

# КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ В ОСЦИЛЛЯТОРНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

*М. Динейхан*

Институт ядерной физики, Национальный ядерный центр Республики Казахстан,  
Алма-Ата, Казахстан

*Г. В. Ефимов*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Изложен метод осцилляторного представления, который является регулярным методом описания и расчета уровней энергии как основного, так и возбужденных состояний для широкого класса потенциалов, допускающих существование связанного состояния. Полученный ряд теории возмущений является быстро сходящимся, т.е. поправки, связанные с гамильтонианом взаимодействия, оказываются достаточно малыми. Метод осцилляторного представления применен для вычисления энергии связи основного и орбитальных возбужденных состояний атома водорода с экранированным кулоновским потенциалом как функции от параметра экранировки. Вычислен спектр связанных состояний релятивизованного уравнения Шредингера. Результаты вычислений показывают, что нулевое приближение осцилляторного представления характеризуется высокой точностью. Установлены границы стабильности трехтельной кулоновской системы частиц с единичными зарядами в зависимости от масс частиц. Вычислены энергии основных состояний мезомолекул легких ядер.

The oscillator representation method is formulated. This method gives a regular way to describe and calculate the energy levels of ground and excited states for a wide class of potentials allowing the existence of a bound state. The perturbation series is rapidly converging, i.e., the highest perturbation corrections connected with the interaction Hamiltonian are small enough. The method of oscillator representation is used to calculate the bound state energy of a hydrogen atom in a shielded Coulomb field for the ground and orbital and radial excited states as a function of the screening parameter. The bound state spectra of the relativized Schrödinger equation is calculated. The results of our calculations show that the zeroth approximation of the oscillator representation is in a good agreement with exact values. The region of stability is determined for the three-body Coulomb systems with unit charges and arbitrary masses. The ground state energies of mesic molecules of light nuclei are calculated.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из основных математических проблем нерелятивистской квантовой механики является задача вычисления собственных значений и собственных функций заданного гамильтониана, т.е. решение уравнения Шредингера (УШ) для достаточно произвольных потенциалов. Однако точные решения УШ известны только для очень узкого класса потенциалов ([1—4]), таких как потенциал гармонического осциллятора, кулоновский потенциал и некоторые другие. Аналитические решения УШ для большинства интересных с физической точки зрения потенциалов не известны. Поэтому при исследовании реальных физических систем приходится прибегать к приближенным методам вычисления собственных значений и собственных функций заданного гамильтониана.

С развитием электронных вычислительных машин большое значение приобрели численные методы решения задач квантовой механики, и в этом направлении достигнуты большие успехи. Однако важное место на практике по-прежнему отводится аналитическим методам, поскольку они позволяют исследовать качественные закономерности, присущие данной системе, и являются базой для создания алгоритмов численных расчетов.

Аналитические методы реализуются в виде различного рода разложений по теории возмущений, в которых проблема сводится к представлению полного гамильтониана системы в форме  $H = H_0 + H_p$ , причем предполагается, что уравнение в нулевом приближении  $H_0 \Psi^{(0)} = E^{(0)} \Psi^{(0)}$  решается точно, и поправки к нулевому приближению  $E^{(0)}$  и  $\Psi^{(0)}$  могут быть вычислены. Физическая и математическая идея поиска приближенного метода состоит в том, чтобы найти такое представление гамильтониана, в котором в аналитическом решении нулевого приближения были бы схвачены основные динамические свойства данной системы, а поправки, связанные с гамильтонианом взаимодействия  $H_p$ , были бы малы.

При наличии ярко выраженного малого параметра такими методами являются стандартная теория возмущений Рэлея — Шредингера [1—4], квазиклассическое разложение или ВКБ-приближение [1—4], метод  $1/N$ -разложения [5,6]. Мы не будем останавливаться на детальном изложении этих методов, поскольку они хорошо описаны в литературе (см., например, [1—6]).

В данном обзоре основное внимание будет уделено технике решения квантово-механических задач на собственные значения в методе осцилляторного представления. Метод, названный осцилляторным представлением (ОП) [7,8], основан на идеях и методах квантовой теории скалярного поля и состоит в следующем. Любое основное связанное состояние системы

всегда может быть аппроксимировано волновой функцией некоторого осциллятора. Возникает вопрос, каким образом выбрать этот осциллятор, и здесь мы воспользуемся идеями квантовой теории поля.

Рассмотрим, например, квантовую теорию скалярного поля  $\phi(x)$ , описываемого гамильтонианом вида

$$H = H_0 + H_I = \frac{1}{2} \int dx [\pi^2(x) + (\nabla \phi(x))^2 + m^2 \phi^2(x)] + g \int dx \phi^4(x).$$

Естественно считать, что квадратичный «свободный» гамильтониан  $H_0$  описывает основное состояние, если константа связи  $g$  мала. Однако в формировании основного состояния главный вклад, возникающий благодаря взаимодействию  $H_I$  при любой величине константы связи  $g$ , дают так называемые «диаграммы-головастики», или диаграммы «кактусного» типа на языке теории возмущений. Эти диаграммы пропорциональны

$$D(0) = \langle 0 | \phi(0) \phi(0) | 0 \rangle \sim \int \frac{d^4 k}{m^2 + k^2}$$

и в квантовой теории поля составляют наибольшую расходимость. Вклад этих диаграмм можно учесть перенормировкой массы скалярной частицы  $m$  и энергии вакуума. Только после выделения из гамильтониана взаимодействия этих вкладов можно считать, что квадратичный свободный гамильтониан описывает основное состояние системы, а гамильтониан взаимодействия, содержащий полевые операторы в степени три и более, дает малые добавки при малой константе связи.

В формализме квантовой теории поля эта задача решается путем введения понятия нормального произведения, если использовать представление полевых операторов через операторы рождения и уничтожения. Отсюда следует, что требование, чтобы гамильтониан взаимодействия, во-первых, содержал полевые операторы в степени более двух и, во-вторых, был записан в форме нормального произведения операторов, эффективно приводит к учету этих наибольших квантово-механических вкладов в формирование квантовой системы.

Таким образом, в квантовой теории самодействующего скалярного поля представление гамильтониана взаимодействия в форме нормального произведения операторов рождения и уничтожения означает учет главного квантового вклада, т.е. диаграмм Фейнмана «кактусного» типа, в формирование основного состояния системы, или вакуума.

Одно из существенных отличий квантовой теории поля (КТП) от квантовой механики состоит в том, что в КТП квантованное поле, представляющее набор бесконечного числа осцилляторов, и основное состояние, или вакуум, при квантово-полевым взаимодействии сохраняют свою осциллятор-

ную природу, в то время как в квантовой механике поведение собственных функций для большинства потенциалов, используемых для описания реальных взаимодействий, сильно отличается от гауссовского поведения осцилляторной волновой функции. Вообще говоря, если основное состояние квантовой системы является связанным, волновая функция этого состояния может быть разложена по осцилляторному базису в представлении, в котором канонические переменные координата и импульс выражены через операторы рождения и уничтожения  $a^+$  и  $a$  в осцилляторном базисе. Однако в большинстве случаев асимптотическое поведение волновой функции (например, кулоновской) на больших расстояниях не совпадает с гауссовским асимптотическим поведением осцилляторной волновой функции. Поэтому разложение кулоновских волновых функций по осцилляторному базису, хотя и корректно математически, с практической точки зрения ведет к рядам, сходящимся недостаточно быстро. Наша исходная точка зрения состоит в том, что необходимо в исходном уравнении Шредингера провести замену переменных таким образом, чтобы преобразованное уравнение обладало решениями, имеющими гауссовскую асимптотику. В кулоновской системе такая замена  $r \rightarrow s^2$  эффективно эквивалентна переходу к четырехмерному пространству, где волновая функция кулоновской системы становится осцилляторной. Напомним, что в одной из ранних своих работ [9] Шредингер отметил существование такого преобразования, при котором кулоновская система в трехмерном пространстве переходит в осцилляторную в четырехмерном пространстве. Кустанхейм и Стiefeфел [10] выписали явный вид этого преобразования, которое будем называть КС-преобразованием, и использовали его при решении классической проблемы Кеплера. С помощью КС-преобразования кулоновская задача в трехмерном пространстве переходит в осцилляторную в четырехмерном вспомогательном пространстве.

Мы совершим следующий шаг в этом направлении и сделаем почти очевидное утверждение, что для любого потенциала, допускающего существование связанного состояния, всегда существует преобразование переменных, приводящее к гауссовой осцилляторной асимптотике волновой функции связанного состояния. Итак, мы получаем модифицированное уравнение Шредингера, у которого асимптотическое поведение собственной волновой функции является гауссовым. На следующем этапе необходимо представить гамильтониан системы в формализме операторов рождения  $a^+$  и уничтожения  $a$  осцилляторного базиса. Возникает вопрос, как наилучшим образом определить частоту этого осциллятора. На языке гамильтонова формализма квантовой механики эта задача формулируется следующим образом. Пусть гамильтониан системы задан; из него выделим чисто осцилляторную часть с некоторой, пока неизвестной частотой  $\omega$  и представим в форме  $H_0 = \omega a^+ a$ ,

а оставшуюся часть, т.е. гамильтониан взаимодействия, — в форме нормального произведения по  $a^+$ ,  $a$ . Потребуем, чтобы гамильтониан взаимодействия не содержал слагаемых, линейных и квадратичных по каноническим переменным. Это условие определяет  $\omega$  — частоту осциллятора и называется *условием осцилляторного представления*.

Идея введения понятия нормального произведения в нерелятивистскую квантовую механику не нова (см., например, [11]), однако вопрос состоит в том, какие принципы должны быть положены в основу реализации этой идеи. Все известные приближенные методы, основанные на использовании формализма операторов рождения и уничтожения, исходят из молчаливого предположения о том, что волновая функция основного состояния принадлежит осцилляторному базису, хотя более или менее очевидно, что асимптотическое поведение истинной волновой функции может сильно отличаться от осцилляторного.

В данном обзоре изложен метод осцилляторного представления. Работа построена следующим образом. Во втором разделе приведены основные формулы осцилляторного представления в  $d$ -мерном пространстве. Третий раздел посвящен преобразованию радиального уравнения Шредингера в трехмерном пространстве к виду, удобному для применения метода осцилляторного представления (ОП). Введен способ учета асимптотического поведения волновой функции как на больших, так и на малых расстояниях и переход к  $d$ -мерному вспомогательному пространству. Получены основные формулы вычисления энергии основных и возбужденных состояний в нулевом и втором приближениях ОП. В четвертом и пятом разделах ОП применено к вычислению энергетических спектров основного, орбитальных и радиальных возбужденных состояний для ангармонического, степенного и логарифмического потенциалов, основных и орбитально возбужденных состояний атома водорода, в экранированном кулоновском поле как функция от параметров экранировки, а также найдено критическое значение длины экранировки. В шестом разделе ОП использовано для вычисления энергетических спектров релятивизованных уравнений Шредингера. Седьмой раздел посвящен изучению трехтельных кулоновских систем. Установлена граница стабильности трехтельной кулоновской системы частиц с единичными зарядами в зависимости от масс частиц. Вычислены энергии основных состояний мезомолекул легких ядер.

## 2. ОСЦИЛЛЯТОРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ В ПРОСТРАНСТВЕ $R^d$

В этом разделе получим основные формулы предлагаемого метода осцилляторного представления. В нерелятивистской квантовой механике любое связанное состояние системы всегда может быть аппроксимировано

волновыми функциями некоторого осциллятора. Возникает вопрос, каким образом выбрать этот осциллятор, и здесь мы воспользуемся идеями квантовой теории поля.

Прежде всего, приведем известные формулы квантового осциллятора в пространстве  $R^d$  ( $d = 1, 2, \dots$ ). Гамильтониан записывается в стандартном виде

$$H = \sum_{j=0}^d \frac{1}{2} (p_j^2 + \omega^2 q_j^2) = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2), \quad [q_j, p_i] = i\delta_{ij}. \quad (2.1)$$

В представлении, где координаты  $q_j$  диагональны, сопряженный импульс имеет вид

$$p_j = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}.$$

Канонические переменные  $p, q$  выражаются через операторы рождения  $a_j^+$  и уничтожения  $a_j$  следующим образом:

$$\begin{aligned} q_j &= \frac{a_j + a_j^+}{\sqrt{2\omega}} = \frac{Q_j}{\sqrt{\omega}}, \quad p_j = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \frac{a_j - a_j^+}{i} = \sqrt{\omega} P_j, \\ a_j &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\omega} q_j + \frac{i}{\sqrt{\omega}} p_j \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q_j + iP_j) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( Q_j + \frac{\partial}{\partial Q_j} \right), \\ a_j^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\omega} q_j - \frac{i}{\sqrt{\omega}} p_j \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q_j - iP_j) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( Q_j - \frac{\partial}{\partial Q_j} \right), \\ [a_j, a_j^+] &= \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Тогда гамильтониан (2.1) записывается

$$\begin{aligned} H &= \frac{\omega}{2} \sum_{j=1}^d (a_j a_j^+ + a_j^+ a_j) = \omega(a^+ a) + \frac{d\omega}{2} = H_0 + \epsilon_0, \\ H_0 &= \omega(a^+ a) = \omega \sum_{j=1}^d a_j^+ a_j, \quad \epsilon_0 = \frac{d\omega}{2}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Оператор  $H_0 = \omega(a^+ a)$ , представленный в нормальной форме, называется гамильтонианом свободного осциллятора. Параметр  $\epsilon_0 = d\omega/2$  является энергией основного или вакуумного состояния гамильтониана (2.1). Волновая функция вакуумного состояния имеет вид

$$|0\rangle = \prod_{j=1}^d \frac{\omega^{1/4}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{\omega}{2} q_j^2} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{d/4} e^{-\frac{\omega}{2} q^2} \quad (2.4)$$

и удовлетворяет условиям

$$a_j |0\rangle = 0,$$

$$\langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^d q \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{d/2} e^{-\omega q^2} = 1. \quad (2.5)$$

Возбужденные состояния выражаются формулами

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a_{j_1}^+ \dots a_{j_n}^+ |0\rangle, \quad H_0 |n\rangle = n \omega |n\rangle.$$

Радиальные возбуждения с нулевым угловым моментом в  $R^d$

$$|n_r\rangle = C_{n_r} (a_j^+ a_j^+)^{n_r} |0\rangle, \quad C_{n_r}^{-2} = 2^{2n_r} n_r! \frac{\Gamma(d/2 + n_r)}{\Gamma(d/2)} \quad (2.6)$$

удовлетворяют соотношениям

$$\langle n_r | m_r \rangle = \delta_{n_r m_r}, \quad H_0 |n_r\rangle = 2n_r \omega |n_r\rangle.$$

**2.1. Гамильтониан в осцилляторном представлении.** Построим в пространстве  $R^d$  осцилляторное представление для гамильтониана

$$H = \frac{p^2}{2} + W(q^2). \quad (2.7)$$

Предполагается, что потенциал  $W(q^2)$  допускает существование связанного состояния. Наша задача состоит в том, чтобы вычислить энергию основного состояния гамильтониана  $H$ . Для этого выделим чисто осцилляторную часть

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2) + [W(q^2) - \frac{\omega^2}{2} q^2], \quad (2.8)$$

где  $\omega$  является пока произвольным параметром. Канонические переменные осциллятора  $p, q$  представим в форме (2.2), вакуумное состояние определяется формулами (2.4), (2.5).

Воспользуемся понятием нормального произведения. Подставляя представление (2.2) для канонических переменных  $p, q$  в потенциал  $W(q)$  и проводя нормальное упорядочение операторов рождения и уничтожения, получим

$$\begin{aligned}
 W(q^2) &= \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}(k^2) e^{ikq} = \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}(k^2) \exp \left( ik \frac{a+a^+}{\sqrt{2\omega}} \right) = \\
 &= \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}(k^2) \exp \left( -\frac{k^2}{4\omega} \right) \exp \left( ik \frac{a^+}{\sqrt{2\omega}} \right) \exp \left( ik \frac{a}{\sqrt{2\omega}} \right) = \\
 &= \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}(k^2) \exp \left( -\frac{k^2}{4\omega} \right) : \exp(ikq) :,
 \end{aligned}$$

где : \* : — символ нормального упорядочения  $(kq) = \sum_j k_j q_j$  и

$$\tilde{W}_d(k^2) = \int (d\rho)^d W(\rho^2) e^{i(k\rho)}.$$

Подставив представление (2.2) в (2.8) и проведя нормальное упорядочение операторов  $a_j^+$  и  $a_j$ , получим

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2) &= \omega \sum_j a_j^+ a_j + \frac{d}{2} \omega = \omega(a^+ a) + \frac{d}{2} \omega, \\
 W(q) - \frac{\omega^2}{2} q^2 &= \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}_d(k^2) \exp \left( -\frac{k^2}{4\omega} \right) : e^{i(kq)} : - \\
 &\quad - \frac{\omega^2}{2} \left( : q^2 : + \frac{d}{2\omega} \right).
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

Потребуем, чтобы гамильтониан взаимодействия, представленный в нормальной упорядоченной форме, не содержал каких-либо слагаемых, квадратичных по каноническим переменным, поскольку предполагается, что квадратичные члены определяют осцилляторный характер взаимодействия и полностью включены в свободный гамильтониан  $\omega \sum_j a_j^+ a_j$ . Это требование будем называть *условием осцилляторного представления*.

Отсюда возникает возможность получить уравнение для частоты осциллятора  $\omega$ :

$$\omega^2 + \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}_d(k^2) \exp \left( -\frac{k^2}{4\omega} \right) \frac{k^2}{d} = 0. \tag{2.10}$$

Используя эти соотношения, перепишем гамильтониан (2.8) в виде

$$H = H_0 + H_I + \varepsilon_0, \tag{2.11}$$

где

$$H_0 = \omega (a^+ a),$$

$$H_I = \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}_d(k^2) \exp \left( -\frac{k^2}{4\omega} \right) : e^{i(kq)} : =$$



$$\begin{aligned}
 &= \int \left( \frac{d\rho}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\rho^2} W \left( \frac{\rho^2}{\omega} \right) : \exp(-Q^2 + 2(\rho Q)) - 1 + Q^2 \left( 1 - \frac{2\rho^2}{d} \right) : , \\
 \epsilon_0 &= \frac{d\omega}{4} + \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}_d(k^2) \exp \left( -\frac{k^2}{4\omega} \right), \\
 \epsilon_2^z &= \exp_2(z) = e^z - 1 - z - \frac{z^2}{2}.
 \end{aligned}$$

Из (2.10) видно, что уравнение для  $\omega$ , полученное из условия осцилляторного представления, совпадает с уравнением, определяющим минимум энергии  $\epsilon_0$  (2.11) по  $\omega$ , т.е.

$$\begin{aligned}
 \epsilon_0 &= \min_{\omega} \left\{ \frac{d\omega}{4} + \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}_d(k^2) \exp \left( -\frac{k^2}{4\omega} \right) \right\} = \\
 &= \min_{\omega} \left\{ \frac{d\omega}{4} + \int \left( \frac{d\rho}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\rho^2} W \left( \frac{\rho^2}{\omega} \right) \right\} = \\
 &= \min_{\omega} \left\{ \frac{d\omega}{4} + \int_0^{\infty} \frac{du u^{d/2-1} e^{-u}}{\Gamma(d/2)} W \left( \frac{u}{\omega} \right) \right\} = \\
 &= \int_0^{\infty} \frac{du u^{d/2-1} e^{-u}}{\Gamma(d/2)} \frac{d}{du} \left[ u W \left( \frac{u}{\omega} \right) \right], \tag{2.12}
 \end{aligned}$$

где  $\omega$  вычисляется из (2.10), которое можно переписать в виде

$$\omega = \int_0^{\infty} \frac{du u^{d/2} e^{-u}}{\Gamma(d/2 + 1)} \frac{d}{du} W \left( \frac{u}{\omega} \right). \tag{2.13}$$

Таким образом, частота осциллятора  $\omega$  есть функция исходных параметров потенциала  $W(q^2)$ .

Гамильтониан взаимодействия в форме нормального произведения (2.11) не приводит к появлению диаграмм кактусного типа в ряде теории возмущений; их вклад, как и в случае квантовой теории скалярного поля, включается в определение основного состояния, т.е. в частоту осциллятора  $\omega$ . Таким образом, вклад диаграмм кактусного типа эффективно суммируется и определяет главный квантовый вклад взаимодействия в формирование основного состояния системы. Следующие поправки могут быть вычислены методом теории возмущений по  $H_I$ .

