

Н. Ж. ТАКИБАЕВ

РЕШЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ИОННОЙ СИСТЕМЫ H_2^+

В модели рассеяния легкой частицы на двух тяжелых центрах, при учете полюсных членов парных t -матриц и эффективного сепарабельного поля, получены аналитические решения задачи на связанные состояния электрона в системе двух протонов.

I. Введение. В работах [1-3] был предложен способ получения точных решений в задачах квантовой механики трех тел, в которых рассматривается рассеяние легкой частицы на паре двух очень тяжелых частиц, а парные взаимодействия имеют сепарабельную форму. Получение точных решений означает, что решения проводятся до конца и записываются в аналитическом виде. Это оказывается возможным вследствие того, что сепарабельная (или «расщепленная») форма парных сил позволяет записать парные решения точно, а предел $\zeta = m/M \rightarrow 0$, где m, M - масса легкой и тяжелой частиц, ведет к развязке кинематических переменных для разных пар частиц. В результате решения трехчастичной задачи тоже записываются точно.

В силу того, что сепарабельные потенциалы представляют собой простой класс среди многообразия различных типов взаимодействий, то в практических целях важно расширить диапазон приложений и обобщить метод получения точных решений для различных задач квантовой механики трех тел.

Ключом к реализации таких обобщений может служить «полология» - подход, в котором в качестве главного приближения берется вклад ближних и наиболее сильных особенностей парных амплитуд рассеяния, т.е. вклад от наиболее близких к физической области полюсов этих амплитуд [4]. Дополнительным инструментом может служить метод сепарабилизации парных t -матриц или парных потенциалов [5,6].

Задача H_2^+ имеет большую историю и исключительное значение, особенно, в квантовой теории двухатомных молекул и квантовой химии [7-10]. В области спектра, т.е. в области отрицательных полных энергий для такой трехчастичной системы, состоящей из одного электрона и двух малоподвижных протонов, проведено огромное число расчетов разнообразными способами и методами. Анализ касался, прежде всего, клас-

сификации уровней молекулярного спектра и решений ядерного уравнений Шредингера, когда электронное уравнение считается уже определенным (см., например, [7-9]).

Такое разделение автоматически возникает в пределе $\zeta = m/M \rightarrow 0$, где m - масса электрона, а M - масса протона. Это предел называют приближением Борна-Оппенгеймера. Отметим, что полное решение задачи является весьма сложным, так как задача рассеяния трех заряженных частиц имеет свои специфические трудности, которые связаны с характером кулоновских сил, недостаточно быстро спадающих на больших расстояниях [11,12].

Решение электронного уравнения требует в общем случае преодоления этих трудностей, причем даже для определения спектра, т.е. дискретных уровней электрона в системе двух протонов, решения находятся лишь численно, например, с использованием метода линейной комбинации независимых атомных орбиталей, взятых в качестве исходного базиса [7, 8].

Мы здесь рассмотрим решение электронного уравнения, записанного в интегральной форме, которое следует из уравнений Фаддеева и адекватно электронному уравнению Шредингера, имеющему дифференциальную форму.

Введем необходимые упрощения, чтобы обозначить рамки, рассматриваемой здесь модели и указать на ее определенные ограничения.

Будем считать, что:

1) двухчастичное кулоновское взаимодействие является экранированным на больших расстояниях и разбиение на парные взаимодействующие подсистемы является оправданным;

2) главным приближением для парной t -матрицы взаимодействия электрона с протоном будут полюсные члены, отвечающие вкладу от дискретного спектра этой пары;

3) «остаток» парной t -матрицы будет аппроксимирован в низшем приближении сепарабельным

слагаемым (или суммой таких слагаемых), характеризующей эффективное «остаточное» потенциальное поле;

4) поправки к решениям в низшем приближении могут быть определены по обычной теории возмущений.

Отметим, что полюсные члены парных t -матриц соответствуют вкладу от дискретного спектра, а их вычеты выражаются через парные волновые функции этого спектра. Будем считать, что искажения от экранировки для этих функций несущественны, по крайней мере, для волновых функций низших уровней этого дискретного спектра.

