

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ H_2^+ , D_2^+ И T_2^+ С УЧЕТОМ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ПОПРАВOK

М. Динейхан, С. А. Жаугашева, А. К. Бекбаев, И. С. Ишмухамедов

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна,

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алма-Ата, Казахстан

Предложены методы аналитического вычисления энергетического спектра кулоновской трехтельной системы на основе определения асимптотического поведения корреляционных функций соответствующих полевых токов с необходимыми квантовыми числами. Наши результаты показали, что введенные нами конститuentные массы частиц, определяемые как массы частиц в связанном состоянии, отличаются от масс частиц в свободном состоянии. Отношение конститuentной массы частицы к массе частицы в свободном состоянии для электрона оказалось большим по сравнению с этими же отношениями для протона, дейтрона и тритона. Нами было установлено, что конститuentная масса электрона имеет различные значения в молекулярных ионах различных изотопов водорода. При определении энергетического спектра трехтельной кулоновской системы были учтены вклады обменной диаграммы, а также диаграммы собственной энергии. Наши результаты показали, что вклад диаграммы собственной энергии обратно пропорционален квадрату конститuentной массы частицы. Для электрона этот вклад является существенным, а для протона, дейтрона и тритона — ничтожно малым. Для определения уровня энергии и соответствующей волновой функции (ВФ) трехтельной кулоновской системы необходим учет вкладов как обменной диаграммы, так и диаграммы собственной энергии.

On the basis of determination of the asymptotic behavior of correlation functions of the corresponding field currents with the corresponding quantum numbers, an analytic method for determination of the energy spectrum of three-body Coulomb system is suggested. Our results show that the constituent masses of particles, which we have defined as masses of particles in a bound state, differ from masses of particles in a free state. The constituent mass to the free state mass relation for the electron is greater than the same mass relation for the proton, deuteron and triton. It was also found that this constituent electron mass had different values in each systems, i.e., in H_2^+ , D_2^+ and T_2^+ hydrogen molecular ions. The contributions of exchange and self-energy diagrams were taken into account in the determination of the energy spectrum of the three-body Coulomb system. Our results show that the self-energy diagram contribution is inversely proportional to the square of the constituent mass of particles; therefore, this contribution is sufficient for the electron and is negligible for the proton, deuteron and triton. When defining the energy and the wave function (WF), it is necessary to take into account the contributions of both the exchange and self-energy diagrams.

PACS: 03.65.Pm; 03.65.Db

ВВЕДЕНИЕ

Энергетический спектр связанного состояния может быть определен с хорошей точностью в рамках нерелятивистской квантовой механики (НКМ) при надлежащем подборе потенциала взаимодействия. Однако нерелятивистское уравнение Шредингера (УШ), дающее математически корректное описание связанных состояний, уже не является достаточным, так как требуется учет релятивистского характера взаимодействия, поскольку для

описания современных экспериментальных результатов, полученных как в атомной [1], так и в адронной физике [2], требуется учет релятивистских поправок. Тем не менее нерелятивистское УШ является надежным инструментом исследования и определения энергетического спектра связанных состояний. При этом реальные релятивистские поправки малы, так что теоретическая задача сводится к получению релятивистских поправок к нерелятивистскому потенциалу взаимодействия исходя из формализма квантовой теории поля (КТП). Эта идея лежит в основе потенциала Брейта [3] и эффективной нерелятивистской квантовой теории поля Касвелла и Лепажя [4]. Оба эти подхода используют матрицу рассеяния как источник искомым поправок. Авторами работы [4] в рамках квантовой электродинамики (КЭД), с учетом перенормировки и последующим переходом к нерелятивистскому пределу, изучена матрица рассеяния с соответствующими диаграммами Фейнмана, т. е. определен потенциал взаимодействия с релятивистской поправкой. В результате сформулирован метод нерелятивистской КЭД (НКЭД) для определения энергетического спектра с релятивистской поправкой. В дальнейшем этот метод усовершенствован в работе [5]. В настоящий момент свойства и спектр кулоновского двухтельного связанного состояния с учетом релятивистской поправки определяются в рамках НКЭД [1]. В этом подходе ограничиваются только низшим порядком разложения по теории возмущения, а высшие порядки рассматриваются как малые поправки.

В этом направлении существует еще один подход [6–8], основанный на следующей идее. Точные решения для квантово-полевых функций Грина можно формально представить в виде функциональных интегралов. Техника вычислений этих функциональных интегралов в настоящее время находится еще в зачаточном состоянии, однако имеющиеся представления можно использовать для получения решения нерелятивистского УШ в форме функционального интеграла Фейнмана [9] с потенциалом, содержащим необходимые релятивистские поправки. В этой области еще не так много работ. Наши исследования продолжают эти усилия.

В нашем подходе [8] масса связанного состояния определяется асимптотическим поведением корреляционной функции от соответствующих токов с необходимыми квантовыми числами. Корреляционная функция представляется в форме функционального интеграла, что позволяет выделить необходимую асимптотику. При определении асимптотического поведения корреляционной функции используется представление в форме функционального интеграла, так что усреднение по внешнему калибровочному полю может быть выполнено точно. Полученное представление похоже на фейнмановский функциональный интеграл по путям [9] в нерелятивистской квантовой механике. При этом нелокальный функционал (потенциал) взаимодействия, возникающий в результате обмена калибровочного поля (фотон), определяется диаграммой Фейнмана и содержит вклады как в собственную энергию частиц, так и в формирование связанного состояния. Таким образом, потенциал взаимодействия определяется вкладом всевозможных типов диаграмм Фейнмана. В рамках данного подхода будем определять энергетический спектр кулоновской трехтельной системы.

Работа построена следующим образом. В разд. 1 кратко изложены основные детали определения массового спектра связанного состояния; в разд. 2 вычислен энергетический спектр трехтельной кулоновской системы с учетом однофотонного обмена; в разд. 3 определены вклады диаграммы собственной энергии; в разд. 4 вычислены энергии основного состояния молекулярных ионов водорода; в разд. 5 подытожены полученные результаты. В приложениях приведены некоторые детали вычисления.

1. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ФУНКЦИОНАЛЬНОМ ПОДХОДЕ

Теперь коротко изложим детали нашего подхода. Пусть $J(x) = \Phi^+(x)\Phi(x)$ — ток скалярных заряженных частиц. Если пренебречь аннигиляционным каналом, то тогда рассматриваемые корреляторы удобно представить как усреднение по калибровочному полю $A_\alpha(x)$ произведений функций Грина $G_m(x, y|A)$ скалярных частиц во внешнем калибровочном поле:

$$\Pi(x - y) = \langle G_{m_1}(x, y|A)G_{m_2}(y, x|A)G_{m_3}(x, y|A) \rangle_A. \quad (1.1)$$

Функция Грина $G_m(x, y|A)$ для скалярной частицы во внешнем калибровочном поле определяется уравнением

$$\left[\left(i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + \frac{g}{\hbar c} A_\alpha(x) \right)^2 + \frac{c^2 m^2}{\hbar^2} \right] G_m(x, y|A) = \delta(x - y). \quad (1.2)$$