**2.2. Поправки второго порядка.** Вычислим поправку второго порядка к энергии основного состояния. Поправка первого порядка равна нулю тождественно:

$$\varepsilon_1 = \langle 0|H_I|0 \rangle \equiv 0.$$

Поправка второго порядка выражается стандартным образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_2 &= -\langle 0|H_I \frac{1}{H_0} H_I|0 \rangle = \\ &= -\frac{1}{\omega} \int \left(\frac{dk_1}{2\pi}\right)^d \int \left(\frac{dk_2}{2\pi}\right)^d \tilde{W}_d(k^2) \tilde{W}_d(k_2^2) \exp\left(-\frac{k_1^2 + k_2^2}{4\omega}\right) S\left(\frac{k_1 k_2}{2\omega}\right), \\ S(z) &= \int_0^1 \frac{dt}{t} \left[ \cosh(tz) - 1 - \frac{1}{2} z^2 t^2 \right] = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{z^{2n}}{2n(2n)!}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\varepsilon_2 = -\frac{1}{2\omega} \sum_{n=2}^{\infty} B\left(\frac{d}{2}, \frac{d}{2} + n\right) A_n^2,$$

где  $B(x, y)$  — бета-функция Эйлера и

$$\begin{aligned} A_n &= \frac{(4\omega)^{d/2}}{n!} \int \left(\frac{dq}{2\pi}\right)^d \tilde{W}_d(4\omega q^2) (q^2)^n e^{-q^2} = \\ &= \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{d/2} \int_0^{\infty} \frac{du u^{d/2+n-1} e^{-u}}{n! \Gamma(d/2)} \tilde{W}_d(4\omega u) = \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha}\right)^n \int_0^{\infty} \frac{du u^{d/2-1} e^{-u}}{n! \Gamma(d/2)} W\left(\frac{\alpha u}{\omega}\right) \Big|_{\alpha=1}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Таким образом, энергия основного состояния исходного гамильтониана

$$E_0 = \varepsilon_0 + \varepsilon_2 + \dots = \varepsilon_0 \left( 1 + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} + \dots \right). \quad (2.16)$$

Точность вычислений в методе осцилляторного представления может быть оценена как

$$\delta \sim \left| \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} \right|. \quad (2.17)$$

**2.3. Общий случай.** Введенное выше осцилляторное представление может быть обобщено следующим образом. Рассмотрим для простоты одномерную задачу. Пусть задан гамильтониан

$$H = \frac{p^2}{2} + V(q),$$

где  $p$  и  $q$  — канонические переменные и  $W(q)$  — потенциал, допускающий существование связанного состояния. Введем потенциал  $W_0(q, \xi)$ , зависящий от некоторых параметров  $\xi$ , и перепишем гамильтониан в виде

$$H = \frac{p^2}{2} + W(q^2) = H_0 + H_I + \epsilon_0,$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2} + W_0(q^2, \xi) - \epsilon(\xi), \quad (2.18)$$

$$H_I = (W(q^2) - \epsilon_0) - (W_0(q^2, \xi) - \epsilon(\xi)).$$

Предполагается, что уравнение Шредингера

$$\left( \frac{p^2}{2} + W_0(q^2, \xi) \right) \Psi_0 = \epsilon(\xi) \Psi_0$$

может быть решено точно. Естественно, будем выбирать потенциал  $W_0(q^2, \xi)$  «максимально близким» к потенциалу  $W(q^2)$ . Произведем вариационную оценку исходного гамильтониана по волновой функции  $\Psi_0(q, \xi)$ :

$$\epsilon_0 = \min_{\{\xi\}} \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = \min_{\{\xi\}} \langle \Psi_0 | \frac{p^2}{2} + W(q^2) | \Psi_0 \rangle, \quad (2.19)$$

где минимизация проводится по параметрам  $\xi$ . В результате фиксируются параметры потенциала  $\xi$  и волновая функция  $\Psi_0(q, \xi)$ . Операторы  $H_0$  и  $H_I$  в (2.18) будем рассматривать как свободный и взаимодействующий гамильтонианы. Будем вычислять энергию основного состояния по теории возмущений, где в качестве гамильтониана взаимодействия выбирается  $H_I$ . Полученное выражение представлено в (2.16), поскольку поправка первого порядка в теории возмущений равна нулю, т.к.  $\epsilon_1 = \langle \Psi_0 | H_I | \Psi_0 \rangle = 0$ . Кроме того, отметим, что  $\epsilon_0$  является оценкой сверху для энергии основного состояния  $E_0 < \epsilon_0$ .

Если выбрать в качестве потенциала  $W_0(q^2, \xi)$  осциллятор с неизвестной частотой, то мы получим введенное выше осцилляторное представление, которое имеет несомненное преимущество, состоящее в том, что формализм операторов рождения и уничтожения значительно упрощает вычисления.

Рассмотрим в качестве примера гамильтониан, имеющий непосредственное отношение к трехтельной задаче (см. разд.7):

$$H = \frac{p^2}{2} + W(u) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} - \frac{B(u)}{\cosh^2 u}, \quad (2.20)$$

где  $-\infty < u < \infty$  и  $V(u)$  — некоторая положительная ограниченная функция. Проблема состоит в том, что для рассматриваемого гамильтониана асимптотика волновой функции пропорциональна  $\exp(-\text{const}|u|)$ , так что необходимо провести соответствующую замену переменных, чтобы получить осцилляторную асимптотику. Это приводит к довольно громоздким выражениям. Поэтому в данном случае удобнее поступить следующим образом. Имеем

$$H = H_0 + H_1 + \epsilon_0,$$

$$H_0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} - \frac{\theta(\theta+1)}{2 \cosh^2 u} + \frac{\theta^2}{2},$$

$$H_1 = -\frac{2W(u) - \theta(\theta+1)}{2 \cosh^2 u} - \frac{\theta^2}{2} - \epsilon_0,$$

где  $\theta$  — постоянная. Уравнение

$$H_0 \Psi_0 = \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} - \frac{\theta(\theta+1)}{2 \cosh^2 u} \right) \Psi_0 = \epsilon(\theta) \Psi_0$$

имеет решение

$$\Psi_0(u) = \frac{1}{N(\theta)(\cosh u)^\theta}, \quad \epsilon(\theta) = -\frac{\theta^2}{2}.$$

Постоянная  $N(\theta)$  вычисляется из условия нормировки и равна

$$N^2(\theta) = B\left(\frac{1}{2}, \theta\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}, \theta\right) \Gamma(\theta)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \theta\right)}.$$

Далее необходимо действовать согласно изложенным выше правилам.

### 3. ОСЦИЛЛЯТОРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ В ПРОСТРАНСТВЕ $R^3$

Основным объектом нашего исследования является радиальное уравнение Шредингера в трехмерном пространстве. Оно записывается стандартным образом:

$$\left[ -\frac{1}{2r} \left( \frac{d}{dr} \right)^2 r + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] \Psi_{nl}(r) = E_{nl} \Psi_{nl}(r). \quad (3.1)$$

Мы будем рассматривать такие потенциалы, как кулоновский или юкавский, т.е. на больших расстояниях

$$V(r) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty, \quad (3.2)$$

а также ангармонические потенциалы

$$V(r) \rightarrow r^{2\sigma}, \quad (\sigma > 0) \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty. \quad (3.3)$$

Поведение этих потенциалов на малых расстояниях может иметь отталкивательный характер.

Наша задача состоит в том, чтобы методом осцилляторного представления вычислить энергетические спектры  $E_{nl}$  и найти волновые функции  $\psi_{nl}(r)$ . Это означает, что волновые функции  $\psi_{nl}(r)$  надо разложить по осцилляторному базису. Как сказано выше, эти разложения математически корректны, но они ведут к рядам, сходящимся недостаточно быстро с практической точки зрения. Основная причина состоит в том, что асимптотическое поведение истинной волновой функции на малых,  $r \rightarrow 0$ , и больших,  $r \rightarrow \infty$ , расстояниях не совпадает с гауссовским асимптотическим поведением осцилляторного базиса. Поэтому в исходном радиальном уравнении Шредингера следует провести замену переменных таким образом, чтобы преобразованное уравнение обладало решениями, имеющими необходимое асимптотическое поведение на больших и малых расстояниях. Такого сорта замена переменных проводилась в работах [12,13] с целью показать эквивалентность решений для различных степенных потенциалов в пространствах различной размерности. В частности, еще раз упомянем хорошо известную эквивалентность между кулоновским потенциалом в трехмерном пространстве и осцилляторным потенциалом в четырехмерном (см. [10,13]).

Наша идея состоит в следующем. Мы хотим провести замену переменных  $r = r(s)$  таким образом, чтобы получить осцилляторное асимптотическое поведение волновой функции преобразованного уравнения, и затем идентифицировать преобразованное уравнение с радиальным уравнением Шредингера в пространстве с другой размерностью. Такого сорта преобразования изучались в работах [14] с целью показать эквивалентность уравнений Шредингера в пространствах различной размерности для ангармонических потенциалов определенного вида. Таким образом, вычисление собственной функции орбитальных возбуждений  $\psi_{0l}(r)$  эквивалентно вычислению волновой функции основного состояния в пространстве другой размерности, где волновые функции имеют гауссовское асимптотическое поведение. В результате мы можем надеяться, что для таких функций будет эффективным разложение по осцилляторному базису. Волновые функции радиальных возбуждений  $\psi_{nl}(r) = |n_r\rangle$  будут определяться высшими осцилля-

торными возбужденными состояниями. После общих замечаний проведем все необходимые преобразования.

**3.1. Большие расстояния.** Рассмотрим поведение волновых функций на больших расстояниях. Обычно мы можем аналитически вычислить асимптотическое поведение волновой функции  $\psi(r)$  при  $r \rightarrow \infty$ . Пусть эта асимптотика известна:

$$\psi(r) \sim \exp(-a(r)).$$

Например, для ангармонического потенциала (3.3) имеем

$$a(r) \sim r^{1+\sigma}. \quad (3.4)$$

Случай  $\sigma = 0$  соответствует потенциалам кулоновского или юкавского типа (3.2).

Введем новую переменную  $r = r(s)$  таким образом, что

$$a(r(s)) \sim s^2 \quad \text{для } s \rightarrow \infty$$

и

$$\psi(r(s)) \sim \exp(-s^2).$$

Подстановки  $r = r(s)$  и  $\psi(r) = \sqrt{r'(s)} \phi(s)$  в (3.1) дают

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{d}{ds} \right)^2 + \left\{ \frac{1}{8} \left( \frac{r''(s)}{r'(s)} \right)^2 - \frac{1}{4} \left( \frac{r''(s)}{r'(s)} \right)' + \frac{l(l+1)}{2} \left( \frac{r'(s)}{r(s)} \right)^2 \right\} + (r'(s))^2 (V(r(s)) - E) \right] \phi(s) = 0. \quad (3.5)$$

Это уравнение в случае

$$r^{1+\sigma} = s^2 \quad \text{или} \quad r = s^{\frac{2}{1+\sigma}} = s^{2\rho}, \quad \rho = \frac{1}{1+\sigma}$$

после некоторых преобразований приобретает вид

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{d}{ds} \right)^2 + \frac{L(L+1)}{2s^2} + W(s^2; E) \right] \phi(s) = 0, \quad (3.6)$$

где

$$\begin{aligned} W(s^2; E) &= \left( \frac{2}{1+\sigma} s^{\left( \frac{1-\sigma}{1+\sigma} \right)} \right)^2 \left( V \left( s^{\frac{2}{1+\sigma}} \right) - E \right) = \\ &= 4\rho^2 s^{2(2\rho-1)} [V(s^{2\rho}) - E], \\ L &= L(l, \rho) = \rho(2l+1) - 1. \end{aligned}$$

Приведем хорошо известные формулы в пространстве  $R^d$ :

$$\begin{aligned} \Delta_d &= \sum_{j=0}^d \left( \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^2, \quad r^2 = \sum_{j=0}^d (x_j)^2, \\ \Delta_d f(r) &= \left[ \left( \frac{d}{dr} \right)^2 + \frac{d-1}{r} \frac{d}{dr} \right] f(r) = \\ &= r^{-(L+1)} \left[ \left( \frac{d}{dr} \right)^2 - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] r^{(L+1)} f(r), \\ L &= L_d = \frac{d-3}{2}. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Сравнивая уравнение (3.6) с уравнением (3.7) мы видим, что операторы в (3.6) могут быть отождествлены с радиальной частью оператора  $\Delta_d$  в пространстве  $R^d$ , где

$$d = d(l, \rho) = 2L(l, \rho) + 3 = 2\rho(2l + 1) + 2. \tag{3.8}$$

В частности, для потенциала типа кулоновского, т.е.  $\sigma = 0$  ( $\rho = 1$ ), имеем  $d = 4 + 4l$ .

Таким образом, уравнение (3.6) можно записать

$$\left[ -\frac{1}{2} \Delta_d + W(s^2; E) \right] \phi(s) = 0, \tag{3.9}$$

причем мы ищем решение этого уравнения, зависящее только от радиальной переменной  $s$ .

**3.2. Малые расстояния.** Гамильтониан (3.6) содержит слагаемое, описывающее орбитальное отталкивание, но в представлении (3.9) оно как бы поглощается размерностью пространства  $d$  (3.8). Кроме того, сам потенциал на малых расстояниях может содержать отталкивательную часть. Поэтому волновая функция  $\psi(s)$  при  $s \rightarrow 0$  должна убывать. Волновую функцию представим в виде

$$\Psi(s) = s^{(L_D+1)} \Phi(s),$$

где параметр  $L_D$  обеспечивает убывание волновой функции на малых расстояниях. Согласно (3.7), преобразования

$$\Delta_d \rightarrow \left( \frac{d}{ds} \right)^2 - \frac{L_d(L_d+1)}{s^2} \rightarrow$$

$$\begin{aligned} &\rightarrow \left[ \left( \frac{d}{ds} \right)^2 - \frac{L_D(L_D+1)}{s^2} \right] + \left[ \frac{L_D(L_D+1)}{s^2} - \frac{L_d(L_d+1)}{s^2} \right] \rightarrow \\ &\rightarrow \Delta_D + \frac{(D-d)(D+d-4)}{4} \frac{1}{s^2} \end{aligned}$$

справедливы в том случае, когда операторы  $\Delta_d$  и  $\Delta_D$  действуют на функцию, зависящую только от радиуса  $s$ .

Окончательно перепишем уравнения (3.9) в следующем виде:

$$\begin{aligned} &\left[ -\frac{1}{2} \Delta_D + W_{ID, \rho}(s^2, E) \right] \Phi(s) = 0, \\ W_{I'}(s^2, E) &= W_{ID, \rho}(s^2, E) = -\frac{K(l, \rho, D)}{2s^2} + W(s^2, E), \\ K(l, \rho, D) &= \frac{(D-d(l, \rho))(D+d(l, \rho)-4)}{4}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

где  $s_j \in R^D$  и  $D$  являются дополнительными параметрами. Мы видим, что потенциал  $W_{ID, \rho}(s, E)$  содержит слагаемое, описывающее притяжение, и это слагаемое может компенсировать отталкивательную часть потенциала  $W(s, E)$ . Еще раз подчеркнем, что волновая функция зависит только от радиуса  $s$ .

В случае потенциала кулоновского или юкавского типа (3.2), т.е. при  $\rho = 1$ , уравнение (3.10) принимает вид

$$\begin{aligned} &\left[ -\frac{1}{2} \Delta_D + W_I(s^2, E) \right] \Phi(s) = 0, \\ W_{I'}(s^2, E) &= -\frac{K(l, D)}{2s^2} + 4s^2(V(s^2) - E), \\ K(l, D) &= \frac{(D-4l-4)(D+4l)}{4}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

**3.3. Формулировка задачи.** Подчеркнем еще раз, что энергия исходной системы  $E$  входит в уравнение Шредингера (3.10) и (3.11) как параметр. Таким образом, наша задача формулируется следующим образом. Имеется гамильтониан  $H$  в  $D$ -мерном пространстве:

$$H(E) = -\frac{1}{2} \Delta_D + W_I(s^2, E) = \frac{p^2}{2} + W_I(s^2, E). \quad (3.12)$$

Задача состоит в том, чтобы решить уравнение Шредингера

$$H(E)\Phi = \left[ \frac{p^2}{2} + W_I(s^2, E) \right] \Phi = \epsilon(E)\Phi \quad (3.13)$$



только для радиальных возбуждений. Энергетический спектр исходной системы  $E_{nl}$  (3.1) входит как параметр в спектр  $\varepsilon^{[n]}$  гамильтониана (3.12):

$$H(E)\Phi^{[n]}(s) = \varepsilon^{[n]}(E)\Phi^{[n]}(s), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.14)$$

и определяется из уравнений

$$\varepsilon^{[n]}(E) = 0. \quad (3.15)$$

Уравнение (3.14) будем решать методом осцилляторного представления. Формулы (2.11) для гамильтониана (3.12) принимают вид

$$H = H_0(E) + H_I(E) + \varepsilon_0(E) = H_0 + H_I + \varepsilon_0, \quad (3.16)$$

где

$$H_0 = \omega (a^\dagger a),$$

$$H_I = \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^D \tilde{W}_I(k^2, E) e^{-k^2/(4\omega)} : e^{ikq} :,$$

$$\varepsilon_0(E; \omega, D) = \frac{D\omega}{4} + \int_0^\infty \frac{du u^{D/2-1} e^{-u}}{\Gamma(D/2)} W_I \left( \frac{u}{\omega}, E \right).$$

Параметр

$$\omega = \omega(E, D)$$

как функция от энергии  $E$ ,  $D$  и других параметров потенциала  $V(r)$  в (3.1) вычисляется из уравнения, следующего из условия осцилляторного представления:

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \varepsilon_0(E; \omega, D) = 0. \quad (3.17)$$

Вычислим энергию основного состояния  $\varepsilon(E, D)$  гамильтониана  $H$  в теории возмущений по степеням гамильтониана взаимодействия  $H_I$  и в  $N$ -м порядке:

$$\varepsilon_N(E, D) = \varepsilon_0(E, D) + \varepsilon_2(E, D) + \dots + \varepsilon_N(E, D).$$

Тогда энергия  $E$  основного состояния исходной системы в  $N$ -м порядке теории возмущений в методе осцилляторного представления находится из уравнения (3.17) и

$$\varepsilon_N(E, D) = \varepsilon_0(E, D) + \varepsilon_2(E, D) + \dots + \varepsilon_N(E, D) = 0.$$

Эти уравнения определяют энергию  $E_{(N)}(D)$  в  $N$ -м порядке теории возмущений как функцию параметра  $D$  и других параметров потенциала  $V(r)$  в (3.1). Параметр  $D$  может быть найден из условия

$$E_{(N)} = \min_{\{D\}} E_{(N)}(D). \quad (3.18)$$

### 3.4. Энергия основного состояния в нулевом и втором приближении.

В данном обзоре применим метод осцилляторного представления только для вычисления нулевого и второго приближений по теории возмущений. Приведем формулы для вычисления энергии основного состояния.

Функция  $\varepsilon(E; \omega, D)$  в (3.16) зависит от двух параметров:  $D$  и  $\omega$ . В принципе могут быть введены и другие вспомогательные параметры. Обозначим их  $\{\alpha_j\}$ , тогда энергия основного состояния во вспомогательном пространстве записывается

$$\varepsilon_2(E; \omega, \alpha_j) = \varepsilon_0(E; \omega, \alpha_j) + \varepsilon_2(E; \omega, \alpha_j).$$

Согласно (3.16) функция  $\varepsilon_0(E; \omega, \alpha_j)$  имеет вид

$$\varepsilon_0(E; \omega, \alpha_j) = A(\omega, \alpha_j) - EB(\omega, \alpha_j),$$

где  $A(\omega, \alpha_j)$  и  $B(\omega, \alpha_j)$  являются известными функциями.

В нулевом приближении энергия (3.16)

$$\varepsilon_0(E_0; \omega, \alpha_j) = A(\omega, \alpha_j) - E_0 B(\omega, \alpha_j) = 0.$$

Условие (3.17) дает

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \left( \frac{A(\omega, \alpha_j)}{B(\omega, \alpha_j)} \right) = 0. \quad (3.19)$$

Уравнения

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_k} E_0(\omega, \alpha_j) = \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \left( \frac{A(\omega, \alpha_j)}{B(\omega, \alpha_j)} \right) = 0 \quad \text{для всех } k$$

определяют параметры  $\{\alpha_j\}$  как функции от  $E_0$ :

$$\alpha_j = \alpha_j(E_0). \quad (3.20)$$

В нулевом приближении

$$E_0 = \min_{\{\omega, \alpha_j\}} \frac{A(\omega, \alpha_j)}{B(\omega, \alpha_j)} = \frac{A(\omega_0, \alpha_j^0)}{B(\omega_0, \alpha_j^0)}, \quad (3.21)$$

где параметры  $\omega_0$  и  $\alpha_j^0$  определяют минимум.