Полюсные члены парных кулоновских t -матриц уже имеют, как известно, сепарабельный вид. Такие члены возникают в амплитудах подсистем, в которых действуют кулоновские силы притяжения, т.е. в парах любого из протонов и электрона. Мы сохраним такие члены в неизменной форме в главном приближении для парных t -матриц. Остальные, т.е. локальные члены парных t -матриц заменим их сепарабельной аппроксимацией.

Решением задачи трех тел будет амплитуда рассеяния электрона на двух протонах. Полюса амплитуды будут отвечать связанным, виртуальным или квазистационарным состояниям электрона. Мы определим положение этих состояний, в частности энергию уровней дискретного спектра и, затем, эффективный потенциал взаимодействия двух тяжелых центров. Этот потенциал будет входить в ядерное уравнение, определяющее вращательные и колебательные уровни самой ионной молекулы [7,9].

II. Аналитическое решение модельной задачи. Будем использовать такие же обозначения, как и в работах [1-3]. Запишем парную t -матрицу в следующем виде (i – номер пары, V_i – ее кулоновский потенциал и $G_i(Z)$ – ее полная функция Грина):

$$t_i = V_i + V_i G_i(Z) V_i = t_i^{sep} + t_i', \quad (1)$$

где сепарабельные члены t -матрицы есть сумма по спектру

$$t_i^{sep} = \sum_n V_i | \Psi_n^i \rangle \frac{1}{Z_i + |E_n|} \langle \Psi_n^i | V_i, \quad (2)$$

и именно они будут приниматься во внимание для определения решений задачи трех тел в низшем приближении, т.е. на первом этапе. Остальные

слагаемые парных t -матриц, включая интеграл по континууму,

$$t_i' = V_i + \int d\vec{p}_S V_i | \Psi_S^i \rangle \frac{1}{Z_i - E_S + i0} \langle \Psi_S^i | V_i, \quad (3)$$

будем учитывать в данной схеме как поправочные, например, определять по теории возмущений. На первом этапе положим $t_i' = 0$.

В нашей задаче $\zeta \ll 1$, а t -матрицы в низшем приближении берутся в виде суммы сепарабельных членов:

$$t_i^{sep} = \sum_n | v_n^i \rangle \eta_n^i \langle v_n^i |,$$

$$\langle v_n^i | = \langle \Psi_n^i | V_i, \quad \eta_n^i = \frac{1}{Z_i + |E_n|}. \quad (4)$$

Отсылая за подробностями к работе [1], дадим здесь необходимые определения. Электрон обозначим номером 1, а протоны – номерами 2 и 3.

Выражение для трехчастичной T -матрицы, где $T = \sum T_{ij}$, $i, j = 2, 3$, будет иметь вид

$$T_{ij} = | v_i \rangle (\eta_i \delta_{ij} + \eta_i M_{i,j} \eta_j) \langle v_j |, \quad (5)$$

где величина M_{ij} есть решение уравнения:

$$M_{ij} = \Lambda_{ij} + \sum_{l=2,3} \Lambda_{il} \eta_l M_{lj}. \quad (6)$$

Потенциал Λ_{ij} при $\zeta \rightarrow 0$ сводится к следующей форме:

$$\Lambda_{ij} = 2m \frac{v_i(\vec{p}) \cdot v_j(\vec{p})}{(p_0^2 - p^2 + i\gamma)}, \quad (7)$$

$$i \neq j, \quad \vec{p} = \vec{p}_1,$$

причем $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 = 0$. Связь с внешними импульсами \vec{p}_2 и \vec{p}_3 можно определить в более удобной записи [1]:

$$\Lambda_{ij} = \int d\vec{r} \exp(i\vec{r}\vec{p}_2) J_{ij}(\vec{r}; p_0) \exp(i\vec{r}\vec{p}_3), \quad (8)$$