Решение уравнения (1.2) представляется в виде функционального интеграла (детали см. в [10]):

$$G_m(x, y|A) = \int_0^\infty \frac{ds}{(4s\pi)^2} \exp \left\{ -sm^2 - \frac{(x-y)^2}{4s} \right\} \int d\sigma_\beta \exp \left\{ ig \int_0^1 d\xi \frac{\partial Z_\alpha(\xi)}{\partial \xi} A_\alpha(\xi) \right\}. \quad (1.3)$$

Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned} Z_\alpha(\xi) &= (x-y)_\alpha \xi + y_\alpha - 2\sqrt{s} B_\alpha(\xi), \\ d\sigma_\beta &= N \delta B_\beta \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^1 d\xi \dot{B}^2(\xi) \right\}, \end{aligned} \quad (1.4)$$

с нормировкой

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

где N — константа нормировки. При усреднении по внешнему калибровочному полю $A_\alpha(x)$ ограничиваемся только низшим порядком, т. е. учитываем только двухточечный гауссов коррелятор:

$$\left\langle \exp \left\{ i \int dx A_\alpha(x) J_\alpha(x) \right\} \right\rangle_A = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \iint dx dy J_\alpha(x) D_{\alpha\beta}(x-y) J_\beta(y) \right\}. \quad (1.5)$$

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

$$D_{\alpha\beta}(x-y) = \langle A_\alpha(x) A_\beta(y) \rangle_A = \delta_{\alpha,\beta} D(x-y) + \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} D_d(x-y), \quad (1.6)$$

где

$$D(x) = \int \frac{dq}{(2\pi)^4} \frac{e^{iqx}}{q^2}, \quad D_d(x) = \int \frac{dq}{(2\pi)^4} \frac{e^{iqx}}{q^2} \frac{d(q^2)}{q^2}. \quad (1.7)$$

Масса связанного состояния определяется как предел:

$$M = - \lim_{|x-y| \rightarrow \infty} \frac{\ln \Pi(x-y)}{|x-y|}. \quad (1.8)$$

Таким образом, для определения массы M нам нужно вычислить корреляционную функцию $\Pi(x)$ в асимптотике при $|x| \rightarrow \infty$.

Подставляя (1.3) в (1.1) и проводя усреднение по внешнему калибровочному полю, получаем

$$\begin{aligned} \Pi(x) = & \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{d\mu_1 d\mu_2 d\mu_3}{(8\pi^2 x)^3} J(\mu_1, \mu_2, \mu_3) \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{|x|}{2} \left(\frac{m_1^2}{\mu_1} + \mu_1 \right) - \frac{|x|}{2} \left(\frac{m_2^2}{\mu_2} + \mu_2 \right) - \frac{|x|}{2} \left(\frac{m_3^2}{\mu_3} + \mu_3 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Здесь

$$\begin{aligned} J(\mu_1, \mu_2, \mu_3) = & N_1 N_2 N_3 \iiint \delta r_1 \delta r_2 \delta r_3 \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^x d\tau [\mu_1 \dot{r}_1^2(\tau) + \mu_2 \dot{r}_2^2(\tau) + \mu_3 \dot{r}_3^2(\tau)] \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ -W_{1,1} - W_{2,2} - W_{3,3} + 2 \sum_{i,j=1; i \neq j}^3 W_{i,j} \right\}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

и использованы следующие обозначения:

$$W_{i,j} = \frac{g^2}{2} (-1)^{i+j} \int_0^x \int_0^x d\tau_1 d\tau_2 Z'^{(i)}_{\alpha}(\tau_1) D_{\alpha\beta} \left(Z^{(i)}(\tau_1) - Z^{(j)}(\tau_2) \right) Z'^{(j)}_{\beta}(\tau_2). \quad (1.11)$$

Представление (1.10) имеет смысл квантовой функции Грина в форме функционального интеграла Фейнмана, когда три частицы с массами μ_1, μ_2 и μ_3 взаимодействуют посредством нелокального потенциала $W_{i,j}$. Отметим, что в (1.10) функциональное интегрирование проводится по четырехмерным векторам $r_1 = (\mathbf{r}_1, r_1^{(4)})$, $r_2 = (\mathbf{r}_2, r_2^{(4)})$ и $r_3 = (\mathbf{r}_3, r_3^{(4)})$. При этом величина $W_{i,j}$ определяется вкладом всевозможных типов диаграмм Фейнмана. Существуют два типа взаимодействий: первый — взаимодействие частиц посредством калибровочного поля, вклад которого определяется непосредственно $W_{i,j}$ ($i \neq j$); второй — взаимодействие частиц самих с собой, т. е. диаграмма собственной энергии, вклад которой определяется $W_{1,1}$, $W_{2,2}$ и $W_{3,3}$. В нерелятивистском пределе величины $W_{i,j}$ соответствуют потенциальным взаимодействиям, а $W_{j,j}$ соответствуют непотенциальным взаимодействиям, которые определяют вклад перенормировки массы частиц.

Асимптотика интеграла (1.10) при $|x| \rightarrow \infty$ ведет себя как

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} J(\mu_1, \mu_2, \mu_3) \implies \exp \{-x \cdot E(\mu_1, \mu_2, \mu_3)\}, \quad (1.12)$$

где функция $E(\mu_1, \mu_2, \mu_3)$ зависит от константы связи g и от параметров μ_1, μ_2 и μ_3 и не зависит от масс m_1, m_2 и m_3 . При $|x| \rightarrow \infty$ интеграл (1.9) вычисляется методом перевала. Масса связанного состояния определяется точкой перевала:

$$M = \frac{1}{2} \min_{\mu_1, \mu_2, \mu_3} \left\{ \frac{m_1^2}{\mu_1} + \mu_1 + \frac{m_2^2}{\mu_2} + \mu_2 + \frac{m_3^2}{\mu_3} + \mu_3 + 2E(\mu_1, \mu_2, \mu_3) \right\}. \quad (1.13)$$

Таким образом, проблема свелась к вычислению функционального интеграла (1.10). Однако этот интеграл в общем виде не вычисляется и определяется только в рамках различных приближений. В настоящее время точные математические методы вычисления этого интеграла отсутствуют. Поэтому надо привлекать различные физические предположения или приближения, чтобы как-то выполнить интегрирование по четвертым компонентам $r_j^{(4)}$. Выполнение интегрирования по четвертым компонентам эффективно соответствует переходу к нерелятивистскому пределу. Другими словами, определяется потенциал взаимодействия с поправками, связанными с непертурбативным, релятивистским и нелокальным характерами взаимодействия. В частности, если в функционале $W_{i,j}$ в (1.11) пренебречь зависимостью от $r_1^{(4)}, r_2^{(4)}$ и $r_3^{(4)}$, то система (1.10) сводится к фейнмановскому интегралу по траекториям для движения скалярных частиц с массами μ_1, μ_2 и μ_3 в НКМ [9] с локальным потенциалом. В этом приближении, согласно (1.10), гамильтониан взаимодействия скалярных частиц с массами μ_1, μ_2 и μ_3 записывается в виде

$$H = \frac{1}{2\mu_1} \mathbf{P}_1^2 + \frac{1}{2\mu_2} \mathbf{P}_2^2 + \frac{1}{2\mu_3} \mathbf{P}_3^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (1.14)$$

где $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ — потенциал взаимодействия, который выражается через $W_{i,j}$, тогда $E(\mu_1, \mu_2, \mu_3)$ является собственным значением гамильтониана взаимодействия (1.14), т. е.

$$H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = E(\mu_1, \mu_2, \mu_3)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \quad (1.15)$$

Из условия минимума (1.13) получаем уравнение для μ_j :

$$\mu_j - \frac{m_j^2}{\mu_j} + 2\mu_j \frac{dE(\mu_1, \mu_2)}{d\mu_j} = 0, \quad j = 1, 2, 3. \quad (1.16)$$

Параметры μ_1, μ_2 и μ_3 имеют размерность массы.