Во втором приближении решим уравнение (3.17), тогда

$$\varepsilon_{(2)}(E; \omega, \alpha_j) = \varepsilon_0(E; \omega, \alpha_j) + \varepsilon_2(E; \omega, \alpha_j) = 0. \quad (3.22)$$

Если вторая поправка мала, то во втором приближении энергия  $E_{(2)} = E_0 + E_2$  и

$$\varepsilon_0(E_{(2)}; \omega_0, \alpha_j^0) = A(\omega_0, \alpha_j^0) - E_{(2)}B(\omega_0, \alpha_j^0) = -E_2B(\omega_0, \alpha_j^0) + O(E_2^2),$$

где  $\omega_0 = \omega(E_0)$ . Таким образом, для второй поправки имеем

$$E_2 = \frac{\varepsilon_2(E_0; \omega_0, \alpha_j^0)}{B(\omega_0, \alpha_j^0)} + O(E_2^2).$$

Окончательно:

$$\begin{aligned} E_{(2)} &= E_0 + E_2 = \\ &= \min_{\{\omega, \alpha_j\}} \frac{A(\alpha_j)}{B(\alpha_j)} + \frac{\varepsilon_2(E_0; \omega_0, \alpha_j(E_0))}{B(\omega_0, \alpha_j(E_0))} + E_0 O\left(\left|\frac{E_2}{E_0}\right|^2\right) = \\ &= \frac{A(\omega_0, \alpha_j^0) + \varepsilon_2(E_0; \omega_0, \alpha_j^0)}{B(\omega_0, \alpha_j^0)} + E_0 O\left(\left|\frac{E_2}{E_0}\right|^2\right). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Эти формулы более просты и удобны по сравнению с (3.18) и (3.19).

**3.5. Радиальные возбуждения.** В методе осцилляторного представления волновые функции радиальных возбуждений даны в (2.6). Спектр энергий  $E_n$  ( $n = 0, 1, \dots$ ) исходной системы (3.1) для основного и радиальных возбужденных состояний вычисляется из уравнений (3.15), и поэтому нам необходимо найти функции  $\varepsilon^{[n]}(E)$ . Имеем

$$\langle n|H_1|n \rangle = A^{[n]}(\omega, \alpha_j) - E_0 B^{[n]}(\omega, \alpha_j) \neq 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Энергия  $\varepsilon^{[n]}$  в низшем приближении имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^{[n]}(E) &= \langle n|H|n \rangle = \varepsilon_0(E) + 2n\omega(E) + \langle n|H_1|n \rangle = \\ &= A_1^{(n)}(\omega, \alpha_j) - EB_1^{(n)}(\omega, \alpha_j), \end{aligned} \quad (3.24)$$

где

$$\begin{aligned} A_1^{(n)}(\omega, \alpha_j) &= (\varepsilon_0(E) + 2n\omega(E) + A^{[n]}(\omega, \alpha_j)), \\ B_1^{(n)}(\omega, \alpha_j) &= B(\omega, \alpha_j) + B^{[n]}(\omega, \alpha_j). \end{aligned}$$

Параметры  $\omega(\alpha_j)$  и  $E(\alpha_j)$  как функции от  $\alpha_j$  вычисляются из уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \omega} A(\omega, \alpha_j) - E \frac{\partial}{\partial \omega} B(\omega, \alpha_j) &= 0, \\ A_1^{(n)}(\omega, \alpha_j) - EB_1^{(n)}(\omega, \alpha_j) &= 0. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Энергия  $n$ -го радиального возбужденного состояния в первом приближении осцилляторного представления равна

$$E_1^{[n]} = \min_{\{\alpha_j\}} \frac{A_1^{[n]}(\omega(\alpha_j), \alpha_j)}{B_1^{[n]}(\omega(\alpha_j), \alpha_j)}.$$

Во втором приближении для энергии имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{(2)}^{[n]}(E) &= \varepsilon_0(E) + 2n \omega(E) + \langle n|H_1|n \rangle - \\ &- \langle n|(H_1 - \langle n|H_1|n \rangle) \frac{1}{H_0 - 2n \omega(E)} (H_1 - \langle n|H_1|n \rangle)|n \rangle. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Волновая функция во втором приближении дается

$$\Phi_2^{[n]} = \left\{ 1 - \frac{1}{H_0 - 2n \omega(E)} (H_1 - \langle n|H_1|n \rangle) \right\} |n \rangle.$$

**3.6. Оценка сверху.** Энергия исходной системы в нулевом приближении определяется уравнением

$$\varepsilon_0(E_0) = 0, \quad (3.27)$$

точное значение энергии — уравнением

$$\varepsilon(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n(E) = 0. \quad (3.28)$$

Покажем, что

$$E \leq E_0. \quad (3.29)$$

Другими словами, энергия в нулевом приближении по теории возмущений является верхней вариационной оценкой для точного значения энергии. Рассмотрим функцию  $\varepsilon_0(E)$  (3.16). Учитывая (3.17) и (3.11), получим

$$\frac{\partial}{\partial E} \varepsilon_0(E, D(E), \omega(E)) = - \langle 0|4s^2|0 \rangle < 0, \quad (3.30)$$

т.е.  $\varepsilon_0(E)$  является убывающей функцией параметра  $E$ . С точки зрения уравнения Шредингера (3.13)  $\varepsilon_0(E)$  является верхней вариационной оценкой для энергии гамильтониана (3.12), так что для любых  $E$

$$\varepsilon(E) \leq \varepsilon_0(E).$$

Поскольку  $E_0$  является корнем уравнения (3.20) и для любых  $E > E_0$  функция  $\varepsilon(E) \leq \varepsilon(E_0) < 0$ , то решение уравнения (3.22) может быть только при  $E \leq E_0$ , и неравенство (3.29) выполнено, что и требовалось доказать.

**3.7. Параметр  $D$  и осцилляторный базис.** Сделаем замечание, касающееся связи пространства  $R^D$ , для которого  $D$  может быть нецелым, с алгеброй операторов рождения и уничтожения, подразумевающей, что число  $D$  должно быть целым.

Исходное уравнение Шредингера (3.1) представим в форме

$$\int d^3\mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}) \left[ -\frac{1}{2} \Delta + V(r) - E \right] \Psi(\mathbf{r}) = 0.$$

Если  $\Psi(\mathbf{r}) = r \psi_{nl}(r) Y_{nl}(\theta, \phi)$ , то уравнение для волновой функции в  $l$ -м орбитальном возбуждении имеет вид

$$\int_0^\infty dr (r \psi_{nl}(r)) \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{d}{dr} \right)^2 + \frac{l(l+1)}{2r^2} + (V(r) - E) \right] (r \psi_{nl}(r)) = 0.$$

Волновая функция  $\psi_{nl}(r)$  зависит только от радиальной переменной  $r$ . Проведем замены переменных

$$r = s^{2\rho} \quad \text{и} \quad r \psi_{nl}(r) = s^a \Phi(s), \tag{3.31}$$

где  $\rho$  и  $a$  являются параметрами. После некоторых преобразований это уравнение записывается

$$\int_0^\infty ds s^{D-1} \Phi(s) \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{d}{ds} \right)^2 + \frac{D-1}{s} \frac{d}{ds} \right] \Phi(s) = 0, \tag{3.32}$$

здесь

$$W_f(s^2, E) = \overline{W}(s^2; l, \rho, D; E) = -\frac{K(l, \rho, D)}{2s^2} + 4\rho^2 (s^2)^{2\rho-1} (V(s^{2\rho}) - E),$$

$$D = 2a - 2\rho + 2, \quad K(l, \rho, D) = \frac{1}{4} ((D-2)^2 - 4\rho^2 (2l+1)^2).$$

С другой стороны, видно, что в случае, когда функция  $\Phi(s) = \Phi(s)$  зависит только от  $s^2$ , это уравнение можно отождествить с уравнением в пространстве  $R^D$  при

$$D = 2a - 2\rho + 2,$$

причем волновая функция  $\Phi(s)$  зависит только от радиуса  $s$ . Тогда уравнение можно переписать в виде

$$\int d^D s \Phi(s) \left[ -\frac{1}{2} \Delta_D + W_f(s^2, E) - \varepsilon(E) \right] \Phi(s) = 0,$$

где функцию

$$\varepsilon(E) = \varepsilon(l, \rho, D; E)$$

можно рассматривать как собственное значение уравнения Шредингера в  $D$ -мерном пространстве

$$\left[ -\frac{1}{2} \Delta_D + W_f(s^2, E) \right] \Phi(s) = \varepsilon(E) \Phi(s). \quad (3.33)$$

Исходная энергия  $E$  определяется из уравнения

$$\varepsilon(E) = \varepsilon(l, \rho, D; E) = 0.$$

Параметры  $\rho$  и  $D$  являются свободными, и их следует выбрать подходящим образом. Эти параметры можно рассматривать как добавочные вариационные параметры, которые могут быть найдены, например, из минимума энергии в нулевом приближении

$$\varepsilon_0(E) = \min_{(\rho, D)} \varepsilon(l, \rho, D; E).$$

С другой стороны, параметр  $\rho$  может быть связан с асимптотическим поведением волновой функции  $\Psi_{nl}(r)$  на больших расстояниях. Например, для потенциала (3.3) мы можем выбрать параметр  $\rho = 1/(1 + \sigma)$ , так что для волновой функции имеем

$$\Psi(r) \sim \exp(-r^{1+\sigma}) \sim \exp(-r^{1/\rho}) \sim \exp(-s^2) \sim \Phi(s).$$

Параметр  $a$ , или  $D$ , может быть связан с поведением волновой функции на малых расстояниях. Если потенциал  $V(r)$  имел отталкивательный характер при  $r \rightarrow 0$ , то мы выбираем  $K(l, \rho, D) = 0$  и  $D = 2 + 2\rho(2l + 1)$ .

В принципе параметр  $D$  можно выбрать таким образом, чтобы полностью компенсировать отталкивание на малых расстояниях. Например, этого можно достигнуть, вычисляя минимум энергии исходной системы в нулевом приближении. Подразумевается, что  $D$  может быть любым положительным числом. Другими словами, размерность  $D$  пространства  $R^D$  может рассматриваться как добавочный параметр, который выбирается с целью улучшить нулевое приближение.

Мы видим, что уравнение Шредингера (3.33) не содержит радиальное квантовое число в явной форме. Орбитальное квантовое число  $l$ , фигурирующее в (3.33), поглощается параметром  $D$ . С точки зрения пространства  $R^D$  функция

$$\Phi_n(s) = s^{2\rho - a} \psi_{nl}(s^{2\rho}), \quad \text{или} \quad \psi_{nl}(r) = r^{\frac{D-2\rho-2}{4\rho}} \Phi_n(r^{1/(2\rho)}),$$

при любых  $n$  и фиксированном  $l$  является собственной функцией радиального возбуждения в пространстве  $R^D$  с радиальным квантовым числом  $n$  и нулевым орбитальным моментом.

Таким образом, решение уравнения в трехмерном пространстве для  $l$ -го орбитального возбуждения эквивалентно решению уравнения Шредингера в пространстве  $R^D$  для состояния с нулевым угловым моментом.

В результате исходное уравнение Шредингера может быть представлено в форме (3.33), и волновая функция  $\Phi(s)$  основного состояния имеет гауссовское асимптотическое поведение на больших расстояниях  $\Phi(s) \sim \exp(-s^2)$ , максимум в точке  $s = 0$ .

В методе осцилляторного представления решение уравнения Шредингера (3.33) имеет вид

$$\Phi_n(s) = \exp\left(-\frac{\omega}{2}s^2\right) \sum_m c_{nm} P_m^{(D)}(s^2\omega),$$

где  $\{P_m^{(D)}(t)\}$  — полиномы, ортонормированные на интервале  $0 < t < \infty$  с весовой функцией

$$\rho_D(t) = t^{\frac{D}{2}-1} \exp(-t),$$

т.е.

$$\int_0^\infty dt t^{\frac{D}{2}-1} e^{-t} P_n^{(D)}(t) P_m^{(D)}(t) = \delta_{nm}.$$

Эти ортогональные полиномы можно построить, используя формализм операторов рождения и уничтожения  $a_j$  и  $a_j^\dagger$  в пространстве  $R^D$  (см. разд.2). Основное состояние, или вакуум, пропорционально

$$|0\rangle \sim \exp\left(-\frac{\omega}{2}s^2\right).$$

Радиальные возбуждения определяются следующим образом:

$$\Phi_n \sim (a^+ a^+)^n |0\rangle \sim P_n^{(D)}(\omega s^2) e^{-\frac{\omega}{2}s^2} \sim P_n^{(D)}(\omega r^{1/\rho}) \exp\left(-\frac{\omega}{2} r^{1/\rho}\right), \quad (3.34)$$

где  $P_n^{(D)}(t)$  является полиномом  $n$ -го порядка. Параметр  $D$  в этом представлении можно рассматривать как любое положительное число. Эти полиномы удовлетворяют условию ортогональности:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_n, \Psi_m \rangle &= \langle 0 | (aa)^n (a^+ a^+)^m | 0 \rangle = \int_0^\infty ds S^{D-1} \exp(-s^2) P_n^{(D)}(s^2) P_m^{(D)}(s^2) = \\ &= \int_0^\infty dt t^{D/2-1} \exp(-t) P_n^{(D)}(t) P_m^{(D)}(t) \sim \delta_{nm}. \end{aligned}$$

Таким образом, параметр  $D$  может быть любым положительным числом.

Итак, алгебра операторов рождения и уничтожения представляет собой не что иное, как математический метод работы с ортонормированными полиномами. Кроме того, явный вид этих полиномов определяется формулой (3.34).

#### 4. АНГАРМОНИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ

Ангармонические осцилляторные модели играли и играют важную роль в эволюции многих направлений в квантовой физике. Несмотря на кажущуюся простоту, проблема вычисления спектра и собственных функций в случае ангармонического взаимодействия не является простой. Имеется многочисленная литература, в которой разработаны различные аналитические и численные методы для решения этой проблемы (см., например, [15—21]). С другой стороны, ангармонический потенциал является хорошим оселком для проверки любого нового метода.

Бендер и Ву [16] сделали существенный вклад в исследование ангармонического осциллятора, который, в частности, представляет теоретический интерес, поскольку может рассматриваться как одномерная теория поля. Главная надежда состоит в том, что необычные и неожиданные свойства этой нелинейной модели могут привести к некоторым догадкам об аналитической структуре более реалистических полевых теорий. Тем не менее развитая техника оказалась достаточно сложной даже для этого простого случая.

Стандартный путь исследования состоит в использовании теории возмущений. В случае ангармонического потенциала ряды теории возмущений являются асимптотическими, т.е. имеют нулевой радиус сходимости. Далее должны быть применены методы суммирования, чтобы вычислить поправки высших порядков. В результате мы получаем достаточно громоздкую процедуру. Обсуждение этих трудностей можно найти в статье Стефенсона [17].



Квазиклассическое приближение применялось к трехмерному ангармоническому осциллятору [18]. Проблема вычисления спектра сводилась к решению достаточно громоздкого трансцендентного уравнения, включая полные эллиптические интегралы. Однако оказалось, что точность невелика для низколежащих уровней.

Другое известное приближение для исследования систем с сильным взаимодействием — это модифицированная теория возмущений [19]. Соотношение точности этой теории с принципом минимальной чувствительности было проанализировано для случая ангармонического осциллятора в работе [20]. Можно сказать, что этот метод хорош, когда известен точный ответ.

$1/N$ -разложение для ангармонического осциллятора было использовано в [21]. В работе [6]  $1/N$ -разложение применялось для вычисления спектра ангармонического осциллятора.

Здесь нам хотелось бы внести свой вклад в эти многочисленные исследования. Мы продемонстрируем эффективность метода осцилляторного представления на примере вычисления спектров ангармонических осцилляторов [22].

**4.1. Ангармонический потенциал в  $R^1$ .** Вычислим энергию основного состояния одномерного ангармонического осциллятора. Гамильтониан этой системы записывается в стандартном виде

$$H = \frac{p^2}{2m} + mv^2 \frac{v^2}{2} q^2 + \lambda q^4. \quad (4.1)$$

В случае симметричного потенциала  $V(q^2)$  волновая функция основного состояния зависит только от  $q^2$ , т.е.

$$\Psi = \Psi(q^2), \quad \Psi'(0) = 0,$$

так что имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \Psi(q^2) \left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dq^2} + V(q^2) - mE \right] \Psi(q^2) = 0$$

или

$$\int_0^{\infty} dq \Psi(q^2) \left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dq^2} + V(q^2) - mE \right] \Psi(q^2) = 0,$$

$$V(q^2) = \frac{m^2 v^2}{2} q^2 + m\lambda q^4. \quad (4.2)$$

Таким образом, будем рассматривать волновое уравнение на положительной полуоси  $0 \leq q \leq \infty$ .

Теперь можно применить метод осцилляторного представления к этому гамильтониану. Прежде всего необходимо произвести замену переменной таким образом, чтобы согласовать асимптотическое поведение волновой функции с осцилляторным базисом. Легко получить, что при больших  $q$  асимптотическое поведение истинной волновой функции определяется ангармоническим слагаемым  $\lambda q^4$  и пропорционально

$$\Psi(q^2) \sim \exp(-q^3) \quad \text{при } q \rightarrow \infty.$$

Тем не менее при малых  $\lambda$  поведение волновой функции ближе к гауссову поведению волновой функции гармонического осциллятора. Таким образом, мы можем ожидать, что поведение волновой функции

$$\Psi(q^2) \sim \exp(-q^\alpha) \quad \text{для } q \rightarrow \infty,$$

где  $2 \leq \alpha \leq 3$  является параметром, может быть наиболее приемлемым приближением. Теперь введем новую переменную

$$q = s^{2/\alpha} = s^{2\rho}, \quad \rho = \frac{1}{\alpha}.$$

После некоторых преобразований интеграл в (4.2) можно переписать в виде

$$\int_0^\infty ds s^{1-2\rho} \Psi(s) \left[ -\frac{1}{2} \left[ \frac{d^2}{ds^2} + \frac{1-2\rho}{s} \frac{d}{ds} \right] + W(s^2, E) \right] \Psi(s) = 0,$$

где

$$W(s^2, E) = 4\rho^2 \left[ \frac{m^2 v^2}{2} (s^2)^{4\rho-1} + m\lambda (s^2)^{6\rho-1} - mE (s^2)^{2\rho-1} \right]. \quad (4.3)$$

Теперь мы можем отождествить оператор

$$\frac{d^2}{ds^2} + \frac{1-2\rho}{s} \frac{d}{ds} = \frac{d^2}{ds^2} + \frac{d-1}{s} \frac{d}{ds} \rightarrow \Delta_d, \quad d = 2 - 2\rho,$$

и меру

$$ds s^{1-\rho} = ds s^{d-1} \rightarrow (ds)^d$$

с «лапласианом»  $\Delta_d$  и «мерой»  $(ds)^d$  во вспомогательном пространстве  $R^d$ . При этом следует помнить, что этот оператор действует на функции, зависящие только от радиуса. Используя соотношения (3.7), уравнения (4.3) представим в виде

$$\int (ds)^d \Psi(s) \left[ -\frac{1}{2} \Delta_d + W(s^2, E) \right] \Psi(s) = 0. \quad (4.4)$$

Волновую функцию  $\Psi(s)$  в (4.4) будем рассматривать как волновую функцию основного состояния, удовлетворяющего следующему уравнению Шредингера:

$$\left[ -\frac{1}{2} \Delta_d + W(s^2, E) \right] \Psi(s) = H \Psi(s) = \varepsilon(E) \Psi(s),$$

$$H = \frac{p^2}{2} + W(s^2, E). \quad (4.5)$$

Энергия исходной системы определяется из уравнения

$$\varepsilon(E) = 0. \quad (4.6)$$

Теперь метод осцилляторного представления применим к гамильтониану (4.5). Согласно (3.16), уравнение Шредингера и гамильтониан (4.5) в осцилляторном представлении записываются в виде

$$(H_0 + H_I + \varepsilon_0) \Psi = \varepsilon(E) \Psi,$$

$$H = \frac{p^2}{2} + W(s^2, E) = H_0 + H_I + \varepsilon_0, \quad (4.7)$$

где  $H_0$  и  $H_I$  дается (2.11), и величина  $\varepsilon_0$  в (2.12) равна

$$\varepsilon_0(E) = \min_{\{\omega, \rho\}} \varepsilon_0(E; \omega, \rho),$$

где

$$\varepsilon_0(E; \omega, \rho) = \frac{d\omega}{4} + \int_0^\infty \frac{du u^{\frac{d}{2}-1} e^{-u}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} W\left(\frac{u}{\omega}, E\right) =$$

$$= A(\omega, \rho) - EB(\omega, \rho),$$

$$A(\omega, \rho) = \frac{1-\rho}{2} \omega + \frac{4\rho^2 m \omega}{\Gamma(1-\rho)} \left[ \frac{mv^2}{2x^2} \Gamma(3\rho) + \frac{\lambda}{x^3} \Gamma(5\rho) \right],$$

$$B(\omega, \rho) = \frac{4\rho^2 m \omega}{x} \frac{\Gamma(\rho)}{\Gamma(1-\rho)},$$