где $J_{ij}(\vec{r}; p_0)$ есть Фурье-образ потенциала (7)

$$J_{ij}(\vec{r}) = J_{ij}(\vec{r}; p_0) = \int d\vec{p} \exp(i\vec{r}\vec{p}) \Lambda_{ij}(\vec{p}; p_0). \quad (9)$$

Фурье преобразование уравнения (6) и амплитуды $M_{ij} = M_{ij}(\vec{p}_2, \vec{p}_3)$ с использованием представления:

$M_{ij}(\vec{p}_2, \vec{p}_3) = \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \exp(i\vec{r}\vec{p}_2) M_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') \exp(i\vec{r}'\vec{p}_3),$
 приведет тогда к уравнению для амплитуды $M_{ij}(\vec{r}, \vec{r}')$ в конфигурационном пространстве:

$$M_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') = J_{ij}(\vec{r}) \delta(\vec{r} + \vec{r}') + J_{il}(\vec{r}) \eta_l(p_0) M_{ij}(-\vec{r}, \vec{r}'). \quad (10)$$

Введем $M^\pm(\vec{r})$ выражением: $M_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') = M^+_{ij}(\vec{r}) \delta(\vec{r} + \vec{r}') + M^-_{ij}(\vec{r}) \delta(-\vec{r} + \vec{r}')$, и обозначая $B_{ij}(\vec{r}) = [J(\vec{r})\eta J(-\vec{r})\eta]_{ij}$, запишем точные решения задачи в виде:

$$M^+_{ij}(\vec{r}) = \sum_{\rho=2,3} \left[\frac{1}{1-B(\vec{r})} \right]_{i\rho} J_{\rho j}(\vec{r}), \quad (11)$$

$$M^-_{ij}(\vec{r}) = \left[\frac{1}{1-B(\vec{r})} \cdot B(\vec{r}) \right]_{ij} \eta_j^{-1}. \quad (12)$$

Отметим, что интегрирования по координате промежуточного состояния в (11) уже нет – значение \vec{r} одно и тоже, как в начальном состоянии, так и в промежуточном и конечном состояниях. Отсюда следует, что \vec{r} от номера канала уже не зависит, а сумма в (11) означает лишь суммирование по внутреннему дискретному индексу ρ .

Выделим далее парциальные компоненты, записывая величину $J_{ij}(\vec{r})$ в виде:

$$J_{ij}(\vec{r}) = \sum_{LM} Y_L^{*M}(\hat{r}) J^L_{ij}(r) C_{LM; l_i m_i}^{l_j m_j}, \quad (13)$$

где $Y_L^M(\hat{r})$ - сферические функции углового момента L и его проекции M на выделенную ось квантования. Получим выражения для этих компонент:

$$J^L_{ij}(r) = (-1)^{L/2} \frac{\Pi(LL_i)}{\sqrt{4\pi}\Pi(l_j)} \times \times C_{L_0, l_0}^{l_j, 0} \frac{m}{\pi^2} \int_0^\infty p^2 dp \frac{v_{l_i}(p) w_{l_j}(p)}{p_0^2 - p^2 + i \cdot \gamma} j_L(pr), \quad (14)$$

$\Pi(LL) = \sqrt{(2L+1)(2l+1)}$, $j_L(x)$ - функции

Бесселя, а $C_{LM; l_i m_i}^{l_j m_j}$ - коэффициенты Клебша-Гордана. Далее, для краткости записи будем объединять номера каналов с номерами их парциальных компонент (в частности, $l_j \equiv j$ и $l_i \equiv i$), что не должно вызвать особой путаницы.

Аналогично (13) представим величины $M^\pm_{ij}(\vec{r})$ в форме:

$$M^+_{ij}(\vec{r}) = \sum_{LM} Y_L^{*M}(\hat{r}) M^L_{ij}(r) C_{LM; i m_i}^{j m_j}, \quad (15)$$

и получим, следуя (11) уравнения для компонент [2]:

$$M^L_{ij}(r) = J^L_{ij}(r) + \sum B_{i\rho}^{LK}(r) M^K_{\rho j}(r), \quad (16)$$