Мы определяем параметры μ_1, μ_2 и μ_3 как массы конституентных частиц в связанном состоянии. Эти массы отличаются от m_1, m_2 и m_3 , которые представляют собой массы частиц в свободном состоянии. При дальнейших вычислениях мы используем приведенные массы двух- и трехтельных систем

$$\frac{1}{M_2} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}, \quad \frac{1}{M_3} = \frac{1}{\mu_1 + \mu_2} + \frac{1}{\mu_3}. \quad (1.17)$$

Тогда для двухтельной системы мы получаем

$$M = \mu_1 + \mu_2 + M_2 \frac{dE}{dM_2} + E(M_2), \quad (1.18)$$

$$\mu_1 = \sqrt{m_1^2 - 2M_2^2 \frac{dE}{dM_2}}, \quad \mu_2 = \sqrt{m_2^2 - 2M_2^2 \frac{dE}{dM_2}}, \quad \frac{1}{M_2} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2},$$

а для системы из трех тел имеем

$$\begin{aligned}
 M &= \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + M_2 \frac{dE}{dM_2} + M_3 \frac{dE}{dM_3} + E(M_2, M_3), \\
 \mu_3 &= \sqrt{m_3^2 - 2M_3^2 \frac{dE}{dM_3}}, \\
 \mu_j &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{m_j^2 - 2M_2^2 \frac{dE}{dM_2}} \times \\
 &\quad \times \sqrt{1 + \sqrt{1 - \frac{8M_2^2 M_3^2 (dE/dM_3)}{(m_1^2 - 2M_2^2 (dE/dM_2))(m_2^2 - 2M_2^2 (dE/dM_2))}}}, \quad j = 1, 2, \quad (1.19) \\
 \frac{1}{M_2} &= \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}, \quad \frac{1}{M_3} = \frac{1}{\mu_1 + \mu_2} + \frac{1}{\mu_3}.
 \end{aligned}$$

Таким образом, мы можем определять массу и конституентную массу систем связанных состояний с учетом релятивистских поправок. Величина $E(M_2, M_3)$ определяется как собственное значение гамильтониана взаимодействия.

В нашем подходе взаимодействия между частицами в связанном состоянии описываются выражением (1.11), которое содержит все типы фейнмановских диаграмм, в частности, выражения W_{11}, W_{22}, W_{33} соответствуют диаграммам собственной энергии, а W_{ij} ($i \neq j$) — диаграмме однофотонного обмена в КЭД. Энергетический спектр и соответствующие волновые функции (ВФ) определяются из УШ с конституентной массой μ_j . Поправка, связанная с релятивистской природой взаимодействия, учитывается не только поправками к потенциалу взаимодействия, но также через параметры μ_j (конституентные массы), которые представлены в (1.16) и (1.19). Поэтому из УШ с конституентной массой будем определять спектр связанного состояния с релятивистской поправкой.

2. ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ТРЕХТЕЛЬНОЙ КУЛОНОВСКОЙ СИСТЕМЫ

В рамках нашего подхода мы рассмотрели двухтельные кулоновские системы [6, 7] и определили энергетический спектр и ВФ с учетом релятивистских поправок. Теперь определим энергетический спектр кулоновской трехтельной системы с зарядами $Z_1 e, Z_2 e$ и $-Z_3 e$ в рамках нашего подхода. Мы используем атомную систему единиц ($m_e = \hbar = e = 1$). Тогда соответствующее УШ записывается в виде

$$\left\{ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{\mathbf{P}_j^2}{\mu_j} + \frac{Z_1 Z_2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{Z_1 Z_3}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_3|} - \frac{Z_3 Z_2}{|\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_2|} \right\} \Psi = E \Psi. \quad (2.1)$$

Вводим координаты Якоби $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и центра масс \mathbf{x}

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R}_1 &= \mathbf{x} + \frac{\mu_3}{M} \mathbf{r}_1 + \frac{\mu_2}{M} \mathbf{r}_2, \\
 \mathbf{R}_2 &= \mathbf{x} + \frac{\mu_3}{M} \mathbf{r}_1 - \frac{\mu_1 + \mu_2}{M} \mathbf{r}_2, \\
 \mathbf{R}_3 &= \mathbf{x} - \frac{\mu_3 + \mu_2}{M} \mathbf{r}_1 + \frac{\mu_2}{M} \mathbf{r}_2,
 \end{aligned} \quad (2.2)$$

где $M = \mu_1 + \mu_2 + \mu_3$. В итоге, УШ представляется в виде

$$\left\{ -\frac{1}{2\mu_{13}} \nabla_{r_1}^2 - \frac{1}{2\mu_{12}} \nabla_{r_2}^2 - \frac{1}{\mu_1} (\nabla_{r_1} \nabla_{r_2}) + \frac{Z_1 Z_2}{r_{12}} - \frac{Z_1 Z_3}{r_1} - \frac{Z_3 Z_2}{r_2} \right\} \Psi = E\Psi, \quad (2.3)$$

где опущена полная кинетическая энергия и использованы следующие обозначения:

$$\frac{1}{\mu_{ij}} = \frac{1}{\mu_i} + \frac{1}{\mu_j} \quad (i \neq j), \quad r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|. \quad (2.4)$$

Из (2.3) будем определять уровни энергии и ВФ с помощью метода осцилляторного представления (ОП) [11]. Методы ОП широко применялись при определении энергетического спектра и ВФ двухтельных систем. В частности, ВФ в таких системах выбирались в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = r^\ell Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \psi(r), \quad (2.5)$$

где $\psi(r)$ — радиальная часть ВФ. Аналогично этому в трехтельном случае ВФ представим следующим образом:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = r_1^{\ell_1} r_2^{\ell_2} Y_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi(r_1, r_2, r_{12}). \quad (2.6)$$

Здесь $\psi(r_1, r_2, r_{12})$ есть радиальная часть ВФ, зависящая от координат Хиллерааса (r_1, r_2, r_{12}) [12], и использованы следующие обозначения:

$$Y_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \{Y_{\ell_1}(\mathbf{r}_1) \otimes Y_{\ell_2}(\mathbf{r}_2)\}_{LM} \quad (2.7)$$

— биполярные гармоники [13] и

$$\mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = r_1^{\ell_1} r_2^{\ell_2} Y_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (2.8)$$

— регулярные биполярные гармоники. Действие некоторых операторов на регулярные биполярные гармоники показано в приложении А. В (2.3) мы учитывали потенциалы, соответствующие только обменным взаимодействиям. В данной работе рассчитывается энергия связи и соответствующая ВФ основного состояния кулоновской трехтельной системы. В этом случае кинетическая часть гамильтониана представлена в (А.6).