и использовано обозначение  $x = \omega^{2\rho}$ . Параметры  $\omega(E)$  и  $\rho(E)$  как функции от  $E$  определяются из уравнений

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \varepsilon_0(E, \omega, \rho) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \rho} \varepsilon_0(E, \omega, \rho) = 0.$$

Энергия основного состояния  $\varepsilon_2(E)$  во втором порядке теории возмущений после некоторых вычислений записывается

$$\varepsilon_2(E; \omega, \rho) = -\frac{8\rho^2 m^2 \omega}{\Gamma(1-\rho)} \sum_{n=2}^{\infty} \left(\frac{R_n}{n!}\right)^2 \frac{\Gamma(n+1-\rho)}{\Gamma(n+2-2\rho)}, \quad (4.8)$$

где

$$R_n = \frac{mv^2}{6x^2} \frac{\Gamma(n+1-4\rho)\Gamma(1+3\rho)}{\Gamma(1-4\rho)} + \frac{\lambda}{5x^3} \times \\ \times \frac{\Gamma(n+1-6\rho)\Gamma(1+5\rho)}{\Gamma(1-6\rho)} - \frac{E}{x} \frac{\Gamma(n+1-2\rho)\Gamma(1+\rho)}{\Gamma(1-2\rho)}$$

Энергия основного состояния  $E$  в нулевом порядке по теории возмущений вычисляется из уравнения (3.21) и равна

$$E_0 = \min_{\{\omega, \rho\}} \frac{A(\omega, \rho)}{B(\omega, \rho)} = \frac{A(\omega_0, \rho_0)}{B(\omega_0, \rho_0)}, \quad (4.9)$$

где  $\omega_0$  и  $\rho_0$  определяются из минимума энергии. Энергия во втором порядке теории возмущений

$$E_{(2)} = E_0 + E_2, \quad (4.10)$$

где

$$E_0 = \min_{\{x, \rho\}} \left[ \frac{\Gamma(2-\rho)}{8m\rho\Gamma(1+\rho)} x + \frac{mv^2}{6} \frac{\Gamma(1+3\rho)}{\Gamma(1+\rho)} \frac{1}{x} + \frac{\lambda}{5} \frac{\Gamma(1+5\rho)}{\Gamma(1+\rho)} \frac{1}{x^2} \right], \\ E_2 = \frac{\varepsilon_2(E_0; \omega_0, \rho_0)}{B(\omega_0, \rho_0)} = -\frac{2}{\Gamma(\rho)} \sum_{n=2}^{\infty} \left(\frac{R_n}{n!}\right)^2 \frac{\Gamma(n+1-\rho)}{\Gamma(n+2-2\rho)}$$

В табл.1 приведены результаты вычислений энергии ангармонического осциллятора.

Точность нулевого приближения определяется формулой

$$\delta = \frac{|E^{(0)} - E^{(2)}|}{E^{(0)}} \times 100\%.$$

Из табл.1 видно, что точность менее 1%, т.е. ряд теории возмущений быстро сходится.

Если  $v = 0$  и  $m = 1$ , то энергия основного состояния

$$E = c \lambda^{1/3}.$$

**Таблица 1. Энергия основного состояния одномерного ангармонического осциллятора в случае  $m = \frac{1}{2}$  и  $mv = 1$  как функция параметра  $\lambda$ .  $E^{(0)}$  и  $E^{(2)}$  — энергии в нулевом и втором порядках,  $E^{ex}$  — точное значение из [23]**

$\lambda$	$\alpha$	Энергия		
		$E^{(0)}$	$E^{(2)}$	$E^{ex}$
0,02	2,02	1,015	1,015	
0,1	2,07	1,065	1,065	
0,2	2,12	1,119	1,118	1,118
0,5	2,18	1,243	1,242	
1,0	2,23	1,394	1,393	
1,5	2,25	1,511	1,510	
2,0	2,27	1,610	1,609	1,608
5,0	2,31	2,022	2,020	
10,0	2,32	2,454	2,452	
20,0	2,34	3,016	3,014	3,010
100	2,36	5,009	5,008	

Постоянная  $c$  в нулевом порядке теории возмущений вычисляется из уравнения (4.9):

$$c_0 = \min_{\{\rho\}} \frac{3}{4\Gamma(1+\rho)} \left[ \frac{\Gamma(5\rho)\Gamma^2(2-\rho)}{4\rho} \right]^{1/3} = 0,66933\dots$$

Второе приближение дает

$$c_{(2)} = c_0 + c_2 = 0,66846\dots, \quad c_2 = -0,00087\dots$$

Точное численное значение получено в [15]:  $c = 0,667986\dots$

**4.2. Ангармонические потенциалы в  $R^3$ .** Рассмотрим трехмерный ангармонический потенциал. Уравнение Шредингера записывается в виде

$$\left[ -\frac{1}{2mr} \left( \frac{d}{dr} \right)^2 r + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + \frac{mv^2}{2} r^2 + \lambda r^4 \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (4.11)$$

Согласно (3.31), проведем преобразования  $r = s^{2\rho}$  и получим представление

$$\begin{aligned} H(E)\Phi(s) &= \varepsilon(E)\Phi(s), \\ H(E) &= \frac{1}{2} p^2 + W(s^2, E), \\ W(s^2, E) &= 4\rho^2 m \left[ \frac{mv^2}{2} (s^2)^{4\rho-1} + \lambda (s^2)^{6\rho-1} - E (s^2)^{2\rho-1} \right], \end{aligned} \quad (4.12)$$

где  $s \in R^d$  и  $d = 2\rho(2l+1) + 2$ .

Теперь применим метод осцилляторного представления к вычислению энергии трехмерного ангармонического потенциала. Гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2} + W(s^2, E) = H_0 + H_I + \varepsilon_0, \quad (4.13)$$

где  $H_0$  и  $H_I$  даются (2.11) и функция  $\varepsilon_0$ , согласно (2.12), равна

$$\varepsilon_0(E) = \min_{(\omega, \rho)} \varepsilon_0(E; \omega, \rho),$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(E; \omega, \rho) &= \frac{d\omega}{4} + \int_0^\infty \frac{d u u^{\frac{d}{2}-1} e^{-u}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} W\left(\frac{u}{\omega}, E\right) = \\ &= A(l, \omega, \rho) - EB(l, \omega, \rho), \\ A(l, \omega, \rho) &= \frac{\rho(2l+1)+1}{2} \omega + \frac{4\rho^2 m \omega}{\Gamma(\rho(2l+1)+1)} \times \\ &\times \left[ \frac{mv^2}{2x^2} \Gamma(\rho(2l+5)) + \frac{\lambda}{x^3} \Gamma(\rho(2l+7)) \right], \\ B(l, \omega, \rho) &= \frac{4\rho^2 m \omega}{x} \frac{\Gamma(\rho(2l+3))}{\Gamma(\rho(2l+1)+1)} \end{aligned}$$

и введено обозначение  $x = \omega^{2\rho}$ .

Энергия основного состояния  $E_{0l}$  в нулевом порядке теории возмущений

$$E_{0l} = \min_{\{\omega, \rho\}} \frac{A(l, \omega, \rho)}{B(l, \omega, \rho)} = \min_{\{x, \rho\}} \left[ \frac{\Gamma(\rho(2l+1)+2)}{\Gamma(\rho(2l+3))} \frac{x}{8m\rho^2} + \right.$$

$$\left. + \frac{mv^2}{2x} \frac{\Gamma(\rho(2l+5))}{\Gamma(\rho(2l+3))} + \frac{\lambda}{x^2} \frac{\Gamma(\rho(2l+7))}{\Gamma(\rho(2l+3))} \right]. \quad (4.14)$$

Энергия основного состояния ангармонического осциллятора исследовалась многими авторами как аналитическими, так и численными методами. Точный результат численного вычисления [6] для  $E_{00}$  при значениях параметров  $\lambda = 1$ ,  $m = 1/2$  и  $v = 2$ :

$$E_{00}^{ex} = 4,64881\dots$$

Для этого случая из формулы (4.14) получаем

$$E_{00} = 4,6511\dots$$

Отсюда видно, что метод осцилляторного представления в нулевом приближении дает хорошее согласие с точным результатом.

**4.3. Степенные потенциалы.** В этом разделе метод осцилляторного представления применим к вычислению энергетических спектров основного, орбитального и радиального возбужденного состояний трехмерного степенного потенциала:

$$V(r) = \lambda r^v. \quad (4.15)$$

Соответствующее уравнение Шредингера записывается стандартным образом:

$$\left[ -\frac{1}{2mr} \left( \frac{d}{dr} \right)^2 r + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + \lambda r^v \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (4.16)$$

После замены переменных  $r = s^{2\rho}$  имеем

$$\begin{aligned} H(E)\Phi(s) &= \varepsilon(E)\Phi(s), \\ H(E) &= \frac{1}{2} p^2 + W(s^2, E), \\ W(s^2, E) &= 4\rho^2 m \left[ \lambda(s^2)^{\rho(2+v)-1} - E(s^2)^{2\rho-1} \right], \end{aligned} \quad (4.17)$$

где  $s \in R^d$  и  $d = 2\rho(2l+1) + 2$ .

Гамильтониан в осцилляторном представлении имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2} + W(s^2, E) = H_0 + H_I + \varepsilon_0, \quad (4.18)$$

где  $H_0$  и  $H_I$  определены в (2.11), и функция  $\varepsilon_0$ , согласно (2.12), равна

$$\varepsilon_0(E) = \min_{\{\omega, \rho\}} \varepsilon_0(E; \omega, \rho);$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(E; \omega, \rho) &= \frac{d\omega}{4} + \int_0^\infty \frac{duu^{d-1} e^{-u}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} W\left(\frac{u}{\omega}, E\right) = \\ &= A(l, \omega, \rho) - EB(l, \omega, \rho), \\ A(l, \omega, \rho) &= \frac{\rho(2l+1)+1}{2} \omega + \frac{4\rho^2 m \lambda \omega}{y^{2+\nu}} \frac{\Gamma(\rho(2l+3+\nu))}{\Gamma(\rho(2l+1)+1)}, \\ B(l, \omega, \rho) &= \frac{4\rho^2 m \omega}{y^2} \frac{\Gamma(\rho(2l+3))}{\Gamma(\rho(2l+1)+1)}. \end{aligned}$$

Здесь введено обозначение  $y = \omega^\rho$ .

Энергия основного состояния  $E_{0l}$  в нулевом порядке теории возмущений

$$\begin{aligned} E_{0l} &= \min_{\{\omega, \rho\}} \frac{A(l, \omega, \rho)}{B(l, \omega, \rho)} = \\ &= \min_{\{y, \rho\}} \left[ \frac{\Gamma(\rho(2l+1)+2)}{\Gamma(\rho(2l+3))} \frac{y^2}{8m\rho^2} + \frac{\lambda}{y^\nu} \frac{\Gamma(\rho(2l+3+\nu))}{\Gamma(\rho(2l+3))} \right] = \\ &= \min_{\{\rho\}} \frac{2+\nu}{\Gamma(\rho(2l+3))} \left[ \frac{\Gamma(\rho(2l+1)+2)}{8\nu m \rho^2} \right]^{\frac{\nu}{2+\nu}} \left[ \frac{\lambda}{2} \Gamma(\rho(2l+3+\nu)) \right]^{\frac{2}{2+\nu}}. \quad (4.19) \end{aligned}$$

Теперь рассмотрим радиальные возбуждения. Учитывая (3.24), получаем в первом приближении

$$\varepsilon_1^{(n)} = \varepsilon_0 + 2n\omega + \langle n|H_1|n \rangle,$$

где

$$\langle n|H_1|n \rangle = \int \left(\frac{dk}{2\pi}\right)^d \tilde{W}_d(k^2) \exp\left(-\frac{k^2}{4\omega}\right) \langle n| : e_2^{ikq} : |n \rangle.$$

Введем полиномы

$$\begin{aligned} e_n(t, d) = \langle n| : e_2^{ikq} : |n \rangle &= \sum_{m=2}^{2n} c_m(n, d) t^m, \quad t = -\frac{k^2}{4\omega}, \\ c_m(n, d) &= \frac{n! \Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{d}{2}+n\right) \Gamma\left(\frac{d}{2}+m\right)} \sum_p^{\left[\frac{m}{2}\right]} \frac{2^{m-2p} \Gamma\left(\frac{d}{2}+n+p\right)}{(n-m+p)!(m-2p)!(p!)^2}, \end{aligned}$$

где

$$p = \max(0, m-n).$$



Таблица 2. Энергия основного состояния степенных потенциалов как функция  $\nu$  для значений параметров  $n=l=0$  и  $2m=1$ .  $E_{00}$  — нулевое приближение осцилляторного представления. Численные результаты взяты из [24] и метода  $1/N$ -разложения [6]

$\nu$	Энергия		
	$1/N$	Числ.результат	$E_{00}$
-1,5	-0,29888	-0,29609	-0,29703
-1,25	-0,22035	-0,22029	-0,22027
-1,0	-0,25	-0,25	-0,25
0,15	1,32795	1,32795	1,3279
0,5	1,83341	1,83339	1,8335
0,75	2,10815	2,10814	2,1082
1,5	2,70806	2,70809	2,7081
2,0	3,0	3,0	3,0
3,0	3,45111	3,45056	3,4511
4,0	3,80139	3,79967	3,8024
5,0	4,09146	4,08916	4,0962
6,0	4,33801	4,33860	4,3524
7,0	4,54690	4,55866	4,5815
8,0	4,71772	4,75587	4,7901
10	4,92220	5,09786	5,1607

Коэффициенты  $c_m(n,d)$  для  $n=1$  и  $n=2$ :

$$c_2(1,d) = \frac{2}{d}, \quad c_2(2,d) = \frac{4(d+8)}{d(d+2)},$$

$$c_3(2,d) = \frac{16}{d(d+2)}, \quad c_4(2,d) = \frac{2}{d(d+2)}.$$

Первые три полинома записываются следующим образом:

$$e_0(t,d) = 0,$$

Таблица 3. Энергетические спектры для различных потенциалов в нулевом приближении. Численные результаты взяты из [6] и [24] (в скобках)

Квантовые числа		$-\frac{2^{1,7}}{r^{0,2}}$ $2m = 1$	$V(r)$ $-\frac{2^{0,8}}{r^{0,8}}$ $2m = 1$	$2^{3,5}r$ $2m = 1$	$\ln r$ $m = 1$
$n = 0$	$l = 0$	-2,686 (-2,686)	-1,2186 (-1,218)	9,353 (9,35243)	1,045 (1,0443)
	$l = 1$	-2,345 (-2,345)	-0,5004 (-0,500)	13,445	1,641 (1,643)
	$l = 2$	-2,156 (-2,156)	-0,2947 (-0,295)	16,993	2,014 (2,015)
	$l = 3$	-2,029 (-2,029)	-0,2019 (-0,202)	20,204	2,284 (2,286)
$n = 1$	$l = 0$	-2,253 (-2,253)	-0,462 (-0,462)	16,355 (16,3518)	1,848 (1,8474)
	$l = 1$	-2,101 (-2,101)	-0,281 (-0,281)	19,540	2,151 (2,151)
	$l = 2$	-1,990 (-1,990)	-0,195 (-0,195)	22,521	2,388 (2,388)
	$l = 3$	-1,905	-0,146	25,330	2,580
$n = 2$	$l = 0$	-2,044 (-2,044)	-0,265 (-0,265)	22,084 (22,08224)	2,290 (2,290)
	$l = 1$	-1,951 (-1,951)	-0,187 (-0,187)	24,833	2,491 (2,491)
	$l = 2$	-1,875 (-1,875)	-0,142 (-0,142)	27,478	2,663 (2,663)
	$l = 3$	-1,812	-0,113	30,021	2,811

$$e_1(t,d) = \frac{2}{d} t^2,$$

$$e_2(t,d) = \frac{4}{d(d+2)} \left[ (d+8)t^2 + 4t^3 + \frac{1}{2} t^4 \right].$$

Если потенциалы представить в виде

$$W(s^2) = \sum_k w_k (s^2)^{\sigma_k},$$

то получим

$$\begin{aligned} \langle n|H_I|n \rangle &= \int \left( \frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}_d(k^2) \exp\left(-\frac{k^2}{4\omega}\right) \langle n|:e_2^{ikq}:|n \rangle = \\ &= \sum_k \frac{w_k}{\omega^{\sigma_k}} C_k(d, \sigma_k), \end{aligned}$$

$$C_k(d, \sigma_k) = \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2} + \sigma_k\right)}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \sum_{s=2}^{2n} c_s(n,d) \frac{\Gamma(\sigma_k + 1)}{\Gamma(\sigma_k + 1 - s)}.$$

Следующий шаг состоит в решении уравнения (3.25). В результате вычислений имеем

$$E_{nl} = \lambda \min_{\{\rho\}} \frac{\Gamma(\rho(2l+3+v))}{\Gamma(\rho(2l+3))} \frac{F(v)}{F(0)} \left[ \frac{F(0)}{8\rho^2 m \lambda J} \frac{\Gamma(\rho(2l+1)+1)}{\Gamma(\rho(2l+3+v))} \right]^{\frac{v}{2+v}},$$

где

$$F(v) = 4n[\rho(2+v)-1] + [\rho(2l+1)+1][\rho(2+v)+C_n(d, \rho(2+v)-1)],$$

$$J = \rho v + [\rho(2+v)-1]C_n(d, 2\rho-1) - (2\rho-1)C_n(d, \rho(2+v)-1),$$

здесь  $d = 2\rho(2l+1) + 2$ . Численные результаты наших вычислений представлены в табл.2 и 3.

**4.4. Логарифмический потенциал.** Теперь рассмотрим логарифмический потенциал

$$V(r) = \lambda \ln(r). \tag{4.20}$$

Это один из потенциалов, который широко используется для описания спектроскопии кваркония [24]. Проводя стандартные вычисления согласно (3.16), получаем для энергии  $E_{nl}$  в низшем приближении следующее выражение:

$$E_{nl} = \lambda \min_{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial \sigma} \ln \left[ \left( \frac{d}{2} + 4n \right) \sigma + \frac{d}{2} (1 + C_n(d, \sigma)) \right] + \psi \left( \frac{d}{2} + \sigma \right) + \frac{1}{2\rho} \ln \left[ \frac{1}{(\sigma + 1)^3 m \lambda} \frac{\Gamma \left( \frac{d}{2} \right)}{\Gamma \left( \frac{d}{2} + \sigma \right)} \frac{\left( \frac{d}{2} + 4n \right) \sigma + \frac{d}{2} (1 + C_n(d, \sigma))}{1 + C_n(d, \sigma) - \sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} C_n(d, \sigma)} \right] \right\},$$

$$\frac{d}{2} = \rho(2l + 1) + 1, \quad \sigma = 2\rho - 1, \quad \psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x).$$

Функция  $C_n(d, \sigma)$  определена выше.

Численные результаты приведены в табл.3. Видно, что нулевое приближение совпадает с точным до четырех знаков.

Таким образом, наши вычисления говорят о том, что

— метод осцилляторного представления дает возможность единого описания одно- и трехмерного ангармонического осциллятора;

— нулевое приближение метода ОП обладает высокой точностью, так что высшие поправки по гамильтониану взаимодействия достаточно малы;

— для степенных потенциалов энергетические уровни для орбитальных и радиальных возбужденных состояний в нулевом приближении совпадают с точными в четырех знаках.

## 5. ПОТЕНЦИАЛЫ КУЛОНОВСКОГО ТИПА

Кулоновский потенциал и потенциалы, связанные с кулоновским взаимодействием, играют фундаментальную роль в понимании динамики атомных и молекулярных явлений. Решения уравнения Шредингера с этими потенциалами рассматривались разными методами (см. [1—6]).

В этом разделе в рамках метода осцилляторного представления [8,25] вычислим энергетические спектры кулоновского и экранированного кулоновского потенциалов.

