dM_2}}; \quad \mu_2 = \sqrt{m_2^2 - 2M_2^2 \frac{dE}{dM_2}},$$

а для  $n = 3$  из (18) получаем

$$\begin{aligned} M = \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \\ + M_2 \frac{dE}{dM_2} + M_3 \frac{dE}{dM_3} + E(M_2, M_3); \\ \mu_3 = \sqrt{m_3^2 - 2M_3^2 \frac{dE}{dM_3}}; \end{aligned}$$

$$\mu_j = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{m_j^2 - 2M_2^2 \frac{dE}{dM_2}} \times \quad (20)$$

$$\times \sqrt{1 + \sqrt{1 - \frac{8M_2^2 M_3^2 \left(\frac{dE}{dM_3}\right)}{\left(m_1^2 - 2M_2^2 \left(\frac{dE}{dM_2}\right)\right) \left(m_2^2 - 2M_2^2 \left(\frac{dE}{dM_2}\right)\right)}}};$$

$$\frac{1}{M_2} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}; \quad \frac{1}{M_3} = \frac{1}{\mu_1 + \mu_2} + \frac{1}{\mu_3};$$

$$j = 1, 2.$$

Мы аналитически определили массы и конституэнтные массы связанного состояния с учетом релятивистского характера взаимодействия.

### 3. Трехтельная кулоновская система

**3.1 Гамильтониан взаимодействия.** Рассмотрим трехтельную систему с кулоновским взаимодействием. Пусть  $\mu_1, \mu_2, \mu_3$  - конституэнтные массы, а  $Z_1 e, Z_2 e, -Z_3 e$  - заряды частиц, соответственно. Гамильтониан системы записывается в стандартном виде:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{1}{\mu_j} \vec{p}_j^2 + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{Z_1 Z_3 e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} - \frac{Z_3 Z_2 e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_3|}. \quad (21)$$

Выбирая систему центра масс  $\vec{z}$  и координаты Якоби  $\{\vec{x}, \vec{y}\}$  в виде:

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \frac{\mu_2}{\mu_1 + \mu_2} \cdot \vec{x} + \frac{\mu_3}{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3} \cdot \vec{y} + \vec{R}; \\ \vec{r}_2 &= -\frac{\mu_1}{\mu_1 + \mu_2} \cdot \vec{x} + \frac{\mu_3}{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3} \cdot \vec{y} + \vec{R}; \\ \vec{r}_3 &= -\frac{\mu_1 + \mu_2}{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3} \cdot \vec{y} + \vec{R}; \end{aligned} \quad (22)$$

а также проводя некоторые упрощения из (21) для гамильтониана взаимодействия получаем:

$$H = \frac{1}{2M_2} \vec{p}_x^2 + \frac{1}{2M_3} \vec{p}_y^2 + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{x} - \frac{Z_1 Z_3 e^2}{|\vec{x} M_2 / \mu_1 + \vec{y}|} - \frac{Z_3 Z_2 e^2}{|\vec{x} M_2 / \mu_2 - \vec{y}|}. \quad (23)$$

Здесь кинетическая энергия полной системы опущена и  $M_2$  и  $M_3$  представлены в (12). Переходим к безразмерным переменным  $\vec{R}, \vec{r}$ :

$$\vec{x} = \frac{1}{M_2 e^2} \vec{R}; \quad \vec{y} = \frac{1}{\sqrt{M_2 M_3} e^2} \vec{r}, \quad (24)$$

тогда для УШ получаем:

$$\left\{ \frac{1}{2} \vec{p}_R^2 + \frac{1}{2} \vec{p}_r^2 + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{Z_1 Z_3 \lambda}{|\vec{r} + c_1 \vec{R}|} - \frac{Z_3 Z_2 \lambda}{|\vec{r} - c_2 \vec{R}|} + \frac{1}{2} U \right\} \psi(\vec{R}, \vec{r}) = 0. \quad (25)$$

Здесь  $E$  - энергетический спектр трехтельной системы параметризован следующим образом:

$$E = -\frac{e^4}{2} \cdot M_2 \cdot U(M_2, M_3), \quad (26)$$

где  $U$  - энергетический параметр. Наша задача из (25) определить волновую функцию (ВФ) и энергетический параметр  $U$  в рамках метода осцилляторного представления (ОП) [8]. Гамильтониан (21) описывает взаимодействия трехтельной кулоновской системы, как  $H_2^+, HD^+, HT^+$ , и др., т.е. все ионы изотопов молекулы водорода, а также экзотические атомы легких ядер в частности атомкуле гелия, или экзотического атома  $\pi, k$  мезонов.