Из (А.6)–(А.8) видно, что действие оператора кинетической энергии на ВФ выражается различными биполярными гармониками. Для получения радиального УШ из (2.3) это уравнение умножается слева на биполярную гармонику, а затем интегрируется по угловым переменным. Детали вычислений интегралов по угловым переменным приведены в приложении Б.

Применяемый здесь метод ОП [11] основан на идеях и техниках КТП. Одно из существенных отличий КТП от КМ заключается в том, что квантованные поля, представляющие набор бесконечного числа осцилляторов для основного состояния (или вакуума), сохраняют свою осцилляторную природу при квантово-полевым взаимодействии. В КМ поведение собственных функций большинства потенциалов отличается от гауссова поведения осцилляторной волновой функции. Поэтому переменные в исходном УШ должны быть преобразованы таким образом, чтобы модифицированное УШ обладало решениями, имеющими осцилляторное поведение на больших расстояниях. Согласно вышесказанному осуществим преобразование переменных в следующем виде (детали см. в [11, 14]):

$$r_1 = q_1^{2\rho}, \quad r_2 = q_2^{2\rho}, \quad r_{12} = q_{12}^{2\rho}. \quad (2.9)$$

После некоторых стандартных упрощений для кинетической части гамильтониана мы получим

$$\begin{aligned}
 \widehat{T}_q = & \frac{1}{2\mu_{13}} \frac{1}{4\rho^2 q_1^{2(2\rho-1)}} \left[- \left(\frac{\partial^2}{\partial q_1^2} + \frac{d-1}{q_1} \frac{\partial}{\partial q_1} \right) - \frac{2\rho(\ell_1 - \ell_2)}{q_1} \frac{\partial}{\partial q_1} \right] + \\
 & + \frac{1}{2\mu_{23}} \frac{1}{4\rho^2 q_2^{2(2\rho-1)}} \left[- \left(\frac{\partial^2}{\partial q_2^2} + \frac{d-1}{q_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right) - \frac{2\rho(\ell_2 - \ell_1)}{q_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right] + \\
 & + \frac{1}{2\mu_{12}} \frac{1}{4\rho^2 q_{12}^{2(2\rho-1)}} \left[- \left(\frac{\partial^2}{\partial q_{12}^2} + \frac{d-1}{q_{12}} \frac{\partial}{\partial q_{12}} \right) + \frac{2\rho(\ell_1 + \ell_2)}{q_{12}} \frac{\partial}{\partial q_{12}} \right] - \\
 & - \frac{1}{2\mu_3} \frac{q_1^{4\rho} + q_2^{4\rho} - q_{12}^{4\rho}}{4\rho^2 q_1^{2(2\rho-1)} q_2^{2(2\rho-1)}} \frac{1}{q_1} \frac{\partial}{\partial q_1} \frac{1}{q_2} \frac{\partial}{\partial q_2} - \frac{1}{2\mu_2} \frac{q_2^{4\rho} + q_{12}^{4\rho} - q_1^{4\rho}}{4\rho^2 q_{12}^{2(2\rho-1)} q_2^{2(2\rho-1)}} \times \\
 & \times \frac{1}{q_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \frac{1}{q_{12}} \frac{\partial}{\partial q_{12}} - \frac{1}{2\mu_1} \frac{q_1^{4\rho} + q_{12}^{4\rho} - q_2^{4\rho}}{4\rho^2 q_1^{2(2\rho-1)} q_{12}^{2(2\rho-1)}} \frac{1}{q_1} \frac{\partial}{\partial q_1} \frac{1}{q_{12}} \frac{\partial}{\partial q_{12}} - \\
 & - \left(\frac{\ell_1}{\mu_1} + \frac{\ell_2}{\mu_2} \right) \frac{1}{2\rho} \frac{1}{q_{12}^{2(2\rho-1)}} \frac{1}{q_{12}} \frac{\partial}{\partial q_{12}}, \quad (2.10)
 \end{aligned}$$

и потенциальная часть имеет вид

$$V = \frac{Z_1 Z_2}{q_{12}^{2\rho}} - \frac{Z_1 Z_3}{q_1^{2\rho}} - \frac{Z_2 Z_3}{q_2^{2\rho}}. \quad (2.11)$$

Здесь d есть размерность вспомогательного пространства $d = 2 + 2\rho + 2\rho(\ell_1 + \ell_2)$. В методе ОП канонические переменные выражаются через операторы рождения (a^+) и уничтожения (a) в пространстве R^d , и по ним проводится упорядочение. Таким образом, для гамильтониана мы имеем

$$H = H_0 + \varepsilon_0(E) + H_I. \quad (2.12)$$

Здесь H_0 — есть гамильтониан свободного осциллятора; ε_0 — энергия основного состояния в нулевом приближении ОП и H_I есть гамильтониан взаимодействия, который также представляется в нормальном виде по операторам (a^+) и (a) и не содержит квадратичных слагаемых по каноническим переменным. Представление гамильтониана в виде (2.12) детально изложено в работах [6–8], поэтому приводим окончательный результат для энергетического спектра в нулевом приближении ОП:

$$\begin{aligned}
 E = & \frac{\sigma_1^2}{\mu_{13}} \frac{\Gamma(d/2)}{4\rho^2} \frac{[d/4 + \rho(\ell_1 - \ell_2)]}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} + \frac{\sigma_2^2}{\mu_{23}} \frac{\Gamma(d/2)}{4\rho^2} \frac{[d/4 + \rho(\ell_2 - \ell_1)]}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} + \\
 & + \frac{\sigma_{12}^2}{\mu_{12}} \frac{\Gamma(d/2)}{4\rho^2} \frac{[d/4 - \rho(\ell_1 + \ell_2)]}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} - \frac{\Gamma(d/2 + \rho - 1)}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} [Z_1 Z_3 \sigma_1 + Z_2 Z_3 \sigma_2 - \\
 & - Z_1 Z_2 \sigma_{12}] + \frac{\Gamma^2(d/2) \Gamma(d/2 + 4\rho - 1)}{8\rho^2 \Gamma^3(d/2 + 2\rho - 1)} \left[\frac{\sigma_1^2}{\sigma_2^2} \frac{\sigma_{12}^2}{\mu_1} + \frac{\sigma_2^2}{\sigma_1^2} \frac{\sigma_{12}^2}{\mu_2} + \frac{\sigma_1^2}{\sigma_{12}^2} \frac{\sigma_2^2}{\mu_3} \right] - \\
 & - \frac{\Gamma(d/2) \Gamma(d/2 + 2\rho)}{8\rho^2 \Gamma^2(d/2 + 2\rho - 1)} \left[\frac{\sigma_1^2}{\mu_1} + \frac{\sigma_{12}^2}{\mu_1} + \frac{\sigma_2^2}{\mu_2} + \frac{\sigma_{12}^2}{\mu_2} + \frac{\sigma_2^2}{\mu_3} + \frac{\sigma_1^2}{\mu_3} \right]. \quad (2.13)
 \end{aligned}$$