**5.1. Кулоновский потенциал.** Радиальное уравнение Шредингера для кулоновского потенциала записывается стандартным образом:

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{m\alpha}{r} \right] \Psi_{nl}(r) = mE_{nl} \Psi_{nl}(r), \quad (5.1)$$

где  $l$  — орбитальное квантовое число,  $m$  — масса электрона. Проведя необходимые вычисления, как в предыдущих разделах для  $r = s^2$ , получим для этого радиального уравнения

$$\left[ -\frac{1}{2} \Delta_d + \frac{(-8mE)}{2} s^2 - 4m\alpha \right] \Phi = 0. \quad (5.2)$$

Это уравнение определено в пространстве  $R^d$  размерности  $d = 4 + 4l$ . Полученное уравнение Шредингера является чисто осцилляторным, т.е.

$$\left[ \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} \Omega^2 s^2 \right] \Phi = \left[ \Omega(a^+ a) + \frac{d}{2} \Omega \right] \Phi = 4\alpha m \Phi, \quad (5.3)$$

где  $\Omega^2 = -8mE$ .

Согласно (2.6) радиальные возбуждения

$$\Phi_{n_r} = |n_r\rangle = C_{n_r} (a^+ a^+)^{n_r} |0\rangle, \quad (5.4)$$

так что имеем

$$\Omega \left( 2n_r + \frac{d}{2} \right) \Phi_{n_r} = 4\alpha m \Phi_{n_r},$$

и, наконец, получаем кулоновский спектр

$$E_{n_r l} = -\frac{\alpha^2 m}{2(1+n_r+l)^2} = -\frac{\alpha^2 m}{2(1+n)^2}. \quad (5.5)$$

Здесь  $n = n_r + l$ . Кулоновские волновые функции выписываются по формуле (5.4) и равны

$$\Psi_{n_r l}(r) \sim \Phi_{n_r}(s^2) = C_{n_r} \left[ \frac{1}{2} \left( s_j - \frac{\partial}{\partial s_j} \right) \right] \left( s_j - \frac{\partial}{\partial s_j} \right) \right]^{n_r} e^{-\frac{1}{2} s^2}, \quad (5.6)$$

где  $s_j \in R^d$  с  $d = 4 + 4l$  и  $s^2 = r$ .

**5.2. Экранированный кулоновский потенциал.** Вычислим энергию связи основного и орбитальных возбужденных состояний для атома водорода в экранированном кулоновском поле как функцию параметра экранировки Дебая. Экранированный кулоновский потенциал удовлетворительно описывает эффективные взаимодействия в многотельных атомных явлениях. Однако уравнение Шредингера для таких потенциалов точно не решается, и поэтому используются различные приближенные методы, как численные [26—28], так и аналитические [29]. В [26—28] с помощью численного метода энергетические спектры определены как функции от длины экранировки для  $1s$ - $3d$ -состояний.

В рамках осцилляторного представления рассмотрим зависимость энергетического спектра основного и орбитального возбужденного состояний как функцию параметра длины экранировки в нулевом приближении метода ОП.

Экранированный кулоновский потенциал записывается стандартным образом:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \exp(-Ar), \quad (5.7)$$

где  $1/A$  является длиной экранировки. Соответствующее уравнение Шредингера имеет вид

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{r} \left( \frac{d}{dr} \right)^2 r + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{U}{2} - \frac{1}{2r} \exp(-\mu r) \right] \psi(r) = 0, \quad (5.8)$$

где введены следующие безразмерные переменные:

$$\mu = \frac{A}{2Zme^2}, \quad E = -2m Z^2 e^4 U.$$

Наша задача состоит в том, чтобы определить энергию связи  $E$  или  $U$  как функцию параметров  $\mu$  для основного и возбужденного состояний. После подстановки  $r = s^{2\rho}$  уравнение (5.8) имеет следующий вид:

$$\left[ -\frac{1}{2} \Delta_d + W(s^2, U) \right] \Phi(s) = 0, \quad (5.9)$$

где

$$W(s^2, U) = 2\rho^2 \left[ -(s^2)^{\rho-1} e^{-\mu(s^2)^\rho} + U(s^2)^{2\rho-1} \right],$$

$$d = 2\rho(2l+1) + 2.$$

Гамильтониан в осцилляторном представлении определен в (2.19), и в данном случае энергия

$$\epsilon_0(U, \rho) = \min_{\omega} \epsilon_0(U, \omega, \rho),$$

где

$$\epsilon_0(U, \omega, \rho) = A(\omega, \rho) + U \cdot B(\omega, \rho).$$

Здесь

$$A(\omega, \rho) = \frac{\rho(2l+1)+1}{2} \omega -$$

$$- \frac{2\rho^2}{\omega^{2\rho-1}} \int_0^\infty \frac{du u^{\rho(2l+2)-1}}{\Gamma(\rho(2l+1)+1)} \exp\left(-u - \frac{\mu}{\omega^\rho} u^\rho\right),$$

$$B(\omega, \rho) = \frac{2\rho^2}{\omega^{2\rho-1}} \frac{\Gamma(\rho(2l+3))}{\Gamma(\rho(2l+1)+1)}.$$

Таблица 4. Энергия как функция длины экранировки для 1s- и 2p-состояний

$\mu$	1s		2p	
	$U^{(0)}$	[28]	$U^{(0)}$	[27]
0,001	0,24900	0,24900	0,061500	0,061500
0,01	0,24015	0,24015	0,05298	0,05298
0,0125	0,237743	0,23773	0,05075	0,05075
0,025	0,225908	0,22590	0,04037	0,040375
0,05	0,20354	0,20353	0,02326	0,02368
0,1	0,16342	0,16340	0,001999	0,00205
0,125	0,14547	0,14546		
0,25	0,07399	0,07395		
0,357	0,03357	0,03377		
0,5	0,004645	0,00515		

Согласно (3.17), параметры  $\omega$  и  $U$  как функции от  $\rho$  вычисляются из уравнений

$$\begin{aligned} \epsilon_0(U, \omega, \rho) &= A(\omega, \rho) + UB(\omega, \rho) = 0, \\ \omega \frac{d}{d\omega} \epsilon_0(U, \omega, \rho) &= \omega \frac{d}{d\omega} A(\omega, \rho) + U\omega \frac{d}{d\omega} B(\omega, \rho) = 0. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Вводя новую переменную  $x = \mu/\omega^\rho$ , после некоторых упрощений получаем

$$U = U(\mu) = \max_{F(\rho, x) = \mu} \frac{\rho^2 I_+(\rho, x) I_-(\rho, x)}{\Gamma(\rho(2l + 3)) \Gamma(\rho(2l + 1) + 2)}, \quad (5.11)$$

где

$$I_{\pm}(\rho, x) = \int_0^{\infty} du u^{\rho(2l+2)-1} \exp(-u - x u^\rho) [1 \pm x u^\rho],$$

здесь параметры  $\rho$  и  $x$  связаны соотношением

$$\mu = F(\rho, x) = \frac{2\rho^2 x I_+(\rho, x)}{\Gamma(\rho(2l + 1) + 2)}. \quad (5.12)$$

Эти формулы дают возможность определить  $U$  как функцию параметров  $\mu$  и  $l$  в низшем приближении. Полученные результаты представлены в табл.4.

**5.3. Критическая длина экранировки.** Одной из характеристик экранированного кулоновского потенциала является критическая длина экранировки, равная параметру  $\mu$ , при котором энергия связанного состояния равна нулю. Этот параметр вычислялся разными методами. В [26, 27] численными методами получены значения критической длины экранировки для одноэлектронных  $(n, l)$ -состояний.

Вычислим критическую длину экранировки для двухтельной системы. Критическая длина экранировки в нулевом приближении осцилляторного представления определяется условием

$$U(\mu_c) = 0. \quad (5.13)$$

Согласно (5.11), это уравнение эквивалентно

$$I_-(\rho, x) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \rho} I_-(\rho, x) = 0.$$

Из этих уравнений параметры  $x$  и  $\rho$  вычисляются как функции  $l$ . Критическое значение  $\mu_c$  дается уравнением (5.12). Результаты вычислений представлены в табл.5.

Таблица 5. Критическая длина экранировки  $\mu_c$  для  $(n, l)$ -состояний

$l$	$n_r = 0$	
	$\mu_c^{[0]}$	[27]
0	0,579	0,59530
1	0,109023	0,11011
2	0,04531	0,04567
3	0,024698	0,02492
4	0,015522	0,015672
5	0,010654	0,01076
6	0,007764	0,00784
7	0,005909	0,00597



## 6. РЕЛЯТИВИЗОВАННОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Стандартное уравнение Шредингера описывает поведение нерелятивистских систем. Нерелятивистские потенциальные модели успешно применяются как в физике тяжелых кваркониев, так и в физике адронов. Однако кварк-кварковая система является релятивистской, поэтому вычисление релятивистских поправок к кварковому связанному состоянию является одной из основных проблем. Релятивистский характер кварк-кварковых взаимодействий исследовался в работах [30—33].

Релятивистский характер взаимодействия учитывается различными способами. Релятивистские поправки могут быть связаны со спиновым взаимодействием или кинематическими эффектами, т.е. с движением кварков относительно их общего центра масс.

Основным теоретическим инструментом для изучения релятивистских поправок в потенциальных моделях является уравнение Бете — Солпитера и Брейта — Ферми. Учет релятивистских взаимодействий, связанных со спинами кварков (см., например, [31]), дает возможность понять природу взаимодействия кварков и позволяет описывать существующие экспериментальные результаты.

Попытки учета релятивистских взаимодействий, не зависящих от спинов, делались разными авторами [33] и основывались на замене в нерелятивистском уравнении Шредингера нерелятивистской энергии на релятивистскую

$$\frac{p^2}{2m} \rightarrow \sqrt{p^2 + m^2}.$$

Таким образом, предполагается, что кварк-кварковая система описывается релятивизованным уравнением Шредингера в пространстве  $R^3$ :

$$\left[ \sqrt{p^2 + m^2} + V(r^2) \right] \Psi = E\Psi. \quad (6.1)$$

Обычно это уравнение решается с помощью численных или вариационных методов (см., например, [30—32]).

Мы будем решать это уравнение с помощью метода осцилляторного представления [22]. Волновая функция записывается в виде

$$\Psi(r, \theta, \phi) = Y_{lm}(\theta, \phi) \Psi_{nl}(r), \quad (6.2)$$

где  $l$  — орбитальный момент.

Радиальное уравнение Шредингера имеет вид

$$\left[ \sqrt{-\frac{1}{r} \left( \frac{d}{dr} \right)^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} + m^2 + V(r^2) \right] \Psi_{nl} = E_{nl} \Psi_{nl}. \quad (6.3)$$

Введем функции

$$\Psi_{nl}(r) = r^l \Phi(r),$$

$$L_d = \frac{d-3}{2} = l, \quad d = 3 + 2l.$$

Уравнение (6.3) принимает вид

$$\left[ \sqrt{-\frac{1}{r^{(d-1)/2}} \left( \frac{d}{dr} \right)^2} r^{d-1/2} + \frac{L_d(L_d+1)}{r^2} + m^2 + V(r^2) \right] \Psi_{nl} = E_{nl} \Psi_{nl}.$$

Это уравнение совпадает с уравнением Шредингера в пространстве  $R^d$ :

$$\left[ \sqrt{-\Delta_d + m^2 + V(r^2)} \right] \Phi(r) = E \Phi(r). \quad (6.4)$$

Теперь применим метод осцилляторного представления к следующему гамильтониану в пространстве  $R^d$ :

$$H = \sqrt{p^2 + m^2} + V(r^2).$$

Гамильтониан перепишем в виде:

$$H = \frac{1}{2\mu} (p^2 + \vartheta r^2) + \left[ \sqrt{p^2 + m^2} - \frac{p^2}{2\mu} \right] + \left[ V(r^2) - \frac{\vartheta}{2\mu} r^2 \right], \quad (6.5)$$

где  $\mu$  и  $\vartheta$  являются параметрами. Введем осцилляторные канонические переменные

$$r_j = \frac{Q_j}{\sqrt{\vartheta}}, \quad Q_j = \frac{a_j + a_j^+}{\sqrt{2}};$$

$$p_j = \sqrt{\vartheta} P_j, \quad P_j = \frac{a_j - a_j^+}{i\sqrt{2}}; \quad (j = 1, \dots, d). \quad (6.6)$$

Вакуумное состояние определяется стандартным образом:

$$\langle 0|0\rangle = 1, \quad \langle 0|p_j|0\rangle = 0,$$

$$\langle 0|r_i|0\rangle = \frac{\delta_{ij}}{2\vartheta}, \quad \langle 0|p_i|0\rangle = \delta_{ij} \frac{\vartheta}{2}.$$

Подставим представление (6.6) в (6.5), проведем нормальное упорядочение гамильтониана по операторам  $a_j, a_j^+$  и потребуем, чтобы гамильтониан взаимодействия  $H_I$  не содержал слагаемые с  $:p^2:$  и  $:r^2:$ . После некоторых упрощений получим

$$H = H_0 + E_0 + H_I,$$

где

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \omega a_j^+ a_j, & \omega &= \frac{\vartheta}{\mu}; \\
 H_I &= \int \left( \frac{d\rho}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\rho^2} \left[ \sqrt{\rho^2 \vartheta + m^2} : \exp(-2\rho\rho - \rho^2) - 1 + \rho^2 \left( 1 - \frac{2}{d} \rho^2 \right) : + \right. \\
 &\quad \left. + V \left( \frac{\rho^2}{\vartheta} \right) : \exp(-2Q\rho - Q^2) - 1 + Q^2 \left( 1 - \frac{2}{d} \rho \right) : \right] = \\
 &= \int \left( \frac{du}{\sqrt{\pi}} \right)^d \left[ \tilde{K}(u^2) \exp\left(-\frac{u^2 \vartheta}{4}\right) : e_2^{iup} : + \tilde{V}(u^2) \exp\left(-\frac{u^2}{4\vartheta}\right) : e_2^{iur} : \right], \quad (6.7)
 \end{aligned}$$

здесь

$$\begin{aligned}
 \tilde{K}(u^2) &= \int (d\rho)^d \sqrt{\rho^2 + m^2} e^{iup}; \\
 \tilde{V}(u^2) &= \int (d\rho)^d V(\rho^2) e^{iup}; \\
 e_2^z &= e^z - 1 - z - \frac{z^2}{2}; \\
 E_0 &= \min_{\{\vartheta\}} \int \left( \frac{d\rho}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\rho^2} \left[ \sqrt{\rho^2 \vartheta + m^2} + V \left( \frac{\rho^2}{\vartheta} \right) \right] = \\
 &= \min_{\{\vartheta\}} \int_0^\infty \frac{du u^{d/2-1} e^{-u}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \left[ \sqrt{u\vartheta + m^2} + V \left( \frac{u}{\vartheta} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Параметры  $\mu$  и  $\vartheta$  определяются из условия осцилляторного представления, т.е. гамильтониан взаимодействия  $H_I$  не должен содержать слагаемые с  $:\rho^2:$  и  $:\rho^2:$ . Уравнения имеют вид

$$\begin{aligned}
 \int_0^\infty du u^{d/2} e^{-u} \frac{d}{du} \left[ \sqrt{u\vartheta + m^2} - V \left( \frac{u}{\vartheta} \right) \right] &= 0, \\
 \omega &= \frac{2}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \int_0^\infty du u^{d/2} e^{-u} \frac{d}{du} V \left( \frac{u}{\vartheta} \right). \quad (6.8)
 \end{aligned}$$

Используя эти формулы, можно вычислить спектр релятивизованного гамильтониана.

**6.1. Примеры.** Рассмотрим корнельский потенциал для кварков с массой  $m = 0$ . В этом случае все интегралы вычисляются аналитически. Корнельский потенциал дает простейшую интерполяцию от кулоновского режима взаимодействия к линейно растущему поведению:

$$H = \sqrt{p^2} - \frac{\kappa}{r} + hr. \quad (6.9)$$

Этот потенциал использовался для описания полурелятивистских связанных кварк-кварковых систем на малых и больших расстояниях. Первое слагаемое связано с одноглюонным обменным взаимодействием, а второе обеспечивает конфайнмент кварков на больших расстояниях.

Из уравнения (6.8) для  $\vartheta$  и  $\omega$  получаем:

$$\begin{aligned} \vartheta &= \frac{h}{1 - \kappa_l}, & \kappa_l &= \frac{\kappa}{1 + l}, \\ \omega &= \sqrt{\frac{h}{1 - \kappa_l}} \frac{\Gamma(l + 2)}{\Gamma(l + 5/2)}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Мы видим, что 1) если  $h = 0$ , т.е. в случае чистого кулоновского потенциала, релятивизованное уравнение Шредингера не имеет решений для связанных состояний; 2) для  $\kappa \geq 1$  имеет место «падение на центр», т.е. не существует стабильных состояний в системе.

Гамильтониан в осцилляторном представлении

$$H = \omega a_j^+ a_j + H_l + \epsilon_0,$$

где

$$\begin{aligned} H_l &= -\sqrt{\frac{h}{1 - \kappa_l}} \frac{\Gamma(2 + l)}{\pi^{2+l}} \int \frac{(du)^d}{u^{2(2+l)}} \exp\left(-\frac{u^2}{4}\right) \times \\ &\times \left[ :e^{iuP}: + \left(1 - \kappa_l + \frac{1}{2} \kappa_l u^2\right) :e^{iuQ}: \right], \\ E_0 &= 2\sqrt{h(1 - \kappa_l)} \frac{\Gamma(l + 2)}{\Gamma(l + 3/2)}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Вторая поправка вычисляется стандартным образом, и в случае  $\kappa = 0$

$$\begin{aligned} E &= E_0 + E_2 = E_0(1 - \delta_l) = 2\sqrt{h} \frac{\Gamma(l + 2)}{\Gamma(l + 3/2)} (1 - \delta_l), \\ \delta_l &= \frac{1}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Gamma(l + 2) \Gamma(2n + 1/2)}{\Gamma(2n + l + 1/2)} \frac{2^{4n-1} \Gamma^2(2n - 1/2)}{\Gamma(4n + 2)}. \end{aligned}$$

Приведем некоторые численные значения для  $\delta_l$ :

$$\delta_0 = 0,006, \quad \delta_1 = 0,004, \quad \delta_l < 0,003 \quad \text{для } l \geq 2.$$

Для асимптотически больших  $l$  получаем

$$E = E_{0l} \approx 2 \sqrt{hl}. \quad (6.12)$$

В этом пределе энергия  $E_{0l}$  для линейного потенциала в случае нерелятивистского гамильтониана ведет себя как

$$E = E_{0l} \approx \frac{3}{2} (hl)^{2/3}. \quad (6.13)$$

Явление «падения на центр» для  $\kappa \geq 1$  ведет к тому, что собственные значения гамильтониана чувствительно зависят от массы  $m$  в кинетическом члене. В частности, если  $\kappa$  близко к единице, то нерелятивистский предел наступает для достаточно больших  $m$ . Продемонстрируем это утверждение. Рассмотрим два гамильтониана:

$$H_{\text{rel}} = (\sqrt{p^2 + m^2} - m) - \frac{\kappa}{r} + hr,$$

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\kappa}{r} + hr.$$

Наша цель найти значения  $\mu$  как функции от  $\kappa$ , для которой основные значения энергии этих двух гамильтонианов практически совпадают. Удобно сделать следующие подстановки:

$$r \rightarrow \frac{r}{\sqrt{h}}, \quad \mu = \frac{m}{\sqrt{h}}, \quad H \rightarrow H/\sqrt{h}.$$

Имеем

$$H_{\text{rel}} = (\sqrt{p^2 + \mu^2} - \mu) - \frac{\kappa}{r} + r,$$

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{\kappa}{r} + r.$$

Энергия основного состояния для обоих случаев дается формулами

$$E_{00}^{\text{rel}} = \min_{\{x\}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left\{ \int_0^\infty dt \sqrt{t} e^{-t} [\sqrt{\mu^2 + tx^2} - \mu] - \kappa x + \frac{1}{x} \right\},$$

$$E_{00} = \min_{\{\rho, x\}} \left\{ \frac{\Gamma(2 + \rho)}{\Gamma(3\rho) 8\rho^2 \mu} x^2 - \kappa x \frac{\Gamma(2\rho)}{\Gamma(3\rho)} + \frac{1}{x} \frac{\Gamma(4\rho)}{\Gamma(3\rho)} \right\}.$$

Таблица 6. Энергия основного состояния для релятивизованного и нерелятивистского гамильтонианов как функция параметров  $\kappa$  и  $\mu$

$\mu$	$\kappa = 0$		$\kappa = 0,1$		$\kappa = 0,5$		$\kappa = 0,9$	
	рел.	нерел.	рел.	нерел.	рел.	нерел.	рел.	нерел.
0,01	2,247	8,614	2,131	8,591	1,586	8,500	0,704	8,409
0,1	2,162	3,998	2,046	3,949	1,500	3,749	0,616	3,543
0,5	1,878	2,338	1,757	2,254	1,186	1,896	0,256	1,503
1,0	1,654	1,856	1,523	1,749	0,902	1,279	- 0,134	0,730
2,0	1,396	1,473	1,246	1,337	0,517	0,702	- 0,802	- 0,114
5,0	1,068	1,085	0,877	0,896	- 0,168	- 0,120	- 2,526	- 1,706
10	0,857	0,861	0,616	0,614	- 0,934	- 0,968	- 5,226	- 3,885
40					- 4,607	- 4,925	- 21,127	- 16,158
100							- 52,850	- 40,483

Результаты вычислений приведены в табл.6. Можно видеть, что для  $\kappa = 1/2$  нерелятивистское поведение наступает при  $\mu^2 = m^2/h \approx 100 + 500$ .