где суммирование производится только по внутренним повторяющимся индексам. Матричная величина B_{il}^{LK} будет равна:

$$B_{il}^{LK}(r) = \frac{(-1)^{L-j}}{4\pi} \sum (-1)^{L_2+\tilde{L}-k} \Pi(L_1 L_2 K \tilde{L} kl) C_{L_1 L_2}^{\tilde{L} 0} C_{\tilde{L} K}^{L_0} \left\{ \frac{L_1 L_2 \tilde{L}}{lik} \right\} \left\{ \frac{\tilde{L} KL}{jil} \right\} J_{ik}^{L_1}(r) \eta_k J_{kl}^{L_2}(r) \eta_l, \quad (17)$$

где $\eta_k \equiv \eta_k(p_0)$ и приняты стандартные обозначения для $6j$ -символов в фигурных скобках.

При ограничении S-волновыми компонентами решение $M_{ij}(r)$ принимает очень простую форму

$$M(r) = \frac{J(r)}{D(r, p_0)}, \quad D = 1 - [J(r)\eta(p_0)]^2. \quad (18)$$

При учете высших парциальных волн система уравнений (16) становится более сложной, но если их число ограничено, то решения могут быть проведены до конца, и анализ особенностей амплитуд не представляет особых трудностей.

III. Решение электронного уравнения в низшем приближении. Будем пользоваться кулоновскими переменными с единицей массы равной массе электрона и энергиями уровней дискретного спектра, записанными в форме $E_n = -E_B(2n^2)^{-1}$, где $E_B = e^2/r_B$, r_B - Борковский радиус электрона.

Для простоты ограничимся $n = 1$. Форм-факторы $\langle \nu_{n=1}^i | = \nu_i(\vec{p})$ из (4) будут равны

$$\nu_i(\vec{p}) = \langle \Psi_{n=1}^i | V_i \int d\vec{r} R_{n=1}(r) Y_{L=0}(\hat{r}) \frac{e^2}{r} E_B r_B^{3/2} \frac{8\pi}{1+p^2 r_B^2} Y_{L=0}(\hat{p}), \quad (19)$$

где $R_n(r)$ - радиальная часть кулоновской волновой функции n -го уровня дискретного спектра. Вводя безразмерные переменные соотношениями $r \equiv r/r_B$, $p \equiv p r_B$ и $p_0 \equiv p_0 r_B$, получим, следуя (14), выражение:

$$J(r; p_0) = 4E_B \left[\frac{2}{r} \cdot \frac{e^{-r} - e^{ip_0 r}}{(1+p_0^2)^2} + \frac{e^{-r}}{1+p_0^2} \right]. \quad (20)$$

При этом из (4) следует: $\eta_i(p_0) = \eta_n(p_0) = 2 \cdot E_B^{-1} / (p_0^2 + n^{-2})$, что дает для $n = 1$: $\eta(p_0) = 2 \cdot E_B^{-1} / (1 + p_0^2)$. Отметим, что произведение $J(r; p_0) \cdot \eta(p_0)$ будет безразмерным.

Определим нули функции $D(r, p_0)$, следуя (18)-(20). На мнимой положительной полуоси комплексной плоскости p_0 , т.е. при $p_0 = i\kappa$, $\kappa \geq 0$, нули функции $D(r, i\kappa)$ будут отвечать связанным состояниям электрона в системе двух протонов. На рис. 1 приведена кривая $\kappa = \kappa(r)$, отвечающая траектории движения особенности $D(r, i\kappa) = 0$. Она соответствует основному состоянию - «связывающей» орбитали электрона.

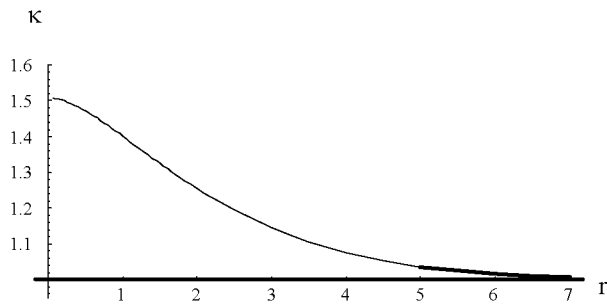


Рис. 1. Зависимость $\kappa = \kappa(r)$. Расстояние берется в единицах Борковского радиуса. Волновое число нормировано на волновое число основного состояния электрона в атоме водорода

Кривая демонстрирует, что энергия связи электрона в системе двух протонов больше ее энергии связи в атоме водорода, для которого $\kappa_H = 1$.