Здесь σ_1, σ_2 и σ_{12} — параметры, связанные с частотой осциллятора и определяемые из следующей системы уравнений

$$\begin{aligned}
& \frac{\sigma_1}{\mu_{13}} \frac{\Gamma(d/2)}{2\rho^2} \frac{[d/4 + \rho(\ell_1 - \ell_2)]}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} - \frac{\Gamma(d/2)\Gamma(d/2 + 2\rho)}{4\rho^2\Gamma^2(d/2 + 2\rho - 1)} \frac{\sigma_1}{\mu_{13}} - Z_1 Z_3 \times \\
& \quad \times \frac{\Gamma(d/2 + \rho - 1)}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} + \frac{\Gamma^2(d/2)\Gamma(d/2 + 4\rho - 1)}{4\rho^2\Gamma^3(d/2 + 2\rho - 1)} \left[\frac{\sigma_1\sigma_{12}^2}{\sigma_2^2\mu_1} - \frac{\sigma_2^2\sigma_{12}^2}{\sigma_1^3\mu_2} + \frac{\sigma_1\sigma_2^2}{\sigma_{12}^2\mu_3} \right] = 0, \\
& \frac{\sigma_2}{\mu_{23}} \frac{\Gamma(d/2)}{2\rho^2} \frac{[d/4 + \rho(\ell_2 - \ell_1)]}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} - \frac{\Gamma(d/2)\Gamma(d/2 + 2\rho)}{4\rho^2\Gamma^2(d/2 + 2\rho - 1)} \frac{\sigma_2}{\mu_{23}} - Z_2 Z_3 \times \\
& \quad \times \frac{\Gamma(d/2 + \rho - 1)}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} + \frac{\Gamma^2(d/2)\Gamma(d/2 + 4\rho - 1)}{4\rho^2\Gamma^3(d/2 + 2\rho - 1)} \left[\frac{\sigma_2\sigma_{12}^2}{\sigma_1^2\mu_2} - \frac{\sigma_1^2\sigma_{12}^2}{\sigma_2^3\mu_1} + \frac{\sigma_1^2\sigma_2}{\sigma_{12}^2\mu_3} \right] = 0, \quad (2.14) \\
& \frac{\sigma_{12}}{\mu_{12}} \frac{\Gamma(d/2)}{2\rho^2} \frac{[d/4 - \rho(\ell_1 + \ell_2)]}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} - \frac{\Gamma(d/2)\Gamma(d/2 + 2\rho)}{4\rho^2\Gamma^2(d/2 + 2\rho - 1)} \frac{\sigma_{12}}{\mu_{12}} + Z_1 Z_2 \times \\
& \quad \times \frac{\Gamma(d/2 + \rho - 1)}{\Gamma(d/2 + 2\rho - 1)} + \frac{\Gamma^2(d/2)\Gamma(d/2 + 4\rho - 1)}{4\rho^2\Gamma^3(d/2 + 2\rho - 1)} \left[\frac{\sigma_2^2\sigma_{12}}{\sigma_1^2\mu_2} + \frac{\sigma_1^2\sigma_{12}}{\sigma_2^2\mu_1} - \frac{\sigma_1^2\sigma_2^2}{\sigma_{12}^3\mu_3} \right] = 0.
\end{aligned}$$

Из этой системы уравнений определяем параметры σ_1, σ_2 и σ_3 как функции от конститuentных масс. Далее, подставляя значения этих параметров в (2.13), находим зависимость энергетического спектра связанного состояния от конститuentных масс частиц. Тогда из (1.16) или (1.19) определяем конститuentную массу частиц.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВКЛАДА ДИАГРАММЫ СОБСТВЕННОЙ ЭНЕРГИИ

Теперь приступим к определению величины W_{jj} , соответствующей вкладу диаграммы собственной энергии. Вклад этой диаграммы приводит к поправке к конститuentной массе частиц в связанных состояниях. Когда заряженная частица находится в связанном состоянии, эту частицу можно рассматривать как частицу, находящуюся в кулоновском поле, созданном другими частицами. В этом случае матричный элемент диаграммы собственной энергии (в обычной системе единиц), в низшем порядке теории возмущений, записывается в стандартном [15] виде:

$$\delta M_{\text{SE}} = e^2 \int_{C_F} \frac{dw}{2i\pi} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} D_{\alpha\beta}(k^2) \left\langle \bar{\Psi} \left| \gamma^\alpha \frac{1}{\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{k}} - \mu_e} \gamma^\beta \right| \Psi \right\rangle - \langle \bar{\Psi} | \delta\mu_e | \Psi \rangle, \quad (3.1)$$

где $D_{\alpha\beta}(k^2)$ есть фотонный пропагатор; C_F — фейнмановский контур интегрирования по w (однопетлевая собственная энергия), а $\delta\mu_e$ является массовым контрчленом. В нерелятивистском пределе из (3.1) имеем

$$\begin{aligned}
\delta M_{\text{SE}} = & \left(\frac{e}{\mu_e} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\mathbf{k}|} \left\{ \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{\mathbf{k}^2} \right\} \times \\
& \times \left\langle \Psi_0 \left| \overleftarrow{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{r}\mathbf{k}} \frac{1}{E_0 - k - H_0^C} e^{-i\mathbf{r}\mathbf{k}} \overrightarrow{\mathbf{p}} \right| \Psi_0 \right\rangle - \delta\mu \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle, \quad (3.2)
\end{aligned}$$

где H_0^C есть гамильтониан электрона, связанного в кулоновском поле. Для вычисления этого интеграла, прежде всего, проведем усреднение по направлениям импульса фотона и также выделим член, связанный с перенормировкой массы. Проводя необходимые упрощения, окончательно получаем

$$\delta M_{SE} = -\frac{4\alpha(Z\alpha)}{3\mu_e^2} \left[\ln \alpha^2 + \ln \left(\frac{K_0(n, \ell)}{R_\infty} \right) - \frac{5}{6} \right] \langle \Psi | \delta(\mathbf{r}) | \Psi \rangle + \frac{\alpha(Z\alpha)}{2\pi\mu_e^2} \left\langle \Psi \left| \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{r^3} \right| \Psi \right\rangle. \quad (3.3)$$

Из (3.3) видно, что для определения δM_{SE} необходимо вычислить логарифм Бете $\ln \left(\frac{K_0(n, \ell)}{R_\infty} \right)$ [16] для трехтельной кулоновской системы, а также вычислить величину $\langle \Psi | \delta(\mathbf{r}) | \Psi \rangle$. Логарифм Бете для трехтельной кулоновской системы определен различными авторами и вычислен в [17, 18]. Мы будем использовать их результаты при конкретных расчетах.

Теперь изложим детали вычисления величины $\langle \Psi | \delta(\mathbf{r}) | \Psi \rangle$ в рамках ОП. Для этого используем тождество

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}).$$

Таким образом, наша задача сводится к вычислению $\langle \Psi | \Delta 1/r | \Psi \rangle$ в рамках ОП. Для применения метода ОП проведем замену переменных

$$r = q^{2\rho}, \quad \Psi_R \Rightarrow q^{2\rho\ell} \Phi(q^2), \quad (3.4)$$

где Ψ_R — радиальная часть ВФ. После некоторых упрощений имеем

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \delta(\mathbf{r}) | \Psi \rangle &= -\frac{1}{4\pi} \left\langle \Psi \left| \Delta \frac{1}{r} \right| \Psi \right\rangle = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left\langle \Phi \left| \frac{q^{4\rho\ell}}{4\rho^2 q^{2(2\rho-1)}} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{d-1}{q} \frac{\partial}{\partial q} \right) \frac{1}{q^{2\rho}} \right] \right| \Phi \right\rangle = \\ &= \frac{\ell}{\pi} \frac{\omega^{3\rho+2\rho\ell}}{\Gamma(3\rho+2\rho\ell)} \int_0^\infty dq q^{4\rho\ell-1} \exp(-\omega q^2) = \frac{1}{4\pi} \frac{\omega^{3\rho} \Gamma(1+2\rho\ell)}{\rho \Gamma(3\rho+2\rho\ell)}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Здесь ω — частота осциллятора, и численные значения определяются для каждого связанного состояния по отдельности.