## 7. КУЛОНОВСКИЕ СИСТЕМЫ ТРЕХ ТЕЛ

Задача трех тел с кулоновским взаимодействием является одной из классических проблем квантовой механики. Фок первым предложил метод [34] решения уравнения Шредингера для трехтельной системы с кулоновским взаимодействием на примере атома гелия. Этот метод стал одним из основных современных подходов к решению уравнения Шредингера в проблеме трех тел. В настоящее время существуют два метода решения уравнения Шредингера для трехтельной системы: метод адиабатического представления и вариационный метод (см., например, [35—36]).

Вариационный метод, позволяющий выполнять высокоточные расчеты трехтельной кулоновской системы, алгоритмизирован и реализован в виде комплекса пакетов программ на ЭВМ. В рамках вариационного метода успешно вычисляются неадиабатические поправки к уровню энергии мезомолекул, с высокой точностью определяется энергия связи и другие параметры квантово-механических систем, таких как атом, молекула и ядро. Для улучшения сходимости при любых значениях масс и зарядов трехтельной системы используются разложения волновых функций по различным базисным

состояниям: метод хиллерасовского базиса [37], метод экспоненциального разложения [38], метод разложения в сфероидалных координатах [39] и др.

Главная цель этих исследований в большинстве случаев — построение высокоточного численного решения уравнения Шредингера для кулоновской системы трех тел при заданных значениях масс и зарядов. С усовершенствованием вычислительной техники точность определения энергии связанных состояний, т.е. решение уравнения Шредингера для трехтельных кулоновских нерелятивистских систем, достигла очень высокого уровня. Однако пока не удалось их описать единым образом.

Определение собственных значений гамильтониана трехтельной кулоновской системы численными методами с высокой точностью, конечно, важно. Однако для понимания динамики образования связанных состояний трехтельной кулоновской системы немаловажную роль играет качественное изучение зависимости собственных значений гамильтониана от масс и зарядов частиц системы. Так что продолжает оставаться актуальным создание аналитических методов, позволяющих с хорошей точностью качественно и полуколичественно исследовать эти зависимости, а также численных расчетов, дающих новые идеи для создания более эффективных алгоритмов.

В этом разделе мы применим метод осцилляторного представления для вычисления энергии основного состояния квантовых систем трех тел с кулоновским взаимодействием.

Мы будем действовать согласно следующему сценарию. Прежде всего в радиальном уравнении Шредингера для основного состояния трехтельной системы проведем замену переменных таким образом, чтобы получить гауссовское поведение волновой функции основного состояния. В результате получим модифицированное уравнение Шредингера с гамильтонианом осцилляторного типа. Затем запишем этот гамильтониан в осцилляторном представлении и получим уравнения, определяющие энергию основного состояния в нулевом приближении.

Результаты численных расчетов показали, что отклонение энергии основного состояния от точных значений оказалось менее одного процента, так что можно считать, что ряд теории возмущений сходится достаточно быстро. В принципе метод осцилляторного представления позволяет вычислять энергию основного состояния с произвольной точностью, учитывая высшие поправки теории возмущений. Здесь мы будем рассматривать только нулевое приближение. В качестве задач, представляющих реальный физический интерес, рассмотрим область стабильности трехтельных кулоновских систем с единичными зарядами и произвольными массами, а также вычислим энергии связанных состояний мезонных молекул легких ядер (He, Li, Be), найдем зависимость этих связанных состояний от масс и зарядов и

определим границу стабильности мезонных молекул с массами  $m_N = 2Zm_p$ , где  $m_p$  — масса протона и  $Z$  — заряд ядра.

**7.1. Гамильтониан трех тел для основного состояния.** Рассмотрим трехтелную систему с кулоновским взаимодействием в трехмерном пространстве. Пусть  $m_1, m_2$  и  $m_3$  — массы, а  $Z_1e, -Z_2e$  и  $Z_3e$  — заряды частиц, где  $Z_j$  — одновременно или положительные, или отрицательные числа, так что  $Z_i Z_j > 0$ . Уравнение Шредингера для этой системы записывается стандартным образом:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{(\mathbf{p}_j)^2}{m_j} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{Z_1 Z_3 e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} - \frac{Z_2 Z_3 e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|}. \quad (7.1)$$

Введем координаты Якоби  $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\}$ :

$$\mathbf{r}_1 = a_1 \mathbf{x} + b_2 \mathbf{y} + \mathbf{R},$$

$$\mathbf{r}_2 = -b_1 \mathbf{y} + \mathbf{R},$$

$$\mathbf{r}_3 = b_2 \mathbf{y} - a_3 \mathbf{x} + \mathbf{R}.$$

Удобно работать с безразмерными переменными

$$\mathbf{x} = \frac{1}{Me^2} \mathbf{r}; \quad \mathbf{y} = \frac{1}{\sqrt{M\mu} e^2} \mathbf{s}.$$

Здесь введены обозначения:

$$a_3 = \frac{m_1}{m_1 + m_3}, \quad a_1 = \frac{m_3}{m_1 + m_3},$$

$$b_1 = \frac{m_1 + m_3}{m_1 + m_2 + m_3}, \quad b_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2 + m_3},$$

$$M = \frac{m_1 m_3}{m_1 + m_3}, \quad \mu = \frac{(m_1 + m_3) m_2}{m_1 + m_2 + m_3},$$

$$a_1 + a_3 = 1, \quad b_1 + b_2 = 1.$$

После ряда упрощений гамильтониан (7.1) записывается в виде

$$H = Me^4 \left\{ \frac{1}{2} p_r^2 + \frac{1}{2} p_s^2 + \frac{Z_1 Z_3}{r} - \frac{Z_1 Z_2 c}{|\mathbf{s} + c_1 \mathbf{r}|} - \frac{Z_2 Z_3 c}{|\mathbf{s} - c_3 \mathbf{r}|} \right\}, \quad (7.2)$$

где член кинетической энергии полной системы опущен и

$$c = c_1 + c_3;$$



$$c_1 = \frac{1}{m_1} \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 + m_2 + m_3}}; \quad c_3 = \frac{1}{m_3} \sqrt{\frac{m_3 m_2 m_1}{m_1 + m_2 + m_3}}.$$

Энергия связи трехтельной системы с кулоновским взаимодействием в единицах  $\frac{1}{2} Me^4$  имеет вид

$$E = -\frac{1}{2} Me^4 U. \tag{7.3}$$

Таким образом, в этой энергетической шкале безразмерный параметр  $U$  определяет энергию системы.

Наша задача состоит в том, чтобы вычислить энергию основного состояния  $E$  гамильтониана (7.2). В этом случае волновая функция системы  $\Psi = \Psi(r, s, \phi)$  зависит только от трех переменных:

$$r = \sqrt{\mathbf{r}^2}, \quad s = \sqrt{\mathbf{s}^2}, \quad \phi,$$

где  $\phi$  является углом между векторами  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{s}$ . В этих переменных уравнение Шредингера записывается в форме:

$$h\Psi = 0, \tag{7.4}$$

где

$$\begin{aligned} h = & -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{2}{s} \frac{\partial}{\partial s} \right) - \\ & - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r^2} + \frac{1}{s^2} \right) \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \text{ctg } \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + V_1, \\ V_1 = & \frac{Z_1 Z_3}{r} + \frac{U}{2} - \frac{c Z_3 Z_2}{\sqrt{s^2 + c_3^2 r^2 - 2c_3 r s \cos \phi}} - \\ & - \frac{c Z_2 Z_1}{\sqrt{s^2 + c_1^2 r^2 + 2c_1 r s \cos \phi}}. \end{aligned} \tag{7.5}$$

Будем рассматривать переменные  $r, s$  и  $\phi$  в гамильтониане  $h$  (7.5) как независимые. При таком предположении гамильтониан  $h$  является неэрмитовым по переменной  $\phi$ , поскольку оператор

$$\Delta_\phi = \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \text{ctg } \phi \frac{\partial}{\partial \phi} = \frac{1}{\sin \phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

является неэрмитовым на интервале  $\phi \in [0, \pi]$ . Для восстановления эрмитовости гамильтониана по переменной  $\phi$  проще всего рассмотреть матричный элемент гамильтониана

$$\begin{aligned}
 (\Psi, h\Phi) &= \int dr \int ds \Psi^*(r, s, \phi) h\Phi(r, s, \phi) = \\
 &= 8\pi^2 \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\infty ds s^2 \int_0^\pi d\phi \sin \phi \Psi^*(r, s, \phi) h\Phi(r, s, \phi),
 \end{aligned}$$

где  $\Psi$  и  $\Phi$  зависят только от  $r$ ,  $s$  и  $\phi$ . Часть этого интеграла, зависящая от угла  $\phi$ , может быть записана как

$$\begin{aligned}
 &\int_0^\pi \frac{d\phi}{\sin \phi} \Psi(\phi) \left( -\frac{1}{2} \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 + \sin^2 \phi V_1(\cos \phi) \right) \Phi(\phi) = \\
 &= \int_{-\infty}^\infty du \Psi(u) \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{\cosh^2 u} V_1(\tanh u) \right) \Phi(u),
 \end{aligned}$$

где введена переменная  $u = \ln \left( \operatorname{tg} \frac{\phi}{2} \right)$ . Таким образом, оператор

$$\left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial u^2}$$

является эрмитовым.

Эрмитов гамильтониан имеет вид:

$$\begin{aligned}
 h = -\frac{1}{2 \cosh^2 u} &\left[ \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left( \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{2}{s} \frac{\partial}{\partial s} \right) \right] - \\
 &-\frac{1}{2} \left( \frac{1}{r^2} + \frac{1}{s^2} \right) \frac{d^2}{du^2} + V,
 \end{aligned} \tag{7.6}$$

где

$$\begin{aligned}
 V = V(r, s, u) &= \\
 &= \frac{1}{\cosh^2 u} \left[ \frac{Z_1 Z_3}{r} \frac{U}{2} - \frac{c Z_3 Z_2}{\sqrt{s^2 + c_3^2 r^2 - 2c_3 r s \tanh u}} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{c Z_2 Z_1}{\sqrt{s^2 + c_1^2 r^2 + 2c_1 r s \tanh u}} \right]
 \end{aligned}$$

и  $r$ ,  $s$  и  $u$  — независимые переменные.

Согласно процедуре, изложенной в разд.3 и 5, произведем замену переменных

$$r = Q^2, \quad s = q^2.$$

При этой замене для кинетической части гамильтониана (7.6) имеем

$$\left[ \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left( \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{2}{s} \frac{\partial}{\partial s} \right) \right] \Phi(r, s) =$$

$$= \left[ \frac{1}{4Q^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{3}{Q} \frac{\partial}{\partial Q} \right) + \frac{1}{4q^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{3}{q} \frac{\partial}{\partial q} \right) \right] \Phi(Q, q).$$

Операторы

$$X_Q = \left( \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{3}{Q} \frac{\partial}{\partial Q} \right), \quad X_q = \left( \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{3}{q} \frac{\partial}{\partial q} \right)$$

могут рассматриваться как радиальная часть четырехмерных лапласианов  $\square_Q$  и  $\square_q$ . Волновая функция системы зависит только от переменных  $Q$ ,  $q$  и  $u$ . Следовательно, операторы  $X_Q$  и  $X_q$ , действующие на функцию  $\Psi(Q, q, u)$ , могут быть идентифицированы с радиальными частями операторов  $\square_Q$  и  $\square_q$ , и переменные  $Q_\mu$  и  $q_\mu$  можно рассматривать как векторы четырехмерного пространства.

Итак, эрмитов гамильтониан кулоновской трехтельной системы для основного состояния после замены

$$\begin{aligned} 0 < \phi < \pi, & \quad \phi \rightarrow u = \ln \left( \operatorname{tg} \frac{\phi}{2} \right), & \quad -\infty < u < \infty, \\ 0 < s < \infty, & \quad s \rightarrow q = \sqrt{s}, & \quad 0 < q < \infty, \\ 0 < r < \infty, & \quad r \rightarrow Q = \sqrt{r}, & \quad 0 < Q < \infty \end{aligned} \quad (7.7)$$

имеет вид

$$h = \frac{1}{2 \cosh^2 u} \left( q^2 \frac{P_Q^2}{4} + Q^2 \frac{P_q^2}{4} \right) + \left( \frac{Q^2}{q^2} + \frac{q^2}{Q^2} \right) P_u^2 + V, \quad (7.8)$$

где

$$V = \frac{1}{\cosh^2 u} \left[ 2q^2 Z_1 Z_3 + UQ^2 q^2 - 2c Q^2 q^2 Z_2 \times \right.$$

$$\times \left( \frac{Z_1}{\sqrt{q^4 + c_1^2 Q^4 - 2c_1 q^2 Q^2 \tanh u}} + \right.$$

$$\left. \left. + \frac{Z_3}{\sqrt{q^4 + c_3^2 Q^4 + 2c_3 q^2 Q^2 \tanh u}} \right) \right],$$

где  $Q = \sqrt{Q_\mu^2}$ ,  $q = \sqrt{q_\mu^2}$  и  $Q_\mu$ ,  $q_\mu$  — векторы в четырехмерном вспомогательном пространстве,  $\square_Q = -P_Q^2$ ,  $\square_q = -P_q^2$ . Волновая функция

основного состояния зависит только от трех независимых переменных  $Q, q$  и  $u$ , т.е.  $\Psi = \Psi(Q, q, u)$ .

Волновая функция в осцилляторном представлении должна правильно описывать поведение системы как на больших, так и на малых расстояниях. Остановимся теперь на проблеме малых расстояний. Из выражения (7.6) видно, что потенциал взаимодействия трехтельной кулоновской системы содержит потенциал отталкивания по переменной  $r$ . Минимум потенциала взаимодействия не находится в точке  $r = 0$ , и волновая функция имеет максимум по  $r$  в некоторой точке  $r_{\max} > 0$ . В методе осцилляторного представления учет отталкивания в нуле осуществляется переходом к пространству высшей размерности, о чем говорилось в разд.3. При переходе в  $d$ -мерное пространство потенциал отталкивания эффективно превращается в потенциал притяжения, а размерность пространства  $d$  рассматривается как добавочный вариационный параметр.

Окончательно гамильтониан для основного состояния кулоновской трехтельной системы имеет вид

$$h = \frac{1}{\cosh^2 u} \left( q^2 \frac{P^2}{4} + Q^2 \frac{P^2}{4} \right) + \left( \frac{Q^2}{q^2} + \frac{q^2}{Q^2} \right) P_u^2 + W \quad (7.9)$$

с

$$W = - \frac{d(d-4)}{16 \cosh^2 u} \frac{q^2}{Q^2} + V,$$

где  $q_\mu \in R^4$ ,  $Q_j \in R^d$ ,  $u \in R^1$  и потенциал  $V$  представлен в (7.6).

Величина  $U$ , определяющая энергию основного состояния исходной системы, входит как параметр в гамильтониан  $h$  (7.9), поэтому наша задача формулируется следующим образом. Мы должны найти основное состояние гамильтониана  $h$ , т.е. решить уравнение Шредингера

$$h\Psi = \epsilon\Psi \quad (7.10)$$

и найти энергию основного состояния, которая является функцией параметра  $U$ :

$$\epsilon = \epsilon(U).$$

Согласно уравнению Шредингера (7.4), эта энергия равна нулю, так что уравнение

$$\epsilon(U) = 0 \quad (7.11)$$

определяет параметр  $U$  и, следовательно, энергию трехтельной системы с кулоновским взаимодействием согласно формуле (7.3).

**7.2. Гамильтониан в осцилляторном представлении.** Применим метод осцилляторного представления к вычислению функции  $\varepsilon(U)$  как энергии основного состояния гамильтониана (7.9). Для этого перепишем гамильтониан (7.9) в виде

$$h = h_0 + h_I + \varepsilon_0. \quad (7.12)$$

Здесь  $h_0$  — осцилляторная часть гамильтониана:

$$h_0 = \frac{1}{2\kappa_Q} \left[ \frac{1}{2} (P_Q^2 + \Omega^2 Q^2) - \frac{d\Omega}{2} \right] + \frac{1}{2\kappa_q} \left[ \frac{1}{2} (P_q^2 + \omega^2 q^2) - 2\omega \right] + \frac{1}{\kappa_u} \left[ \frac{1}{2} P_u^2 - \frac{\theta(\theta+1)}{2 \cosh^2(u)} \frac{\theta^2}{2} \right], \quad (7.13)$$

где  $\kappa_Q, \kappa_q, \kappa_u, \Omega, \omega, \theta$  — свободные положительные параметры. Согласно правилам построения осцилляторного представления, рассмотрим уравнение Шредингера:

$$h_0 \Psi_0(Q, q, u) = 0.$$

Решение этого уравнения для основного состояния имеет вид

$$|0\rangle = \Psi_0(Q, q, u) = N \frac{1}{[\cosh u]^\theta} \exp \left\{ -\frac{\Omega}{2} Q^2 - \frac{\omega}{2} q^2 \right\}, \quad (7.14)$$

где  $N$  — постоянная, которая определяется из условия нормировки волновой функции.

Учитывая (7.8,9,13), получаем для  $h_I + \varepsilon_0$ :

$$h_I + \varepsilon_0 = \frac{1}{2\kappa_Q} \left( \frac{d\Omega}{2} - \frac{\Omega^2 Q^2}{2} \right) + \frac{1}{2\kappa_q} \left( \frac{4\omega}{2} - \frac{\omega^2 q^2}{2} \right) + \frac{1}{2\kappa_u} \left( \frac{\theta(\theta+1)}{2 [\cosh u]^2} - \frac{\theta^2}{2} \right) + \frac{P_Q^2}{4} \left( \frac{q^2}{[\cosh u]^2} - \frac{1}{\kappa_Q} \right) + \frac{P_q^2}{4} \left( \frac{Q^2}{[\cosh u]^2} - \frac{1}{\kappa_q} \right) + \frac{P_u^2}{2} \left( \frac{2Q^2}{q^2} + \frac{2q^2}{Q^2} - \frac{1}{\kappa_u} \right) - \frac{d(d-4)}{16 [\cosh u]^2} \frac{q^2}{Q^2} + V, \quad (7.15)$$

где потенциал  $V$  имеет вид (7.8).