**3.2. Двухцентровое адиабатическое приближение.** Адиабатическое приближение является одним из самых распространенных методов в физике и заключается в приближенном разделе «быстрых» и «медленных» переменных динамической системы. В квантовой механике (КМ) основы адиабатического приближения были заложены Борном и Оппенгеймером [9], а затем Борном и Фоком [10] для решения УШ.

В данном пункте изложим детали применения двухцентрового приближения для решения УШ в кулоновской трехтельной системе в рамках ОП.

Мы будем рассматривать трехтельную кулоновскую систему, состоящую из ядра, адрона и электрона, в частности ион молекулы водорода. Эта система состоит из двух тяжелых адронов и одного электрона. Поэтому при определении

энергетического спектра и волновой функции данной системы, вполне возможно применение двухцентрового адиабатического приближения [11]. В двухцентровом приближении ВФ системы представляется в виде:

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \chi(\vec{R}) \cdot \Phi(R, \vec{r}), \quad (27)$$

где  $\Phi(R, \vec{r})$  - волновая функция внутренней системы, обычно определяется следующим образом:

$$\Phi(R, \vec{r}) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \cdot \tilde{\Phi}_m(R; \rho, z). \quad (28)$$

Здесь  $\varphi$  - азимутальный угол, а  $m$  - азимутальное квантовое число. Учитывая (27) и (28) в цилиндрической системе координат, после некоторых упрощений из (25) для УШ имеем:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{Z_1 Z_3 \lambda}{\sqrt{\rho^2 + z^2 + 2c_1 R \cdot z + c_1^2 R^2}} + \frac{Z_2 Z_3 \lambda}{\sqrt{\rho^2 + z^2 - 2c_2 R \cdot z + c_2^2 R^2}} \right\} \tilde{\Phi}_m(R; \rho, z) = E_r(R) \tilde{\Phi}_m(R; \rho, z), \quad (29)$$

где  $E_r(R)$  - является собственным значением гамильтониана внутренней системы. В (29) переменная  $R$  рассматривается как внешний параметр. Стандартное вычисление обычно приводит к вытянутым сфероидальным координатам [12], при этом параметр  $R$  определяет фокусное расстояние, а  $E_r(R)$  - называется термом энергетических уровней. В вытянутых сфероидальных системах координат УШ представленное в (29), допускает разделение переменных, и получается два уравнения, которые решаются только численными методами (подробно см. в [12, 13]). В данной работе, для определения энергетического терма  $E_m(R)$  применяем метод ОП.

**3.3. Двухцентровое приближение в ОП.** Теперь приступим к вычислению энергетического терма  $E_m(R)$  внутренней системы в рамках метода ОП. Для этого проводим замену переменных:

$$\rho = 2 \cdot \sqrt{\rho_1 \rho_2}, \quad z = (\rho_1 - \rho_2), \quad (30)$$

и переходим к параболической системе координат. После необходимых вычислений, из (28) имеем:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[ \rho_1 \frac{\partial^2}{\partial \rho_1^2} + \frac{\partial}{\partial \rho_1} + \rho_2 \frac{\partial^2}{\partial \rho_2^2} + \frac{\partial}{\partial \rho_2} - \frac{m^2}{4\rho_1} - \frac{m^2}{4\rho_2} \right] - \frac{Z_1 Z_3 \lambda \cdot (\rho_1 + \rho_2)}{\sqrt{(\rho_1 + \rho_2)^2 + 2c_1 R (\rho_1 - \rho_2) + c_1^2 R^2}} - (\rho_1 + \rho_2) E_r - \frac{Z_2 Z_3 \lambda \cdot (\rho_1 + \rho_2)}{\sqrt{(\rho_1 + \rho_2)^2 - 2c_2 R (\rho_1 - \rho_2) + c_2^2 R^2}} \right\} \times \tilde{\Phi}_m(R; \rho_1, \rho_2) = 0. \quad (31)$$