Особенности $D(r, i\kappa) = 0$ имеются и при меньшей связи: $0 \leq \kappa < 1$. В рамках данного приближения эти слабосвязанные состояния возникают лишь в области $r > r_{crit} = 3.49$ и соответствуют «антисвязывающим» орбитали или возбужденным состояниям электрона в системе.

Нули функции $D(r, p_0)$ возникают и при комплексных значениях: $p_0 = \pm p_R + i \cdot p_I$, причем, если $p_R = \text{Re } p_0 \neq 0$, то $p_I = \text{Im } p_0 < 0$. Такие нули отвечают квазистационарным (или резонансным) состояниям электрона в системе двух протонов.

Нули функции $D(r, p_0)$ образуют в плоскости p_R и r ряд отрезков (траекторий), ограничивающих допустимые значения p_R и r . Для резонансных состояний условие $\text{Re } D = 0$ ограничена областью значений $0 < p_R < 0.87$, и есть несколько точек, где $\text{Im } D$ становится равным нулю.

Можно сказать, что система H_2^+ имеет значительно более богатый спектр состояний по сравнению со спектром атома водорода.

Рассмотрим теперь, что дает основное «связывающее» решение, для которого функция $D(r, i\kappa) = 0$. Если считать, что положение протонов фиксировано и расстояние между ними равно b , то, следуя (10), мы должны положить $r = b/2$ (см., например, [1,3]) и перейти к решению ядерного уравнения. Это уравнение определяет состояния двух протонов в эффективном поле быстро движущегося связывающего электрона.

Энергия электрона $E_e = -E_B \cdot \kappa^2 / 2$ в сумме с потенциалом кулоновского отталкивания между протонами создает эффективную потенциальную функцию для этого ядерного уравнения. Минимум этой функции по величине b отвечает равновесной конфигурации молекулы и определяет равновесное расстояние между протонами в молекуле H_2^+ и ее энергию диссоциации на атом водорода и свободный протон.

В рассмотренном здесь приближении равновесное расстояние оказывается равным $b_{eq} = 1.59 \text{ \AA}$, а энергия диссоциации $E_{dis} = 1.21 \text{ eV}$, что по порядку величин согласуется с данными эксперимента: $b_{exp} = 1.058 \text{ \AA}$ и $\Delta E_{exp} = 2.79 \text{ eV}$. Но результаты хуже, чем в стандартных расчетах, например, в методе линейной комбинации атомных орбиталей [7].

IV. Включение эффективного поля и определение равновесного состояния молекулярного иона H_2^+ . Результаты низшего приближения можно существенно улучшить, если учесть в парных t -матрицах вклады неполюсных слагаемых из (3) и вклады высших уровней дискретного спектра с $n \geq 2$.

Сначала оценим соответствующие вклады по теории возмущений, следуя соотношению Гельмана-Фейнмана [4, 13, 14]:

$$\Delta E = \frac{\langle \Psi_0 | \Delta V | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}, \quad (21)$$

где Ψ_0 - волновая функция связанного состояния электрона, а ΔV - соответствующий поправочный член. Здесь неизвестной величиной является Ψ_0 , которую мы определим из уравнения:

$$\Psi_0 = G_0(E_0)V\Psi_0, \text{ при } E_0 = -E_B \frac{\kappa_0^2}{2}, \text{ а } V\Psi_0 = Const \cdot M(p, i\kappa_0).$$

Хотя потенциал V для электрона в системе двух протонов нам неизвестен, также как и Ψ_0 , но известна амплитуда $M(r, i\kappa_0)$ как решение (18). Это дает возможность записать в импульсном представлении выражение:

$$\Psi_0(p) = Const \cdot G_0(E_0) \int d\vec{r} \frac{\sin(pr)}{pr} M(r, i\kappa_0), \quad (22)$$

и из условия $\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1$ найти нормировочную константу $Const$.