Теперь выделим гамильтониан взаимодействия и энергию основного состояния в нулевом приближении. Введем определение:

$$: A : = A - \langle 0|A|0 \rangle = A - (\Psi_0 A \Psi_0),$$

где  $A$  — произвольный оператор. Имеем

$$\begin{aligned} : P_Q^2 : &= P_Q^2 - (\Psi_0 P_Q^2 \Psi_0) = P_Q^2 - \frac{d\Omega}{2}, \\ : Q^2 : &= Q^2 - (\Psi_0 Q^2 \Psi_0) = Q^2 - \frac{d}{2\Omega}, \\ : P_q^2 : &= P_q^2 - (\Psi_0 P_q^2 \Psi_0) = P_q^2 - 2\omega, \\ : q^2 : &= q^2 - (\Psi_0 q^2 \Psi_0) = q^2 - \frac{2}{\omega}, \\ : P_u^2 : &= P_u^2 - (\Psi_0 P_u^2 \Psi_0) = P_u^2 - \frac{\theta^2}{2\theta + 1}. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Подставим соотношения (7.16) в (7.15) и потребуем выполнения условия осцилляторного представления, т.е. потребуем, чтобы полученное выражение для гамильтониана взаимодействия не содержало квадратичных слагаемых по  $: Q^2 :$ ,  $: q^2 :$ ,  $: P_Q^2 :$ ,  $: P_q^2 :$ ,  $: P_u^2 :$ . Из условия равенства нулю коэффициентов при  $: P_Q^2 :$ ,  $: P_q^2 :$  и  $: P_u^2 :$  определяются параметры  $\kappa_Q$ ,  $\kappa_q$  и  $\kappa_u$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\kappa_Q} &= \left( \Psi_0 \frac{q^2}{[\cosh u]^2} \Psi_0 \right) = \frac{4}{\omega} \frac{\theta}{2\theta + 1}, \\ \frac{1}{\kappa_q} &= \left( \Psi_0 \frac{Q^2}{[\cosh u]^2} \Psi_0 \right) = \frac{d}{\Omega} \frac{\theta}{2\theta + 1}, \\ \frac{1}{\kappa_u} &= \left( \Psi_0 \left[ \frac{2Q^2}{q^2} + \frac{2q^2}{Q^2} \right] \Psi_0 \right) = \frac{d\omega}{\Omega} + \frac{8}{d-2} \frac{\Omega}{\omega}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Учитывая эти значения параметров, получим для энергии основного состояния в нулевом приближении:

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(U) &= \min_{\{\Omega, \omega, \theta, d\}} (\Psi_0 h \Psi_0) = \\ &= \min_{\{\Omega, \omega, \theta, d\}} \left\{ \frac{2\theta}{2\theta + 1} \left[ \frac{d}{4} \left( \frac{\Omega}{\omega} + \frac{\omega}{\Omega} \right) + \frac{\theta}{2} \left( \frac{4}{d-2} \frac{\Omega}{\omega} + \frac{d\omega}{2\Omega} \right) + \frac{4Z_1 Z_3}{\omega} + \right. \right. \\ &+ \left. \frac{Ud}{\omega\Omega} - \frac{d(d-4)}{4(d-2)} \frac{\Omega}{\omega} \right] - \frac{c}{2} \frac{d(d+2)(d+4)}{4^\theta \Gamma^2(\theta)} f(\Omega, \omega, \theta, d) \left. \right\}, \end{aligned} \quad (7.18)$$

где

$$f = \int_0^1 dy y^{d/2} (1-y)^2 \int_{-1}^1 d\tau (1-\tau^2)^\theta \times$$

$$\times \left[ \frac{Z_2 Z_3}{\sqrt{(1-y)^2 \Omega^2 + c_3^2 y^2 \omega^2 - 2c_3 y (1-y) \tau \omega \Omega}} + \right.$$

$$\left. + \frac{Z_2 Z_1}{\sqrt{(1-y)^2 \Omega^2 + c_1^2 y^2 \omega^2 + 2c_1 y (1-y) \tau \omega \Omega}} \right].$$

Гамильтониан взаимодействия  $h_I$  имеет вид:

$$h_I = \frac{\theta}{2\theta+1} \left( \frac{1}{2} : P_Q^2 :: q^2 : + \frac{1}{2} : P_q^2 :: Q^2 : + \theta : \frac{1}{q^2} :: Q^2 : + \right.$$

$$\left. + \theta : \frac{1}{Q^2} :: q^2 : + 2U : q^2 :: Q^2 : - \frac{d(d-4)}{8} : \frac{1}{Q^2} :: q^2 : \right) +$$

$$+ : P_u^2 : \left( : \frac{1}{q^2} :: Q^2 : + : \frac{1}{Q^2} :: q^2 : + \omega : Q^2 : + \frac{2\Omega}{d-2} : q^2 : + \right.$$

$$\left. + \frac{d}{2\Omega} : \frac{1}{q^2} : + \frac{2}{\omega} : \frac{1}{Q^2} : \right) + \left( 2Z_1 Z_3 : q^2 : + U : Q^2 :: q^2 : + \right.$$

$$+ \frac{d}{2\Omega} U : q^2 : + \frac{2}{\omega} U : Q^2 : + \frac{1}{4} : P_Q^2 :: q^2 : + \frac{1}{4} : P_q^2 :: Q^2 : +$$

$$+ \frac{1}{2\omega} : P_Q^2 : + \frac{d}{8\Omega} : P_q^2 : + \frac{d\Omega}{8} : q^2 : + \frac{\omega}{2} : Q^2 : -$$

$$\left. - \frac{d(d-4)}{4\omega} : \frac{1}{Q^2} : - \frac{d(d-4)\Omega}{8(d-2)} : q^2 : \right) : \frac{1}{[\cosh u]^2} : - : W : , \quad (7.19)$$

здесь

$$W = \frac{2cQ^2 q^2 Z_3 Z_2}{\cosh^2 u \sqrt{q^4 + c_3^2 Q^4 - 2c_3 q^2 Q^2 \tanh u}} +$$

$$+ \frac{2cQ^2 q^2 Z_2 Z_1}{\cosh^2 u \sqrt{q^4 + c_1^2 Q^4 + 2c_1 q^2 Q^2 \tanh u}}.$$

**7.3. Точность нулевого приближения.** В методе осцилляторного представления в принципе есть возможность определить энергию основного со-

стояния трехтельной кулоновской системы с любой точностью, учитывая высшие порядки теории возмущений по степеням гамильтониана взаимодействия  $h_I$ . Здесь мы не будем вычислять следующую поправку к энергии основного состояния, а определим точность метода, сравнивая результат расчета в нулевом приближении с точными значениями энергии, полученными численными методами. Для этого вычислим энергии основного состояния следующих кулоновских систем:

$$H^- = (pee), \quad H_2^+ = (ppe), \quad (e^+e^-e^-), \quad (pp\mu), \quad (dd\mu), \quad (d\mu).$$

Энергии этих трехтельных систем вычислялись многими авторами разными методами (см., например, [35—39,43]). С усовершенствованием вычислительной техники точность вычисления энергии трехтельной кулоновской системы достигла очень высокого уровня. Поэтому эти численные результаты можно считать точными значениями уровней энергии трехтельной системы.

Выражение (7.18) для энергии основного состояния в нулевом приближении и уравнение  $\epsilon_0(U) = 0$  определяют параметр  $U$  как функцию масс и зарядов частиц. При этом энергия системы вычисляется по формуле (7.3).

В наших вычислениях мы использовали следующие значения масс:

$$m_\mu = 206,77m_e, \quad m_p = 1836,15m_e, \quad m_d = 3670,48m_e, \quad m_t = 5496,9m_e,$$

где  $m_e$  — масса электрона. Результаты вычислений приведены в табл.7 и 8. Для сравнения результатов наших вычислений в таблицах приведены точные значения уровней энергии этих систем из работы [40].

В табл.7 приведены результаты вычислений параметра  $U$  для трехтельной атомной системы.  $U^{\text{оп}}$  — нулевое приближение осцилляторных представлений и  $U^{\text{точн}}$  — точное значение согласно [40], а  $\Delta U = |U^{\text{точн}} - U^{\text{оп}}| / U^{\text{точн}} \cdot 100\%$  определяет точность нулевого приближения.

Таблица 7. Результаты вычислений параметра  $U$

Система	$\omega$	$\Omega$	$\theta$	$d$	$U^{\text{оп}}$	$U^{\text{точн}}$	$\Delta U, \%$
$e^+e^-e$	5,076	0,1034	0,1022	4,102	0,520	0,52399	0,762
$\mu e^-e^-$	4,833	0,1102	0,103	4,106	1,050	1,05011	0,011
$pe^-e^-$	4,835	0,1105	0,104	4,107	1,050	1,0547	0,446
$pp e^-$	0,0852	0,1113	0,102	4,101	1,190	1,1943	0,360



Таблица 8. Результаты вычислений термов мезомолекул

Система	$\omega$	$\Omega$	$\theta$	$d$	$E^{\text{оп}}, \text{эВ}$	$E^{\text{точн}}, \text{эВ}$	$\Delta E, \%$
$pp\mu$	5,339	0,1048	0,1031	4,1195	- 2781	- 2782	0,036
$dd\mu$	8,750	0,895	0,100	4,104	- 2987	- 2988	0,034
$d\mu$	0,0867	0,8325	0,100	4,128	- 3028	- 3029	0,033

В табл.8 приведены значения термов мезомолекул, где  $E^{\text{оп}}$  — термы в нулевом приближении осцилляторного представления, вычисленные по формуле (41),  $E^{\text{точн}}$  — точные значения [40] и  $\Delta E = |E^{\text{точн}} - E^{\text{оп}}| / E^{\text{точн}} \cdot 100\%$ .

Уровни энергии кулоновской трехтельной системы вычислены для основного состояния. Из табл.7 и 8 видно, что отклонение результатов наших вычислений в нулевом приближении от точных значений составляет менее одного процента.

**7.4. Граница стабильности.** Исследование зависимости энергии связи системы от масс частиц и зарядов крайне важно для понимания особенностей энергетических спектров трехтельных кулоновских систем.

Определение границ стабильности трехтельной кулоновской системы является одной из ключевых проблем кулоновской задачи трех тел (см. подробности в [40,41]). Зависимость энергии связи системы от масс частиц исследовалась в [40,41], а в [42] проведены численные расчеты, касающиеся установления границ стабильности. Более детальное исследование по установлению границ стабильности трехтельной кулоновской системы проведено в [40].

Наша задача формулируется следующим образом. Рассмотрим трехтельную кулоновскую систему ( $A^{\pm}, B^{\mp}, C^{\pm}$ ) с единичными электрическими зарядами, т.е.  $\pm, \mp, \pm$  и массами  $m_A, m_B, m_C$ . Пусть  $m_A \geq m_C$ . Стабильность данной системы определяется относительно канала распада

$$(A, B, C) \rightarrow (A, B) + C, \quad (7.20)$$

где  $(A, B)$  — двухчастичный атом, а  $C$  является свободной частицей.

В рамках нашего метода исследуем зависимость энергии трехтельной системы от масс частиц и определим границу стабильности. Согласно [40] вместо масс частиц используем переменные

$$\alpha_j = \frac{1}{m_j} \left( \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B} + \frac{1}{m_C} \right), \quad (j = A, B, C)$$

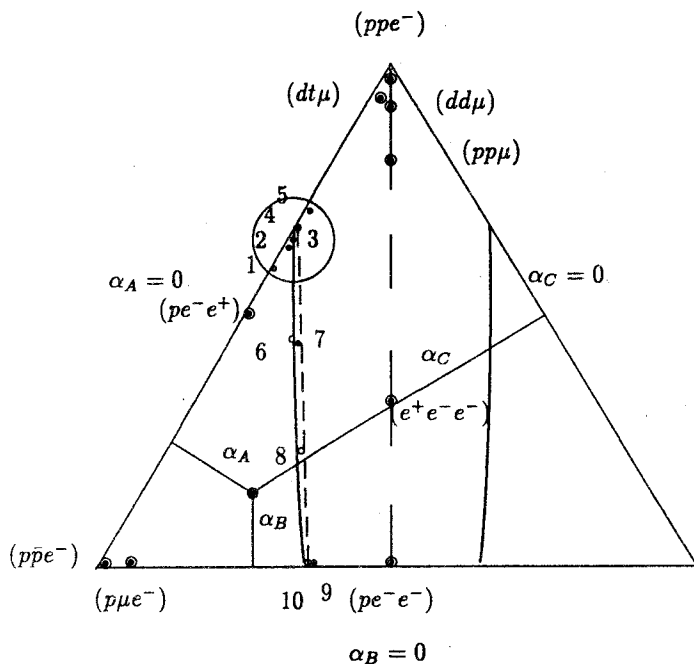


Рис.1. Треугольник стабильности. Система  $(pe^-C^+)$  обозначена точками: 1 —  $M_C = 1,51m_e$ , 2 —  $1,57m_e$ , 3 —  $1,9m_e$  и 5 —  $M_C = 2,2m_e$ , а при  $M_C = 1,945m_e$  — кружком 4. Система  $(pB^-e^-)$  обозначена точкой 9 —  $M_B = 1,57m_e$ , 10 —  $M_B = 1,575m_e$ . Система  $(A^+e^-e^-)$  отмечена точкой 7 —  $M_A = 4,19m_e$ , а при  $M_A = 4,35m_e$  — кружком 6.  $(A^+A^-e^-)$ -система обозначена кружком 8 —  $M_A = 2,45m_e$

$$\alpha_A + \alpha_B + \alpha_C = 1. \quad (7.21)$$

Построим равносторонний треугольник, высота которого равна единице, так что последнее равенство можно трактовать как сумму высот, проведенных из некоторой внутренней точки треугольника (см. рис.1). Тогда каждой внутренней точке этого треугольника соответствует некоторая трехтельная система. Назовем его *треугольником стабильности*.

Наша задача состоит в том, чтобы в треугольнике стабильности найти границу, разделяющую устойчивые и неустойчивые состояния трехтельной системы. Для этого рассмотрим молекулу  $(A, B, C)$  с единичными

электрическими зарядами, т.е. ( $q_B = \mp 1, q_A = q_C = \pm 1$ ) и массами  $M_A, M_B, M_C$  относительно канала распада (7.20). Энергия связи системы вычисляется по формуле

$$\Delta E = -\frac{1}{2} e^4 \frac{M_A M_B}{M_A + M_B} (U - 1), \quad (7.22)$$

где параметр  $U$  как функция масс частиц  $\alpha_j$  вычисляется по формуле (7.18). Из условия  $\Delta E = 0$  или  $U = 1$  определяется граница стабильности. Массы частиц, найденные из этого условия, будем называть *критическими массами*.

Прежде всего отметим соответствующими точками на треугольнике стабильности некоторые хорошо известные системы

$$H_2 = (ppe^-), \quad H^- = (pe^-e^-), \quad (e^+e^-e^-), \quad (pe^-\mu^-), \quad (pe^-e^+).$$

Система  $(e^+e^-e^-)$  изучена в [47,48] и является стабильной. Молекулы  $(ppe^-) = H_2^+$  и  $(pe^-e^-) = H^-$  — обычный ион молекулы водорода — также являются стабильными ([47,49]), а система  $(pe^-\mu^-)$  является несвязанной [50]). Остался открытым вопрос, стабильна или нет молекула  $(pe^-e^+)$  (подробности см. в [40]).

Вычислим по формулам (7.18) и (7.22) критическую массу для трехтельной системы в нашем подходе.

Молекулы  $(pe^-e^+)$  и  $(pe^-p)$  отличаются массами позитрона и протона. Исследуем энергию связи системы  $(pe^-C^+)$  как функцию от  $M_C$  — массы  $C$ -частицы, т.е. будем изменять массу  $M_C$  в пределах от  $m_e$  до  $m_p$ . В результате оказывается, что при значении  $M_C = m_e$  имеем  $U = 0,901$ , т.е.  $(pe^-e^+)$ -система является нестабильной, а при  $M_C = 1,945m_e$  параметр  $U = 1,0$ , и система переходит в стабильное состояние. Таким образом, значение  $M_C = 1,945m_e$  для системы  $(pe^-C^+)$  является критической массой, или границей перехода от нестабильного к стабильному состоянию. Ограничения на критическое значение  $M_C$  для системы рассмотрены разными авторами. В частности, в [44] получено верхнее ограничение:  $M_C < 2,20m_e$ , а в работе [45] — нижнее ограничение  $M_C > 1,51m_e$  при  $m_p = \infty$ , в [46] —  $M_C \geq 1,57m_e$ , в [40] —  $M_C \geq 1,9m_e$ .

Молекулы  $(pe^-e^+)$  и  $(e^+e^-e^+)$  отличаются также массами позитрона и протона. Рассмотрим систему  $(A^+e^-e^+)$ . При значении массы  $A$ -частицы

Таблица 9. Результаты вычисления границ стабильности (см. рис.1)

$\alpha_A$	0,000	0,103	0,225	0,388
$\alpha_B$	0,662	0,440	0,229	0,002

$M_A = m_p$  система нестабильна, а при  $M_A = m_e$  — стабильна. Уменьшая массу  $A$ -частицы до  $M_A = 4,35m_e$ , имеем  $U = 1$ , т.е. система  $(A^+e^-e^+)$  становится связанной. В [40] для системы  $(A^+B^-B^+)$  установлено нижнее ограничение для критической массы частицы  $A$ :  $M_A > 4,19M_B$ .

Вычислена зависимость энергии основного состояния систем  $(pe^-C^+)$  и  $(A^+e^-e^+)$  от масс частиц  $C$  и  $A$  и установлены границы стабильности, т.е. найдены значения критических масс для этих систем:  $M_C = 1,945m_e$  и  $M_A = 4,35m_e$ . Эти системы рассматривались в работах [40,44—46], где установлены лишь ограничения на значения критических масс.

Рассмотрим молекулу  $(p\mu^-e^-)$  и ион атома водорода  $(pe^-e^-)$ . Эти системы различаются только массами мюона и электрона. При увеличении масс  $B$ -частицы в системе  $(pB^-e^-)$  оказалось, что для  $M_B = 1,575m_e$  параметр  $U = 1$ . Таким образом, для  $(pB^-e^-)$  критическое значение массы  $M_B = 1,575m_e$ . В [40,46] для молекулы  $(pB^-e^-)$  получено ограничение на критическое значение массы  $M_B \geq 1,57m_e$ .

Обратимся к системе  $(A^+A^-e^-)$ . При увеличении массы  $A$ -частиц от  $m_e$  до  $m_p$  оказалось, что критическая масса составляет  $M_A = 2,45m_e$ .

Граница стабильности, полученная по формуле (7.22), изображена кружками на рис.1. В [40,44—46] установлены лишь ограничения на значения критических масс систем  $(pe^-C^+)$ ,  $(pB^-e^-)$  и  $(A^+e^-e^+)$ . Наши результаты согласуются с результатами этих работ и представлены в табл.9. Приближенное уравнение границы стабильности имеет вид

$$\left(\frac{\alpha_A}{0,391}\right)^{0,89} + \left(\frac{\alpha_B}{0,662}\right)^{0,89} = 1. \quad (7.23)$$

Высота треугольника к оси  $\alpha_1 = 0$ , на которой любая молекула стабильна, является осью зарядовой симметрии трехтельной системы. Внутренняя часть треугольника, ограниченная линиями границы стабильности, является областью стабильности (см. рис.1), т.е. молекула, соответствующая любой точке этой области, является стабильной.

**7.5. Мезомолекулы легких ядер в осцилляторном представлении.** В рамках метода осцилляторного представления рассмотрим мезомолекулы легких ядер.

Исследование зависимости энергии связи ( $\mu N_Z$ )-мезомолекулы от массы и заряда частиц является одной из фундаментальных проблем как теоретических, так и экспериментальных исследований малотельных кулоновских систем [51—59]. Это является одним из центральных пунктов понимания молекулярного механизма перехода мюона от мезоатома водорода к другому ядру, а также понимания динамики формирования малотельной кулоновской системы. Решая эту проблему, мы получаем детальную информацию о сильном взаимодействии  $\mu N_Z$ -системы при очень низких энергиях (несколько кэВ), которая имеет отношение к астрофизическим проблемам, например, к  $pp$ -циклам на Солнце.

Переход мюона от мезоатома изотопа водорода  $\mu(p, d, t)$  к легким ядрам ( $\text{He}, \text{Li}, \text{Be}$ ) рассматривался в работах [54—59]. Взаимодействие мезоатома водорода с легкими ядрами может привести к образованию мезоводород-ядерных молекул [52]. Подобные системы нестабильны и распадаются, причем эти распады могут сопровождаться распадом (диссоциацией) молекулы на ядро водорода (и возможные изотопы  $p, d, t$ ) и мезомолекулы легких ядер, поскольку связанные состояния для низших термов отсутствуют.

Молекулярный механизм перехода мюона из основного состояния мезоводорода в гелий подтвержден экспериментально [53,54]. Герштейн и др. [55] и Кравцов и др. [56] вычислили энергии связи систем ( $\mu \text{}^3\text{He}$ ) и ( $\mu \text{}^4\text{He}$ ).

Переход мюона из мезоводорода в литий представляет особый интерес (см., например, [57]). Энергии связи мезомолекул легких ядер (например, для лития) впервые были рассчитаны в приближении Борна — Оппенгеймера в [58], а в работе [59] это было сделано на основе метода поверхностных функций. В [59] также определена энергия связи системы ( $\mu \text{}^7\text{Be}$ ). Основная цель этих исследований состоит в нахождении решения уравнения Шредингера для трехтельной кулоновской системы с высокой точностью.

В рамках метода осцилляторного представления [60] вычислим энергию связи мезомолекулы легких ядер ( $\text{He}, \text{Li}, \text{Be}$ ). Цель состоит в исследовании зависимости энергии основного состояния кулоновской трехтельной системы от массы и заряда легкого ядра.