Для определения энергетического терма  $E_r(R)$  из (30) применим метод ОП. Перед тем как определить энергетический спектр и волновую функцию из УШ (30) с помощью метода ОП [8], уместно напомнить, что этот метод основан на идеях и методах квантовой теории скалярного поля. Одним из существенных отличий квантовой теории поля (КТП) от КМ является то, что квантованные поля, представляющие набор бесконечного числа осцилляторов для основного состояния или вакуума, при квантово - полевом взаимодействии сохраняют свою осцилляторную природу. В КМ собственные функции для большинства потенциалов, как правило, отличаются от гауссовского поведения осцилляторной волновой функцией. Поэтому для применения методов и идей КТП к решению квантово - механических задач следует в исходном радиальном УШ провести замену переменных таким образом, чтобы искомая волновая функция на больших расстояниях обладала гауссовским поведением, а трансформированное уравнение идентифицировать с радиальным УШ в пространстве с большой размерностью [8]. Отметим, что впервые похожая идея обсуждалась Фоком при решении задачи о спектре атома водорода с помощью трансформации в четырехмерном пространстве импульсов [14].

Следуя Фоку [15], будем считать асимптотическое поведение волновой функции внутренней системы кулоновским. В соответствии с изложенным проведем замену переменных следующим образом [8]:

$$\rho_k = q_k^2 \tilde{\Phi}_m = q_1^{|m|} q_2^{|m|} \Psi_m(q_1^2, q_2^2) \quad k=1,2. \quad (32)$$

Используя атомную систему единиц ( $\hbar = 1, e = 1, c = 1$ ), получим из (30) для УШ:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \left[ \frac{\partial^2}{\partial q_j^2} + \frac{d-1}{q_j} \cdot \frac{\partial}{\partial q_j} \right] - \frac{4Z_1 Z_3 \lambda (q_1^2 + q_2^2)}{\sqrt{(q_1^2 + q_2^2)^2 + 2c_1 R (q_1^2 - q_2^2) + c_1^2 R^2}} - \frac{4Z_1 Z_3 \lambda (q_1^2 + q_2^2)}{\sqrt{(q_1^2 + q_2^2)^2 + 2c_1 R (q_1^2 - q_2^2) + c_1^2 R^2}} - 4E_r (q_1^2 + q_2^2) - \frac{4Z_2 Z_3 \lambda (q_1^2 + q_2^2)}{\sqrt{(q_1^2 + q_2^2)^2 - 2c_2 R (q_1^2 - q_2^2) + c_2^2 R^2}} \right\} \Psi_m(q_1^2, q_2^2) = 0, \quad (33)$$

где  $d$  - размерность вспомогательного пространства, которая равна:

$$d = 2 + 2|m|. \quad (34)$$

В результате замены переменных мы получили модифицированное уравнение Шредингера в  $d$ -мерном вспомогательном пространстве  $R^d$ . Из (33) и (34) следует, что азимутальное квантовое число  $m$  вошло в определение размерности пространства  $d$ . Данный прием позволяет определить все интересующие нас характеристики, а именно, спектр и волновую функцию, решая модифицированное УШ только для основного состояния в  $d$ -мерном вспомогательном пространстве  $R^d$ .

Гамильтониан взаимодействия в  $d$ -мерном вспомогательном пространстве представлен следующим образом:

$$H = H_0 + \varepsilon(E_r) + H_I. \quad (35)$$

Здесь  $H_0$  - является гамильтонианом двух не связанных осцилляторов:

$$H_0 = \omega_1 (a_j^+(1) \cdot a_j(1)) + \omega_2 (a_j^+(2) \cdot a_j(2)), \quad (36)$$

где  $\omega_1$  и  $\omega_2$  - частота осциллятора,  $a$  и  $a^+$  - оператор уничтожения и рождения. А  $\varepsilon_0(E_r)$  - энергия основного состояния в нулевом приближении ОП [8], которая имеет вид:

$$\varepsilon_0(E_r) = \frac{d}{4} \omega_1 + \frac{d}{4} \omega_2 - 2 \frac{dE_r}{\omega_1} - 2 \frac{dE_r}{\omega_2} - 4(\omega_1 \omega_2)^{d/2} \times \exp\{-\omega_1 \beta_1 - \omega_2 \beta_2\} \cdot \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{d\beta_1 d\beta_2}{\Gamma^2(d/2)} \times \left[ \frac{Z_1 Z_3 \lambda (\beta_1 \cdot \beta_2)^{d/2-1} (\beta_1 + \beta_2)}{\sqrt{(\beta_1 + \beta_2)^2 + 2c_1 R (\beta_1 - \beta_2) + c_1^2 R^2}} - \frac{Z_2 Z_3 \lambda (\beta_1 \cdot \beta_2)^{d/2-1} (\beta_1 + \beta_2)}{\sqrt{(\beta_1 + \beta_2)^2 - 2c_2 R (\beta_1 - \beta_2) + c_2^2 R^2}} \right]. \quad (37)$$