Действительно, амплитуда вблизи полюсной точки представима в виде:

$$M(r, p_0 \rightarrow i\kappa_0) \approx 4 \cdot \frac{J(r, i\kappa_0) \cdot J(r, i\kappa_0)}{p_0^2 + \kappa_0^2}. \quad (23)$$

С другой стороны, можно записать общую формулу для полюсного члена, отвечающего вкладу в t -матрицу от основного связанного уровня:

$$t_{pol} = V | \Psi_0 \rangle \frac{1}{E - E_0} \langle \Psi_0 | V. \quad (24)$$

Сравнивая вычеты полюсов в (23) и (24) при $E = E_0$, получим, что $J(r, i\kappa_0) = \sqrt{2} \cdot V | \Psi_0 \rangle$. Это дает нам дополнительный критерий для проверки сделанных оценок.

Вклад уровня с $n = 2$ дает поправку к энергии связи низшего состояния H_2^+ менее 3%, в то время, как неполюсная часть (3), т.е. когда берется $\Delta V = t'$, вносит более ощутимый вклад $\sim 10\%$. Поэтому представляется важным учесть вклад неполюсных слагаемых (3) с самого начала, т.е. уже в исправленном низшем приближении с тем, чтобы получить новые точные решения задачи.

Для этого представим $\Delta V = t'$ в сепарабельном виде. Используем хорошо разработанную процедуру сепарабилизации потенциалов произвольной формы (см., например, [5,6]):

$$\Delta V = \sum \Delta V | \chi_m \rangle D_{mk} \langle \chi_k | \Delta V, \quad (25)$$

$$D_{mk}^{-1} = \langle \chi_m | \Delta V | \chi_k \rangle,$$

где набор функций и точки m, k подбираются так, чтобы обеспечить выполнение определенных условий, например, из условия минимума вариаций энергии основного уровня относительно смещения положения протонов [6,7]. Из условия минимума равновесной энергии, следуя соотношению Гельмана - Фейнмана, определим параметры, введенные в процедуру сепарабилизации.

Функцию $\chi(r)$ возьмем в простой форме:

$\chi(r) = A \cdot \exp(-\tau * r)$, и произведем замену

$$t_i' \Rightarrow \tilde{t}_i^{sep} = \frac{V_i | \chi \rangle \langle \chi | V_i}{\langle \chi | V_i | \chi \rangle}. \quad (26)$$

Здесь принято во внимание, что доминирующим в (3) будет первое слагаемое справа, т.е. кулоновский потенциал, поэтому в правой части (26) предполагается $t_i' \approx V_i$.

Теперь парная амплитуда будет суммой двух сепарабельных членов $t_i^{sep} + \tilde{t}_i^{sep}$, полюсного слагаемого t_i^{sep} , отвечающего основному уровню электрона в атоме водорода (см. (4)), и эффективного поля «расщепленного» вида - \tilde{t}_i^{sep} , описываемого правой частью (26). Соответственно, в выражениях (7) – (17) нужно учесть, что в каждом парном канале число функций $\eta_{i,k}$ и форм-факторов $v_{i,k}(p)$ будет равно 2 ($k = 1, 2$):

$$v_{i,1} = \langle \Psi_{n=1} | V_i \rangle, \quad \eta_{i,1} = 2 \cdot E_B / (1 + p_0^2),$$

$$v_{i,2} = \langle \chi | V_i \rangle, \quad \eta_{i,2}^{-1} = \langle \chi | V_i | \chi \rangle, \quad (27)$$

и ранг матриц J, Λ, B и M будет также равен 2.