Таким образом, можем определить поправку к конститuentной массе частиц, которая связана с диаграммой собственной энергии. Однако из (3.3) видно, что эта поправка обратно пропорциональна квадрату массы, поэтому для тяжелых частиц она не так чувствительна. Будем учитывать данную поправку только к конститuentной массе электрона.

4. РАСЧЕТ ЭНЕРГИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ВОДОРОДА

Теперь приступим к вычислениям энергий основного состояния молекулярных ионов водорода H_2^+ , D_2^+ и T_2^+ в рамках нашего подхода. Прецизионные вычисления нерелятивистских молекулярных ионов водорода были выполнены многими авторами за последнее десятилетие. Используем следующие значения масс протона, дейтрона и

тритона, которые были использованы в недавних расчетах [19], для того чтобы иметь разумное сравнение вычисленных значений масс: $m_p = 1836,152701$, $m_d = 3670,483014$, $m_t = 5496,92158$, и $m_e = 1,0$. Также приведем значения энергий основного состояния молекулярных ионов изотопов водорода, вычисленных различными авторами, [19]:

$$\begin{aligned} E(\text{H}_2^+) &= -0,597\,139\,063\,123\,405\,074\,5(4), \\ E(\text{D}_2^+) &= -0,598\,788\,784\,330\,683\,464\,4(1), \\ E(\text{T}_2^+) &= -0,599\,506\,910\,111\,541\,451\,5(4). \end{aligned}$$

Начнем с вычисления нерелятивистской энергии молекулярного иона водорода H_2^+ . При $\mu_p = m_p$, $\mu_e = m_e$, учитывая (2.14), из (2.13) получим для энергии основного состояния и параметров (в единицах $m_e = \hbar = e = 1$):

$$E = -0,485349, \quad \rho = 0,714729, \quad \sigma_p = 2,35512, \quad \sigma_e = 3,53822. \quad (4.1)$$

Из (4.1) видно, что это значение энергии существенно меньше, чем точное для H_2^+ . Определим теперь конституентные массы частиц из (1.16), а затем из системы уравнений (2.14) определим параметры σ_1, σ_2 и σ_3 . Тогда, подставляя значения этих параметров в (2.13), для энергии основного состояния получим

$$\begin{aligned} E &= -0,678021, \quad \rho = 0,71581661, \quad \sigma_p = 3,30626, \quad \sigma_e = 5,070485, \\ \mu_p &= 1836,15590, \quad \mu_e = 1,39924. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Из (4.2) видно, что данное значение энергии существенно больше, чем точное для H_2^+ , а разности конституентных масс и масс свободных состояний равны

$$\mu_p - m_p = 0,00320; \quad \mu_e - m_e = 0,39924. \quad (4.3)$$

Конституентные массы частиц увеличиваются. Из (4.3) видно, что увеличение конституентных масс легких частиц, в частности массы электрона, несколько больше, чем масс тяжелых частиц. Мы учитывали только обменную диаграмму, т.е. учтены вклады W_{ij} ($i \neq j$). В нашем подходе для описания свойств связанных состояний также необходим учет диаграммы собственной энергии. Учитывая (3.5), из (3.3) получаем для основного состояния

$$\delta M_{\text{SE}} = -\frac{\alpha(Z\alpha)}{3\pi\mu_e^2} \left[\ln \alpha^2 + \ln \left(\frac{K_0(n, \ell)}{R_\infty} \right) - \frac{5}{6} \right] \frac{\omega^{3\rho} \Gamma(1 + 2\rho\ell)}{\rho \Gamma(3\rho + 2\rho\ell)}. \quad (4.4)$$

Логарифм Бете для молекулярного иона водорода H_2^+ вычислен в [20] и равен

$$\ln \left(\frac{K_0(n, \ell)}{R_\infty} \right) = 3,012246. \quad (4.5)$$

Учитывая (4.5), а также используя значения параметров электронной ВФ, представленной в (4.2), из (4.4) получаем для поправки к конституентной массе электрона в атомной системе единиц

$$\delta M_{\text{SE}}^e = -0,16776427. \quad (4.6)$$

Тогда, с учетом вклада диаграммы собственной энергии, для конstituентной массы электрона получаем

$$\mu_e = 1,39924 - 0,16776427 = 1,2314794. \quad (4.7)$$

Поправки, связанные с вкладом диаграммы собственной энергии в конstituентную массу протона, очень малы. Учитывая конstituентные массы электрона и протона, представленные в (4.7) и (4.2), для энергии основного состояния и параметров, определяющих ВФ H_2^+ , получаем

$$E = -0,597139, \quad \rho = 0,715817, \quad \sigma_p = 2,90582, \quad \sigma_e = 4,36717. \quad (4.8)$$

Наш результат удовлетворительно согласуется с результатами численных расчетов.

Теперь приступим к рассмотрению молекулярного иона изотопа водорода D_2^+ . В этом случае, при значениях конstituентных масс $\mu_d = m_d$ и $\mu_e = m_e$, получим

$$E = -0,486302, \quad \rho = 0,712416, \quad \sigma_p = 2,34547, \quad \sigma_e = 3,52096. \quad (4.9)$$

Далее определяем конstituентные массы частиц из (1.16), а затем, из системы уравнений (2.14), определяем параметры σ_1, σ_2 и σ_3 . Тогда, подставляя значения этих параметров в (2.13), для энергии основного состояния имеем

$$\begin{aligned} E &= -0,681372, \quad \rho = 0,713342, \quad \sigma_d = 3,29433, \quad \sigma_e = 5,087468, \\ \mu_d &= 3670,4846076, \quad \mu_e = 1,4022234. \end{aligned} \quad (4.10)$$

В этом случае разности конstituентных масс и масс в свободных состояниях равны

$$\mu_d - m_d = 0,00159361, \quad \mu_e - m_e = 0,4022234. \quad (4.11)$$

Из (4.11) видно, что с возрастанием масс тяжелых частиц разность конstituентной массы и массы свободного состояния уменьшается, а разность этих масс для легкой частицы увеличивается, что видно, в частности, при сравнении с разностями масс в системе H_2^+ .