Гамильтониан взаимодействия  $H_I$ , также представляется в нормальной форме по операторам рождения и уничтожения, причем он не содержит квадратичных слагаемых по каноническим переменным:

$$H_I = -\frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{\pi \cdot t}} \times \int_{-\infty}^\infty \frac{d\tau}{\sqrt{\pi}} e^{-\tau^2} \int \left( \frac{d\eta_1}{\sqrt{\pi}} \right)^d \int \left( \frac{d\eta_2}{\sqrt{\pi}} \right)^d \cdot e^{-\eta_1^2 - \eta_2^2} \cdot 4Z_3 \lambda \times \left[ Z_1 \exp\left\{ -(c_1 R)^2 t - \eta_1^2 \frac{\mu_1^+}{\omega} - \eta_2^2 \frac{\mu_1^-}{\omega} \right\} \times \times F\left( 2i\sqrt{\mu_1^+}(\eta_1 q_1); 2i\sqrt{\mu_1^-}(\eta_2 q_2) \right) - Z_2 \exp\left\{ -(c_2 R)^2 t - \eta_1^2 \frac{\mu_2^-}{\omega} - \eta_2^2 \frac{\mu_2^+}{\omega} \right\} \times \times F\left( 2i\sqrt{\mu_2^-}(\eta_1 q_1); 2i\sqrt{\mu_2^+}(\eta_2 q_2) \right) \right], \quad (38)$$

где введены обозначения:

$$\mu_1^\pm = \beta \pm 2R \cdot c_1 t + 2i\sqrt{t}\tau,$$

$$\mu_2^\pm = \beta \pm 2R \cdot c_2 t + 2i\sqrt{t}\tau$$

$$F(y_1; y_2) = e_2^{-y_1} :: e_2^{-y_2} :: + : e_2^{-y_2} : (1+1/2 : y_1^2 :) + : e_2^{-y_1} : (1+1/2 : y_2^2 :).$$

Здесь  $::$  является символом нормального упорядочения и мы использовали обозначение

$$e_2^x = e^x - 1 - x - x^2 / 2.$$

Вклад гамильтониана взаимодействия  $H_I$  рассматривается как малое возмущение. В квантовой теории поля, после представления гамильтониана взаимодействия в нормальной форме требование отсутствия в гамильтониане взаимодействия полевых операторов второй степени по существу эквивалентно перенормировкам константы связи и волновой функции [16]. Более того, такая процедура позволяет учесть основной квантовый вклад через перенормировку масс и энергии вакуума. Другими словами, все квадратичные формы полностью включены в гамильтониан свободного осциллятора. Данное требование позволяет сформулировать согласно ОП [8], условия:

$$\frac{\partial \varepsilon_0(E)}{\partial \omega_1} = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon_0(E)}{\partial \omega_2} = 0, \quad (39)$$

для нахождения частоты  $\omega_1$  и  $\omega_2$  не связанных осцилляторов, которые определяют основной квантовый вклад. Таким образом, учитывая (31), из уравнений (37) и (39) мы можем определить энергию  $E_r$  внутренней системы как функцию от параметра  $R$ .

**3.4. Определение зависимости термов двух кулоновских центров от  $R$ .** Приступим к определению зависимости терма двух кулоновских центров от параметра  $R$  в нулевом приближении ОП. Учитывая (37) из системы уравнений (37) и (39) определим частоту осциллятора  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , а также энергетический спектр внутренней системы  $E_r(R)$ , как функцию параметра  $R$ . В общем случае эти системы аналитически не решаются, поэтому рассмотрим частный случай. Рассмотрим случай, когда  $R = 0$ , тогда из (37) имеем:

$$\varepsilon_0(E_r) = \frac{d\omega_1}{4} + \frac{d\omega_2}{4} - \frac{2dE_r}{\omega_1} - \frac{2dE_r}{\omega_2} + 4Z_3\lambda(Z_1 + Z_2). \quad (40)$$

В этом случае, из (39) получаем:

$$\omega_1 = \omega_2 = \sqrt{-8E_r}. \quad (41)$$

Частоты осцилляторов одинаковы.