Отметим, что у определяемой величины в (26) зависимости от нормировочной константы A не будет, а подгоночным параметром будет только величина τ . Значение $\tau = 2.2$ хорошо аппроксимирует опытные данные. Расчеты дают оценки для равновесного расстояния между протонами значение - $b_{eq} = 1.248 \text{ \AA}$, и для энергии диссоциации - $E_{dis} = 2.92 \text{ eV}$, которые уже удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

На рис. 2 приведен график энергии основного «связывающего» состояния для H_2^+ как функции от b , где b - расстояние между протонами. Расстояние берется в единицах Боровского радиуса. Энергия ε взята в единицах энергии связи электрона в атоме водорода, за вычетом самой этой энергии связи: $\varepsilon = E / E_H^0 - 1$, где $E_H^0 = 13.6 \text{ eV}$. Минимум кривой отвечает энергии диссоциации ионной молекулы H_2^+ на сво-

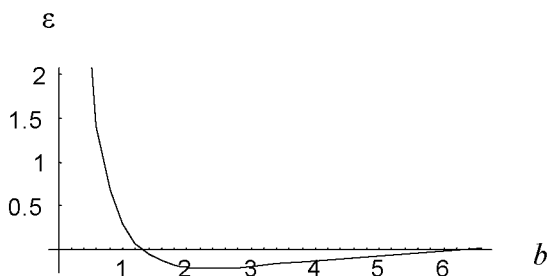


Рис. 2. Энергия связывающего состояния ионной молекулы H_2^+ как функция b -расстояния между протонами. Расстояние берется в единицах Боровского радиуса. Минимум кривой отвечает энергии диссоциации молекулы на свободный протон и атом водорода

бодный протон и атом водорода. В пределе больших относительных расстояний между ядерными центрами (протонами) ионная молекула распадается на эти две независимые подсистемы.

В заключении работы отметим, что одна из важнейших задач квантовой химии и молекулярной физики – система H_2^+ , давно ставшая эталонной для многих расчетных методов, может быть решена в классе точно решаемых моделей [1]. Это дает новые возможности анализа энергетических уровней системы и оценки влияния на нее внешних сил, например, воздействия сильных переменных и постоянных электромагнитных полей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Такибаев Н.Ж. // Ядерная физика. Т. 71, № 3. С. 484-492, 2008.
2. Такибаев Н.Ж. // Вестник КазНПУ им. Абая. Серия: физические и математические науки. 2007. № 3(19). С. 77-90.
3. Такибаев Н.Ж. // Известия НАН РК. Серия физико-математ. 2007. №3. С. 70-73.
4. Киржениц Д.А., Крючков Г.Ю., Такибаев Н.Ж. // ЭЧАЯ. 1979. Т. 10. С. 741.
5. Беляев В.Б. Лекции по теории малочастичных систем. М.: Энергоатомиздат, 1986.
6. Зубарев А.Л. Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. М.: Энергоиздат, 1981.
7. Flygare W.H. Molecular Structure and Dynamics. Englewood Cliffs. New Jersey, 1978.
8. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М., 2006.
10. Лебедев В.С., Пресняков Л.П., Собельман И.И. // УФН. 2003. Т. 173, № 5. С. 491-510.
11. Faddeev L.D. Mathematical Aspects of the Three Body Problem in Quantum Scattering Theory. New York, 1965.
12. Меркурьев С.П., Фаддеев Л.Д. Квантовая механика трехчастичных систем. М.: Наука, 1987.
13. Hellmann H. Einführung in die Quantenchemie, Franz Denticke, Leipzig, Germany, 1937. (Гельман Г. Квантовая химия. М.: гл. ред. ТТЛ, 1937.)
14. Feynman R.P. // Phys. Rev. 1939. V. 56. P. 340.

Резюме

Жұптық t -матрицаның полюстық мүшесін және эффективті сепарабелді өрісті ескере отырып, жеңіл бөлшектің екі ауыр ортада ыдырау моделі арқылы екі протон жүйесінде электронның байланысқан күйінің аналитикалық шешімі алынды.

Summary

The analytical solutions for electron bound state problem in H_2^+ system has been obtained in the model of light particle scattering on two heavy centers with taking into account pole members of pair t -matrices and effective separable interaction.

Казахский национальный педагогический университет им. Абая

Поступила 3.04.08г.