Используя значения параметров электронной ВФ и значение конstituентной массы, представленной в (4.10), а также учитывая значение логарифма Бете (3,012452) для D_2^+ , из (4.4) получаем для поправки к конstituентной массе электрона в атомной системе единиц

$$\delta M_{SE}^e = -0,17036276. \quad (4.12)$$

С учетом вклада диаграммы собственной энергии в конstituентную массу электрона имеем

$$\mu_e = 1,4022234 - 0,17036276 = 1,231865. \quad (4.13)$$

Тогда для энергии основного состояния и параметров, определяющих ВФ молекулярного иона изотопа водорода D_2^+ , получаем

$$E = -0,598790, \quad \rho = 0,712949, \quad \sigma_d = 2,89205, \quad \sigma_e = 4,34223. \quad (4.14)$$

Наконец, определим основные параметры молекулярного иона изотопа водорода T_2^+ . В этом случае, при значениях конститuentных масс $\mu_t = m_t$ и $\mu_e = m_e$, имеем

$$E = -0,486612, \quad \rho = 0,711655, \quad \sigma_t = 2,34228, \quad \sigma_e = 3,515255. \quad (4.15)$$

Определяем конститuentные массы частиц из (1.16) и с учетом этих значений из системы уравнений (2.14) находим параметры σ_1, σ_2 и σ_3 . Тогда, подставляя значения этих параметров в (2.13), для энергии основного состояния имеем

$$E = -0,682464, \quad \rho = 0,712271, \quad \sigma_t = 3,29031, \quad \sigma_e = 5,08613, \\ \mu_t = 5496,9226421, \quad \mu_e = 1,4032020. \quad (4.16)$$

В этом случае разности конститuentных масс и масс свободных состояний оказались равными

$$\mu_t - m_t = 0,00106211, \quad \mu_e - m_e = 0,403202. \quad (4.17)$$

Так же как и в случае с D_2^+ , разность масс тяжелой частицы становится в сравнении с разностью масс легкой частицы небольшой. Для T_2^+ вклад диаграммы собственной энергии в конститuentную массу электрона равен

$$\delta M_{SE}^e = -0,1708320. \quad (4.18)$$

С учетом вклада диаграммы собственной энергии в конститuentную массу электрона получаем

$$\mu_e = 1,403202 - 0,1708320 = 1,23237. \quad (4.19)$$

Тогда для энергии основного состояния и параметров, определяющих ВФ молекулярного иона изотопа водорода T_2^+ , получаем

$$E = -0,599509, \quad \rho = 0,71201, \quad \sigma_t = 2,88839, \quad \sigma_e = 4,33538. \quad (4.20)$$

Учитывая вклады всевозможных диаграмм Фейнмана, мы определили уровни энергии молекулярных ионов водорода: H_2^+ , D_2^+ и T_2^+ . Из (4.8), (4.14) и (4.20) видно, что наши результаты аналитического вычисления удовлетворительно согласуются с существующими данными численных расчетов.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

- Предложены методы аналитического вычисления энергетического спектра кулоновской трехтельной системы. Определены конститuentные массы связанного состояния. Наши результаты показали, что конститuentные массы частиц отличаются от масс частиц в свободном состоянии и конститuentные массы частиц больше, чем массы частиц в свободном состоянии. Возрастание конститuentных масс легких частиц, в частности электрона, несколько большее, чем возрастание масс протона, дейтрона и тритона. Также установили, что конститuentные массы электрона отличаются друг от друга для молекулярных ионов водорода H_2^+ , D_2^+ и T_2^+ .

• Энергетический спектр следующих молекулярных ионов водорода H_2^+ , D_2^+ и T_2^+ определяется из УШ, которое записывается с конститuentными массами частиц в связанном состоянии, а потенциал взаимодействия при этом определяется всевозможными типами диаграмм Фейнмана. При определении энергетического спектра трехтельной кулоновской системы учтены вклады обычной обменной диаграммы, а также диаграммы собственной энергии. Наши результаты показали, что вклад диаграммы собственной энергии является существенным для конститuentной массы электрона. Вклад диаграммы собственной энергии обратно пропорционален квадрату конститuentной массы частицы, поэтому для протона, дейтрона и тритона этот вклад оказался ничтожно малым.

• Определены разности конститuentных масс и масс частиц в свободном состоянии. Для электрона:

$$\Delta\mu_e^p = 0,39924, \quad \Delta\mu_e^D = 0,40222, \quad \Delta\mu_e^T = 0,40320,$$

и для протона, дейтрона и тритона:

$$\Delta\mu_h^p = 0,0032, \quad \Delta\mu_h^D = 0,0015936, \quad \Delta\mu_h^T = 0,001062$$

соответственно. Таким образом, разности масс электрона для H_2^+ , D_2^+ и T_2^+ возрастают, а разности масс ядер этих ионов с увеличением массы уменьшаются.

• Наши результаты показали, что для определения энергии и ВФ основного состояния трехтельной кулоновской системы необходим учет вкладов как от обменных диаграмм, так и от диаграмм собственной энергии. Из формул (4.8), (4.14) и (4.20) следует, что параметры ρ для молекулярных ионов различных изотопов водорода заметно различаются между собой

$$\rho(H_2^+) = 0,715817, \quad \rho(D_2^+) = 0,712949, \quad \rho(T_2^+) = 0,71201,$$

что приводит к существенному различию поведения ВФ этих систем, поскольку поведение ВФ в рамках ОП определяется параметром ρ .

Приложение А ДЕЙСТВИЕ НЕКОТОРЫХ ОПЕРАТОРОВ НА РЕГУЛЯРНЫЕ БИПОЛЯРНЫЕ ГАРМОНИКИ

Прежде всего определим действие ∇_r на регулярные биполярные гармоники. С учетом действия

$$\begin{aligned} \nabla_{r_1} \left\{ \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi(r_1, r_2, r_{12}) \right\} &= \left[\nabla_{r_1} \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \Psi(r_1, r_2, r_{12}) + \\ &+ \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left\{ \left[\frac{\mathbf{r}_1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right] \Psi(r_1, r_2, r_{12}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

определим следующие действия

$$\begin{aligned} \nabla_{r_1}^2 \left\{ \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\} &= \nabla_{r_2}^2 \left\{ \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\} \equiv 0, \\ (\nabla_{r_1} \cdot \mathbf{r}_2) \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= A(\ell_1, \ell_2) \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1-1, \ell_2+1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + B(\ell_1, \ell_2) r_2^2 \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1-1, \ell_2-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \\ (\nabla_{r_1} \cdot \nabla_{r_2}) \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= C(\ell_1, \ell_2) \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1-1, \ell_2-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \\ (\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_{r_1}) \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \ell_1 \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

где мы использовали обозначения:

$$\begin{aligned}
C(\ell_1, \ell_2) &\equiv C(\ell_2, \ell_1)(-1)^{\ell_1+\ell_2+L-1}(2\ell_1+1)(2\ell_2+1) \begin{Bmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ \ell_2-1 & \ell_1-1 & 1 \end{Bmatrix}, \\
A(\ell_1, \ell_2) &= (-1)^{\ell_1+\ell_2+L}(2\ell_1+1)\sqrt{\ell_1(\ell_2+1)} \begin{Bmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ \ell_2+1 & \ell_1-1 & 1 \end{Bmatrix}, \\
B(\ell_1, \ell_2) &= \frac{C(\ell_1, \ell_2)}{2\ell_2+1}.
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Использованием этих соотношений определено действие оператора кинетической энергии и лапласианов на ВФ, которое представлено в (2.10). Для функций, зависящих только от координат Хиллерааса, оператор ∇_{r_1} имеет вид

$$\nabla_{r_1} = \frac{\mathbf{r}_1}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}}. \tag{A.4}$$