Рассмотрим другой предельный случай, когда  $R = \infty$ , тогда из (39) имеем:

$$\varepsilon_0(E_r) = \frac{d\omega_1}{4} + \frac{d\omega_2}{4} - \frac{2dE_r}{\omega_1} - \frac{2dE_r}{\omega_2}. \quad (42)$$

В этих параметрах (41) энергетический спектр модифицированного УШ в нулевом приближении для основного состояния ( $m = 0$ ) имеет вид:

$$\varepsilon_0(E_r) = \omega - \frac{8E_r}{\omega} - \frac{Z_3(Z_1 + Z_2)\omega\lambda}{4} - \frac{Z_3(Z_1 + Z_2)\omega\lambda}{4} \cdot \left( 2 \cdot \frac{1 - e^{-\omega R\lambda}}{\omega R\lambda} - e^{-\omega R\lambda} \right). \quad (43)$$

При определении энергетического спектра трехтельной системы  $E_r(R)$ , рассматривается как дополнительный потенциал взаимодействия. Термы двух кулоновских центров определяются следующим образом:

$$E_r(R) = \frac{\omega^2}{8} - \frac{Z_3\lambda(Z_1 + Z_2)\omega}{4} - \frac{Z_3\lambda(Z_1 + Z_2)\omega}{4} \left[ 2 \frac{1 - e^{-\lambda R\omega}}{\lambda R\omega} - e^{-\lambda R\omega} \right]. \quad (44)$$

**3.5. Энергетический спектр системы.** Учитывая (27) и (29) приводя усреднение полного гамильтониана по  $\Phi(R, \vec{r})$  - волновой функции внутренней системы, после простых упрощений из (25) имеем:

$$\left[ \frac{1}{2} \vec{P}_R^2 + \frac{Z_1 Z_2}{R} + V(R) + \frac{1}{2} U \right] \chi(R) = 0, \quad (45)$$

где введено обозначение:

$$V(R) = E_r(R) + \frac{1}{8} \left( \frac{1}{\omega} \cdot \frac{\partial \omega}{\partial R} \right)^2. \quad (46)$$

Первое слагаемое в (46)  $E_r(R)$ - потенциал, созданный электрическим полем заряда  $Z_3$ , а второе слагаемое связано с относительным движением тяжелых частиц. Таким образом, определение энергетического спектра и ВФ трехтельной системы с кулоновским взаимодействием сводится к вычислению энергетического спектра двухтельной системы с добавочным потенциалом взаимодействия. Теперь приступим к определению энергетического спектра системы с помощью метода ОП. Проводим замену переменных следующим образом:

$$R = q^{2\alpha}; \quad \chi(R) \Rightarrow q^{2\alpha} \psi(q^2), \quad (47)$$

где параметр  $\alpha$  - связан с асимптотическим поведением ВФ. Из (46) для модифицированного УШ имеем:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{d-1}{q} \cdot \frac{\partial}{\partial q} \right] + 4Z_1 Z_2 \alpha^2 q^{2(\alpha-1)} + 4\alpha^2 q^{2(2\alpha-1)} V(q^{2\alpha}) + 2U\alpha^2 q^{2(2\alpha-1)} \right\} \psi(q^2) = 0. \quad (48)$$

В нулевом приближении ОП параметр  $U$  равен:  $U = \lambda^2 U_0$ .

$$U_0 = \max_a \left( -2Z_1 Z_2 \tilde{\sigma} \cdot \frac{\Gamma(2\alpha + 2\alpha l)}{\Gamma(3\alpha + 2\alpha l)} - \frac{\lambda^2 \tilde{\sigma}^2 \Gamma(2 + \alpha + 2\alpha l)}{4\alpha^2 \Gamma(3\alpha + 2\alpha l)} - \frac{2\tilde{\sigma}^{3+2l}}{\alpha \cdot \Gamma(3\alpha + 2\alpha l)} \times \int_0^\infty ds \cdot s^{2+2l} \exp\left\{ -(\tilde{\sigma} \cdot s)^{1/\alpha} \right\} W(s) \right), \quad (49)$$