**7.6. Энергия связи мезомолекулы легких ядер.** Энергия связи ( $\mu N_Z$ )-мезомолекул определяется относительно энергии ( $\mu$ )-атома (подробно см. в [55—61]):

$$E_{\text{bin}} = E_{\mu N_Z} - E_{\mu} \quad (7.24)$$

Энергию основного состояния ( $H\mu N_Z$ )-мезомолекулы представим в виде

$$E = -\frac{1}{2} \alpha^2 \frac{m_H m_N}{m_H + m_N} U,$$

где  $m_H$  и  $m_N$  — массы изотопа водорода и ядра соответственно. Согласно (7.24), энергия связи мезомолекулы ( $H\mu N_Z$ ) записывается следующим образом:

$$E_{\text{bin}} = -\frac{\alpha^2}{2} \frac{m_H m_\mu}{m_H + m_\mu} \left( \frac{m_N m_H + m_\mu}{m_\mu m_H + m_N} U - 1 \right), \quad (7.25)$$

где  $m_\mu$  — масса мюона. Энергетический параметр  $U$  есть функция от масс и заряда частиц и является корнем уравнения

$$\varepsilon_0(U) = 0, \quad (7.26)$$

где  $\varepsilon_0(U)$ , согласно (7.18), в нулевом приближении осцилляторного представления имеет вид

$$\varepsilon_0(U) = \min_{\{\Omega, \omega, \theta, d\}} \left\{ \frac{2\theta}{2\theta + 1} \left[ \frac{d}{4} \left( \frac{\Omega}{\omega} + \frac{\omega}{\Omega} \right) + \frac{\theta}{2} \left( \frac{d}{d-2} \frac{\Omega}{\omega} + \frac{d\omega}{2\Omega} \right) + \frac{4Z}{\omega} + \frac{Ud}{\omega\Omega} - \frac{d(d-4)}{4(d-2)} \frac{\Omega}{\omega} \right] - \frac{c}{2} \frac{d(d+2)(d+4)}{4^\theta} \frac{\Gamma(2\theta)}{\Gamma^2(\theta)} f(\Omega, \omega, \theta, d) \right\}, \quad (7.27)$$

$$f = \int_0^1 dy y^{d/2} (1-y)^2 \int_{-1}^1 d\tau (1-\tau^2)^\theta \times$$

$$\times \left[ \frac{Z}{\sqrt{(1-y)^2 \Omega^2 + c_N^2 y^2 \omega^2 - 2c_N y(1-y) \tau \omega \Omega}} + \frac{Z}{\sqrt{(1-y)^2 \Omega^2 + c_H^2 y^2 \omega^2 + 2c_H y(1-y) \tau \omega \Omega}} \right].$$

Здесь введены обозначения

$$\lambda = \sqrt{\frac{m_H m_\mu m_N}{m_H + m_\mu + m_N}}, \quad M = \frac{m_H m_N}{m_N + m_H},$$

Таблица 10. Значения параметров в методе ОП

Система	$\Omega$	$\omega$	$d$	$\theta$	$U$
$(p\mu \text{ } ^3\text{He})$	0,23719	0,10957	4,1001	0,10297	0,13863
$(d\mu \text{ } ^3\text{He})$	0,19336	0,10621	4,1000	0,10215	0,09128
$(t\mu \text{ } ^3\text{He})$	0,17423	0,10195	4,1028	0,10016	0,07448
$(p\mu \text{ } ^4\text{He})$	0,23029	0,10771	4,1000	0,10233	0,13035
$(d\mu \text{ } ^4\text{He})$	0,18513	0,10531	4,1052	0,10199	0,08245
$(t\mu \text{ } ^4\text{He})$	0,17210	0,10789	4,1000	0,10198	0,06542
$(p\mu \text{ } ^6\text{Li})$	0,21706	0,10740	4,1018	0,10236	0,11929
$(d\mu \text{ } ^6\text{Li})$	0,17335	0,10730	4,1045	0,10141	0,07191
$(t\mu \text{ } ^6\text{Li})$	0,16302	0,11148	4,1138	0,1001	0,05509
$(p\mu \text{ } ^7\text{Li})$	0,21394	0,10686	4,1000	0,10241	0,11698
$(d\mu \text{ } ^7\text{Li})$	0,17053	0,11041	4,1000	0,10377	0,06944
$(t\mu \text{ } ^7\text{Li})$	0,15821	0,11075	4,1040	0,10000	0,05252
$(p\mu \text{ } ^7\text{Be})$	0,21226	0,10777	4,1007	0,10226	0,11616
$(d\mu \text{ } ^7\text{Be})$	0,17113	0,10950	4,1020	0,10065	0,06900
$(t\mu \text{ } ^7\text{Be})$	0,15231	0,11059	4,1033	0,10001	0,05215

Таблица 11. Абсолютное значение энергии связи мезомолекулы изотопа гелия (в эВ)

Система	Энергия			
	[55]	[56]	[61]	ОП
$(p\mu \text{ } ^3\text{He})$	67,70	69,0	70,74	67,4
$(d\mu \text{ } ^3\text{He})$	69,96	70,6		70,0
$(t\mu \text{ } ^3\text{He})$	71,91	72,3		73,8
$(p\mu \text{ } ^4\text{He})$	74,36	75,4		73,0
$(d\mu \text{ } ^4\text{He})$	77,96	78,4		76,0
$(t\mu \text{ } ^4\text{He})$	80,76	81,3		79,0

Таблица 12. Абсолютные значения энергии связи систем (H $\mu$  Li) и (H $\mu$  Be) (в эВ)

Система	Энергия связи		
	[59]	[58]	ОП
( $\rho\mu$ ${}^6\text{Li}$ )	24,3	17,6	24,1
( $d\mu$ ${}^6\text{Li}$ )	23,8	18,5	27,0
( $t\mu$ ${}^6\text{Li}$ )	35,3	19,8	33,0
( $\rho\mu$ ${}^7\text{Li}$ )	20,8	21,0	20,0
( $d\mu$ ${}^7\text{Li}$ )	25,9	22,0	23,0
( $t\mu$ ${}^7\text{Li}$ )	37,5	23,3	29,0
( $\rho\mu$ ${}^7\text{Be}$ )	11,7		9,0
( $d\mu$ ${}^7\text{Be}$ )	29,3		14,0
( $t\mu$ ${}^7\text{Be}$ )			17,0

$$c_j = \frac{\lambda}{m_j}, \quad c = c_H + c_N, \quad j = H, N,$$

$Z$  — электрический заряд легкого ядра.

При вычислении использованы следующие значения масс частиц:

$$m_\mu = 206,77m_e, \quad m_p = 1836,15m_e, \quad m_d = 3670,48m_e, \quad m_t = 5496,9m_e,$$

$$m_{3\text{He}} = 5495,92815m_e, \quad m_{4\text{He}} = 7294,3561m_e, \quad m_{6\text{Li}} = 10961,91216m_e,$$

$$m_{7\text{Li}} = 12786,40853m_e, \quad m_{7\text{Be}} = 12787,17851m_e.$$

Результаты вычислений представлены в табл.10.

В табл.11 представлены абсолютные значения энергии связи (в эВ) мезомолекулы изотопа гелия, полученные в работах ([55,56]), и наш результат. В табл.12 представлены абсолютные значения энергии связи (в эВ) мезомолекул (H $\mu$   ${}^6\text{Li}$ ), (H $\mu$   ${}^7\text{Li}$ ) и (H $\mu$   ${}^7\text{Be}$ ).

**7.7. Стабильность мезомолекул легких ядер.** Рассмотрим систему (H $\mu$   $N_Z$ ), где  $N_Z$  обозначено ядро с зарядом  $Z$  и массой

$$m_N = 2Z m_p, \quad (7.28)$$



здесь  $m_p$  — масса протона. Для этой системы энергетический параметр  $U$  есть функция заряда ядра  $Z$ . При этом энергия связи системы ( $\text{H}\mu N_Z$ ) определяется как функция от  $Z$ . Полученные результаты представлены на рис.2.

Критическое значение величины  $Z_{\text{cr}}$  определяется из уравнения

$$E_{\text{bin}}(Z_{\text{cr}}) = 0. \quad (7.29)$$

На рис.2 показано, что критические значения заряда  $Z_{\text{cr}}$  для мезомолекул ( $\rho\mu N_Z$ ), ( $d\mu N_Z$ ) и ( $t\mu N_Z$ ) различны и находятся в интервале

$$5,5 < Z_{\text{cr}} < 7,3.$$

Верхняя и нижняя оценки критического значения  $Z$  являются качественными. В принципе метод осцилляторного представления позволяет улучшить точность вычислений, с учетом высших поправок теории возмущений.

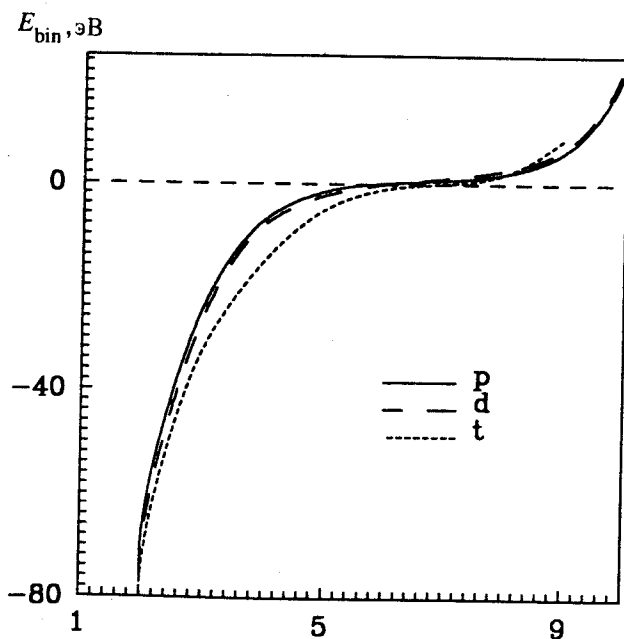


Рис.2. Зависимость энергий связи мезомолекул легких ядер ( $\text{H}\mu N$ ) от заряда ядра

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Landau L.D., Lifschitz E.M. — Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory. Pergamon, Oxford, 1977.
2. Блохинцев Д.И. — Квантовая механика. М.: Атомиздат, 1981.
3. Messiah A. — Quantum Mechanics. John Wiley and Sons Inc., New York, 1961.
4. Fröman N., Fröman P.O. — JWKB Approximation. North Holland, Amsterdam, 1965.
5. Mlodinow L., Papanicolaou N. — Ann. Phys. N.Y., 1980, vol.128, p.314; **Bander C., Mlodinow L., Papanicolaou N.** — Phys. Rev., 1983, vol.A25, p.1305; **Ader J.** — Phys. Lett., 1983, vol.97A, p.178; **Yaffe L.** — Rev. Mod. Phys., 1982, vol.54, p.497; **Witten E.** — Nucl. Phys., 1979, vol.B160, p.57.
6. Sukhatme U., Imbo T. — Phys. Rev., 1983, vol.D28, p.418; **Imbo T., Pagnamenta A., Sukhatme U.** — Phys. Rev., 1984, vol.D29, p.418.
7. Efimov G.V. — Preprint IC/91/31, Miramare-Trieste, 1991; Preprint IC/90/23. Miramare-Trieste, 1990.
8. Dineykhаn M., Efimov G.V. — Few-Body Systems, 1994, vol.16, p.59; ЯФ, 1994, т.57, с.220.
9. Schrödinger E. Proc. R. Irish Acad., 1941, vol.46, p.183.
10. Kustaanheimo P., Stiefel E. — J. Reine Angew. Math., 1965, vol.218, p.204.
11. Caswell W.E. — Ann. Phys., 1979, vol.123, p.153; **Feranchuk I.D., Komarov L.I.** — Phys. Lett., 1982, vol.A88, p.211.
12. Duru I.H., Kleinert H. — Fortsch. der Phys., 1982, vol.30, p.401.
13. Mlodinow L.D., Papanicolaou N. — Ann. Phys., 1981, vol.131, p.1; **Сергеев А.В.** — ЯФ, 1989, т.50, с.945.
14. Johnson R. — J. Math. Phys., 1980, vol.21, p.2640; **Papp E.** — Phys. Rev., 1988, vol.A38, p.5910.
15. Hioe F.T., Don Mae Millen, Montrall E.W. — Phys. Rep., 1978, vol.C43, p.307.
16. Bender C.M., Wu T.T. — Phys. Rev., 1969, vol.184, p.1231; Phys. Rev., 1973, vol.D7, p.1620.
17. Stevenson P.M. — Nucl. Phys., 1984, vol.B231, p.65.
18. Seetharaman M., Raghavan S., Vason S. — J. Phys. 1982, vol. A15, p.1537; J. Phys., 1984, vol.A17, p.2493; J. Phys., 1985, vol.A18, p.1041.
19. Юкалов В.И. — ТМФ, 1976, т.28, с.652; **Killingbeck J.** — J. Phys., 1981, vol.A14, p.1005.
20. Stevenson P.M. — Phys. Rev., 1981, vol.D23, p.2916.
21. Koudinov A.V., Smondyrev M.A. — Czech. J. Phys., 1982, vol.32, p.556; ТМФ, 1982, т.56, с.357.
22. Dineykhаn M., Efimov G.V. — Preprint JINR, E4-94-75, Dubna, 1994.
23. Banerjee K. et al. — Proc. Roy. Soc., London, 1978, vol.360, p.575.
24. Quigg C., Rosner J. — Phys. Rep., 1979, vol.56, p.206; **Richardson J., Blankenbecler R.** — Phys. Rev., 1979, vol.D19, p.469; **Dumont-Le Page M. et al.** — J. Phys., 1980, vol.A13, p.1243.
25. Динейхан М., Ефимов Г.В. — ЯФ, 1993, т.56, с.89.

26. **Harris M.** — Phys. Rev., 1962, vol.125, p.1131; **Iafate G.J., Mendelsohn L.B.** — Phys. Rev., 1969, vol.182, p.244; **de Mayer H. et al.** — J. Phys., 1985, vol.A18, p.L849.
27. **Rogerc F.J. et al.** — Phys. Rev., 1970, vol.A1, p.1577.
28. **Belyaev V.B., Kartavtsev O.I.** — J. Comput. Phys., 1985, vol.59, p.493.
29. **Gerry C.C., Laub J.** — Phys. Rev., 1984, vol.A20, p.1229; **Lam C.S., Varshni Y.P.** — Phys. Rev., 1972, vol.A6, p.139; **Becher A.** — Ann. Phys., 1977, vol.108, p.49; **Dutt R. et al.** — J. Phys., 1985, vol.A18, p.1379; **Sever R., Tezcan C.** — Phys. Rev., 1987, vol.A36, p.1045.
30. **Basdevant J.L., Boukraa S.** — Z. Phys., 1985, vol.C28, p.413; **Goldfrey S.** — Phys. Rev., 1985, vol.D31, p.2375.
31. **Eichten E., Feinberg F.** — Phys. Rev., 1981, vol.D23, p.2724; **Sebastian J.** — Phys. Rev., 1982, vol.D26, p.2295.
32. **Martin A.** — Z. Phys., 1986, vol.C32, p.359.
33. **Gupta S.N. et al.** — Phys. Rev., 1982, vol.D26, p.3305; **Goldfrey S., Isgur N.** — Phys. Rev., 1983, vol.D32, p.189; **Golangelo P., Nardulli G., Pietroni M.** — Preprint, BARI TH/90-70; Phys. Lett., 1989, vol.B220, p.265.
34. **Фок В.А.** — Изв. АН СССР, сер. физич., 1954, т.18, с.161 (Norsk. Vidensk. Selsk. Forh., 1958, vol.31, p.138).
35. **Беляев В.Б. и др.** — ЖЭТФ, 1959, т.37, с.1652 (Sov. J. JETP, 1960, vol.37, p.1171); **Масек J.** — J. Phys., 1968, vol.B1, p.831; **Vinitzky S.I., Ponomarev L.I.** — ЭЧАЯ, 1982, т.13, с.1336; Few-Body Problems in Physics. Ed. H.W.Fearing, North-Holland Publishing Co., 1990; **Gusev V.V. et al.** — Few-Body Systems, 1990, vol.9, p.137.
36. **Kohn W.** — Phys. Rev., 1947, vol.71, p.902; **Bishop D., Cheung L.** — Phys. Rev., 1977, vol.16, p.640; **Alexander S.A., Monkhorst H.J.** — Phys. Rev., 1988, vol.38, p.26.
37. **Bhatia A.K., Drachman R.J.** — Phys. Rev., 1984, vol.A30, p.2138; **Hu C.Y.** — Phys. Rev., 1985, vol.A32, p.1245.
38. **Фролов А.М., Эфрос В.Д.** — Письма в ЖЭТФ, 1984, т.39, с.449; JETP Lett., 1984, vol.39, p.545; J. Phys., 1985, vol.B18, p.265; **Фролов А.М.** — ЯФ, 1986, т.44, с.1367 (Sov. J. Nucl. Phys., 1986, vol.44, p.88).
39. **Halpern A.** — Phys. Rev. Lett., 1964, vol.13, p.660; **Виницкий С.И. и др.** — ЖЭТФ, 1986, т.64, с.417; Phys. Lett., 1987, vol.B196, p.272.
40. **Martin A. et al.** — Phys. Rev., 1992, vol.A46, p.3697; **Martin A.** — Preprint CERN-TH 6376/92, Geneve, 1992.
41. **Thirring W.** — A Course in Mathematical Physics, vol.3, Springer-Verlag, 1981.
42. **Bhatia A.K., Drachman R.J.** — Phys. Rev., 1989, vol.A35, p.4051; **Papovic Z.S., Vukajlovic F.R.** — Phys. Rev., 1987, vol.A36, p.1936.
43. **Poshusta R.D.** — J. Phys., 1985, vol.B18, p.1887.
44. **Rotenberg M., Stein J.** — Phys. Rev., 1969, vol.182, p.1.
45. **Armour E.A.G., Schrader D.M.** — Can. J. Phys., 1982, vol.60, p.581.
46. **Glaser V. et al.** — In: Mathematical Problems in Theoretical Physics, Proc. Int. Conf. Math. Phys., Lausanne, 1979, ed. K.Osterwalder (Lectures Notes in Physics, vol.116, Springer-Verlag, Berlin, 1980).

47. **Cohen S., Hiskes J.R., Riddell R.J.** — Phys. Rev., 1960, vol.119, p.1025; **Wind H., Chem J.** — Phys., 1965, vol.42, p.2371; 1965, vol.43, p.2956; **Kolos W.** — Acta Phys. Acad. Sci. Hung., 1969, vol.27, p.241; **Beckel C.L., Hausen B.D., Peek J.M.** — J. Chem. Phys., 1970, vol.53, p.3681; **Struensee M.C., Cohen J.S., Pack R.T.** — Phys. Rev., 1986, vol.A34, p.3605; **Fonseca A.C., Pena A.** — Phys. Rev., 1988, vol.A38, p.4967.
48. **Mills A.P.** — Phys. Rev. Lett., 1981, vol.46, p.717.
49. **Hill R.N.** — J. Math. Phys., 1977, vol.18, p.2316.
50. **Wightman A.S.** — Thesis, Princeton University, 1949.
51. **Gershtein S.S., Ponomarev L.I.** — In: Muon Physics. Hughes V., Wu C.S. (eds.), vol.3, p.141, N.Y. (1975).
52. **Аристов Ю.А. и др.** — ЯФ, 1981, т.33, с.1066.
53. **Matsuzaki I., Ishida K., Nagamine K. et al.** — Muon Catalyzed Fusion, 1988, vol.2, p.217.
54. **Von Arb H.P. et al.** — Muon Catalyzed Fusion, 1989, vol.4, p.61.
55. **Gershtein S.S., Gusev V.V.** — Preprint IHEP 92-129, Protvino, 1992.
56. **Kravtsov A.V., Mikhailov A.I., Savichev V.I.** — Preprint №1819, St. Petersburg, 1992.
57. **Niinikoski T.O.** — Progress in Polarized Targets in High-Energy Physics with Polarized Beams and Polarized Targets. Joseph C., Soffer J. (eds.) 1981, p.191. Basal Birhäuser.
58. **Kravtsov A.V., Popov N.P., Solyakin G.E.** — Sov. J. Nucl. Phys., 1982, vol.35, p.876.
59. **Belyaev V.B. et al.** — Few-Body Systems, 1992, Suppl.6, p.332.
60. **Dineykhon M., Efimov G.V.** — Mod. Phys. Lett. A, 1994, vol.9, p.2083.
61. **Hara S., Ishihara T.** — Phys. Rev., 1989, vol.A39, p.5633.