где  $\tilde{\sigma}$  - вариационный параметр, который связан с асимптотическим поведением ВФ для данного потенциала, а  $\tilde{\sigma}$  - определяется из уравнения:

$$\tilde{\sigma} - \frac{4\alpha^2 \Gamma(2\alpha + 2\alpha l)}{\lambda^2 \Gamma(2 + \alpha + 2\alpha l)} + \frac{4\tilde{\sigma}^{2+2l}}{\lambda^2 \cdot \Gamma(2 + \alpha + 2\alpha l)} \times \int_0^\infty ds \cdot s^{2+2l} \exp\left\{ -(\tilde{\sigma} \cdot s)^{1/\alpha} \right\} \times \left[ 3\alpha + 2\alpha l - (\tilde{\sigma} \cdot s)^{1/\alpha} \right] \cdot \left[ W_1(s) + \frac{\lambda^2}{8} W_D(s) \right]. \quad (50)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$W_1(s) = \frac{\tau^2}{8} - \frac{\tau \cdot Z_3 (Z_1 + Z_2)}{4} - \frac{\tau \cdot Z_3 (Z_1 + Z_2)}{4} \left( 2 \frac{1 - e^{-s\tau}}{s\tau} - e^{-s\tau} \right), \quad (51)$$

$$W_D(s) = \frac{4\tau^2 s^2 e^{-2s\tau}}{(1 + 2s^2 \tau^2 e^{-s\tau})^2}, \quad (52)$$

а параметр  $\tau$  определяется из уравнения как функция от  $s$ :

$$\tau - Z_3 (Z_1 + Z_2) - Z_3 (Z_1 + Z_2) (1 + s\tau) e^{-s\tau} = 0. \quad (53)$$

#### 4. Результаты и обсуждения.

Теперь переходим к рассмотрению конкретного связанного состояния и определим энергетический спектр с учетом релятивистского характера взаимодействия. В настоящее время энергетический спектр иона молекулы водорода таких, как  $H_2^+$ ,  $HD^+$ ,  $HT^+$  и др. экспериментально и теоретически интенсивно исследуются [1-5]. Это связано с определением загрязнения окружающей среды. Настоящее время существует различные теоретические подходы, которые посвящены вычислению энергетического спектра этих систем с учетом релятивистских спектров. В рамках нашего подхода определяем энергетический спектр,  $H_2^+$ ,  $HD^+$  как основного так и орбитального возбужденного состояний. Согласно (26) прежде всего, проводим следующие вычисления:

$$\frac{\partial E}{\partial M_2} = -\frac{\alpha_{em}^2 \lambda^2 \tilde{\sigma}^2}{8\alpha} \cdot \frac{\Gamma(2 + \alpha + 2\alpha l)}{\Gamma(3\alpha + 2\alpha l)}, \quad (54)$$

Энергетический спектр иона молекулы водорода  $H_2^+$ ,  $HD^+$  для основного и орбитального возбужденного состояний

Элемент	$\ell$	$U_0$	$\frac{\partial E}{\partial M_2} \frac{1}{\alpha_{em}^2}$	$\frac{\partial E}{\partial M_3} \frac{1}{\alpha_{em}^2}$	$\Delta_p$	$\Delta_d$	$\Delta_e$	$E, a.e.m.$
$H_2^+$	0	0.880309	-0.00009	-0.440065	0.050315	-	0.371149	-0.595999
	1	0.869302	-0.0006	-0.434051	0.275625	-	0.36749	-0.594075
$HD^+$	0	0.880251	-0.000082	-0.440044	0.111769	0.055954	0.371206	-0.60344
	1	0.869357	-0.00045	-0.435129	0.36782	0.184054	0.367458	-0.599615



$$\frac{\partial E}{\partial M_3} = -\frac{\alpha_{em}^2}{2} \left[ U_0(\lambda) - \frac{\lambda^2 \tilde{\sigma}^2}{4\alpha} \cdot \frac{\Gamma(2 + \alpha + 2\alpha l)}{\Gamma(3\alpha + 2\alpha l)} \right],$$

где  $U_0$  - представляется из (49),  $\alpha$  - вариационный параметр, который связан с асимптотическим поведением волновой функции, для изотопа атома водорода оказалось равен  $\alpha = 0.5$ .

Наши результаты показывают, что энергетический спектр иона молекулы водорода  $H_2^+$ ,  $HD^+$  согласуется с результатами работ [1-5].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Gremaud B., Delande D., and Büilly N.* // J. Phys. B 31, 383 (1998); *Schiller S. and Lammerzahl C.* // Phys. Rev. A 68, 053406 (2003).
2. *Korobov V.I.* // Phys. Rev. A 73, 024502 (2006); *Korobov V.I., Hilico L., Karr J.-Ph.* // Phys. Rev. A 74, 040502(R) (2006).
3. *Moss R.E.* // Chem. Phys. Lett. 311, 231 (1999); *Moss R.E.* // J. Phys. B 32, L89 (1999).
4. *Taylor J.M., Yan Z.-C., Dalgarno A., Babb J.F.* // Mol. Phys. 97, 25(1999); *Taylor J.M., Dalgarno A., Babb J.F.* // Phys. Rev. A 60, R2630 (1999).
5. *Korobov V.I.* // Phys. Rev. A 61, 064503 (2000); *Li H., Wu J., Zhou B.-L., Zhu J.-M., Yan Z.-C.* // Phys. Rev. A 75, 012504 (2007).
6. *Dineykhon M., Efimov G.V., Namsrai Kh.* // Fortschr. Phys. 39, 259 (1991).
7. *Feynman R.P., Hibbs A.P.* Quantum Mechanics and Path Integrals (Mc Graw – Hill, New York, 1963).
8. *Dineykhon M., Efimov G.V., Ganbold G., Nedelko S.N.* Oscillator representation in quantum physics, (Lecture Notes in Physics, Springer – Verlag, Berlin, 1995). V. 26.
9. *Born M.* // Oppenheimer R., Ann. d. phys., Bd84, 457(1927).
10. *Born M., Fock V.* // Zs. phys., Bd51, 165(1928).
11. *Komarov I.V., Ponomarev L.I., Slavyanov S.Yu.* Spheroidal and Coulomb Spheroidal Functions (Nauka, Moscow, 1976); *Vinitiski S.I., Ponomarev L.I.* // Sov Jour. Part. Nucl., 13, 557(1982).
12. *Abramowitz M., Stegun.* Handbook of mathematical functions with formulas graphs and mathematical tables, National bureau of Standorts Applied Mathematics. Series, (1964).
13. *Solov'ev E.A.* // Usphehi Phys. Nauk, 157, 437(1989); *Jaffe G.* // Z. Phys., 87, 535(1934); *Beber W.G., Hasse H.R.* // Proc. Cambr. Philos. Soc., 31, 564(1935); *Bates D.R., Ledsham K., Stewart A.L.* // R.Sos. London, Ser. A 246, 215(1953).
14. *Fock V.A.* The Principles of Quantum Mechanics, Nauka, Moscow, 1976; Mir, Moscow, 1978.
15. *Fock V.A.* // Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Fiz. 18, 161 (1954).
16. *Fradkin E.S.* // Nucl. Phys. 49, 624(1963); *Hayashi K., Hirayama M., et al* // Fortschr. Phys. 15, 625(1967); *Salam A.* Nonpolynomial Lagrangians. Renormalization and Gravity. Gordon and Breach Science Publ., N.Y. (1971).
17. *Korobov V.I.* // Phys.Rev. A 70, 012505 (2004).

#### Резюме

$n$ -бөлшектерден тұратын, байланыс күйінің энергетикалық спектріндегі релятивистік түзетуді анықтаудың әдісі ұсынылған. Осы әдіс негізінде құраушы бөлшектердің энергетикалық спектрлері мен конститuentті массалары есептелді. Осыған қоса,  $H_2^+$ ,  $HD^+$  сутегі молекуласы ионының энергетикалық спектрі және электронның конститuentті массасы есептелді. Тәжірибелік мәліметтермен қанағаттанарлықтай үйлесетін сандық нәтижелер алынды.

#### Summary

In this work we suggest the method of determination of the relativistic correction to the energy spectrum of the bound states, consisting of  $n$  particles. Within the frames of this approach the energy spectrum and constituent mass of particles are calculated. In particular, the energy spectrum of the hydrogen molecular ions  $H_2^+$ ,  $HD^+$  and constituent mass of electron are determined. The numerical results are in a good agreement with the experimental data.

КазНУ им. аль-Фараби,  
г. Алматы

Поступила 8.05.08г.