Следовательно, действие лапласианов на радиальную часть ВФ будет выглядеть так:

$$\begin{aligned}
\nabla_{r_1}^2 \Psi(r_1, r_2, r_{12}) &= \left\{ \left[\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{2}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} \right] + \frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} + \left[\frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right] \right\} \Psi, \\
(\nabla_{r_1} \nabla_{r_2}) \Psi(r_1, r_2, r_{12}) &= \left\{ \frac{r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2}{2r_1 r_2} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_2} - \left[\frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{2r_1 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} - \frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{2r_2 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{12}} \right\} \Psi(r_1, r_2, r_{12}). \tag{A.5}
\end{aligned}$$

Представим действие оператора кинетической энергии на ВФ как

$$\hat{T} \left(\mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2} \Psi(r_1, r_2, r_{12}) \right) = -[F_0 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4], \tag{A.6}$$

где

$$\begin{aligned}
F_0 &= \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2} \left\{ \frac{1}{2\mu_{13}} \left[\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{2}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} \right] + \frac{1}{\mu_3} \frac{r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2}{2r_1 r_2} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_2} + \frac{1}{2\mu_{23}} \left[\frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{2}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} \right] + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{\mu_1} \frac{r_1^2 + r_{12}^2 - r_2^2}{2r_1 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_{12}} + \frac{1}{\mu_2} \frac{r_2^2 + r_{12}^2 - r_1^2}{2r_2 r_{12}} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_{12}} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2\mu_{12}} \left[\frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{12}} \frac{\partial}{\partial r_{12}} \right] \right\} \Psi(r_1, r_2, r_{12}) \tag{A.7}
\end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}
F_1 &= \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1 \ell_2} \left\{ \frac{\ell_1 \partial_1}{\mu_{13}} + \frac{\ell_2 \partial_2}{\mu_{23}} + \left(\frac{\ell_1}{\mu_1} + \frac{\ell_2}{\mu_2} \right) \partial_{12} \right\} \Psi(r_1, r_2, r_{12}), \\
F_2 &= A(\ell_1, \ell_2) \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1-1, \ell_2+1} \left\{ \frac{\partial_2}{\mu_3} - \frac{\partial_{12}}{\mu_1} \right\} \Psi(r_1, r_2, r_{12}), \\
F_3 &= A(\ell_2, \ell_1) \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1+1, \ell_2-1} \left\{ \frac{\partial_1}{\mu_3} - \frac{\partial_{12}}{\mu_2} \right\} \Psi(r_1, r_2, r_{12}), \tag{A.8}
\end{aligned}$$

$$F_4 = \mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1-1, \ell_2-1} \left\{ \frac{1}{\mu_3} [B(\ell_1, \ell_2) r_2^2 \partial_2 + B(\ell_2, \ell_1) r_1^2 \partial_1 + C(\ell_1, \ell_2)] - \right. \\ \left. - \frac{1}{\mu_1} B(\ell_1, \ell_2) r_2^2 \partial_{12} - \frac{1}{\mu_2} B(\ell_2, \ell_1) r_1^2 \partial_{12} \right\} \Psi(r_1, r_2, r_{12}),$$

здесь $\partial_j = 1/r_j (\partial/\partial r_j)$.

Приложение Б ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛОВ ПО УГЛОВЫМ ПЕРЕМЕННЫМ

В нашем подходе энергетический спектр и ВФ определяются из радиального УШ. Поэтому для получения радиального УШ необходимо провести интегрирование по угловым переменным. Согласно (2.6), угловая часть ВФ определяется биполярными гармониками. Поэтому для получения радиального УШ, учитывая действия операторов Δ и ∇ на $\mathcal{Y}_{LM}^{\ell_1, \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, которые определены в приложении А, умножаем (2.3) слева на биполярные гармоники и проводим интегрирование по угловым переменным. Прежде всего, рассмотрим следующий интеграл

$$W(\theta_{12}) = \int d\Omega Y_{L'M'}^{\ell_1' \ell_2'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) Y_{LM}^{\ell_1 \ell_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (\text{Б.1})$$

где θ_{12} — угол между векторами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , выражающийся через координаты Хиллерааса в виде $\cos \theta_{12} = (r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2)/(2r_1 r_2)$. Этот интеграл легко вычисляется при конкретных значениях квантовых чисел: L, M, ℓ_1 и ℓ_2 . В частности,

$$\{Y_l(\hat{\mathbf{r}}_1) \otimes Y_l(\hat{\mathbf{r}}_2)\}_{00} = \frac{(-1)^l (2l+1)^{1/2}}{4\pi} P_l(\cos \theta_{12}). \quad (\text{Б.2})$$

Также будем использовать следующие тождества: для биполярных гармоник

$$Y_{2m} = \sqrt{4\pi} Y_{2m}^{20}, \quad Y_{2m}(\hat{\mathbf{r}}_{12}) = \sqrt{4\pi} \left(\frac{r_1^2}{r_{12}^2} Y_{2m}^{20} + \frac{r_2^2}{r_{12}^2} Y_{2m}^{02} - \sqrt{\frac{10}{3}} \frac{r_1 r_2}{r_{12}^2} Y_{2m}^{11} \right) \quad (\text{Б.3})$$

и для матричного элемента

$$\langle L'l'_1 l'_2 \| Y_2^{20} \| L l_1 l_2 \rangle = (-1)^{l_1+l_2+L} \frac{\sqrt{5}}{4\pi} \Pi_{LL'l_1 l_2} C_{20; l_1 0}^{l'_1 0} \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & L \\ L' & 2 & l'_1 \end{matrix} \right\}, \quad (\text{Б.4})$$

$$\langle L'l'_1 l'_2 \| Y_2^{11} \| L l_1 l_2 \rangle = \frac{3\sqrt{5}}{4\pi} \Pi_{LL'l_1} C_{10; l_1 0}^{l'_1 0} C_{10; l_2 0}^{l'_2 0} \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & L \\ 1 & 1 & 2 \\ l'_1 & l'_2 & L' \end{matrix} \right\}, \quad (\text{Б.5})$$

где $C_{l_1 m_1; l_2 m_2}^{l m}$ — обычные коэффициенты Клебша–Гордана, а множители в фигурных скобках являются символами $3j$ и $6j$. Также использовано обозначение $\Pi_{a,b,\dots,c} = \sqrt{(2a+1)(2b+1)\dots(2c+1)}$.

При вычислениях используем следующие соотношения:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} l'_1 & l''_1 & l \\ l'_2 & l''_2 & l \\ L & L & 0 \end{array} \right\} = \frac{(-1)^{l'_1+l'_2+l+L}}{\sqrt{(2L+1)(2l+1)}} \left\{ \begin{array}{ccc} l'_1 & l''_1 & l \\ l'_2 & l''_2 & L \end{array} \right\}, \quad C_{L-MLM}^{00} = \frac{(-1)^{L+M}}{\sqrt{2L+1}},$$

$$C_{l'_1 0 l''_1 0}^{l_0} = (-1)^{l'_1-l''_1} \sqrt{2l+1} \left(\begin{array}{ccc} l'_1 & l''_1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right), \quad (\text{Б.6})$$

$$C_{l'_2 0 l''_2 0}^{l_0} = (-1)^{l'_2-l''_2} \sqrt{2l+1} \left(\begin{array}{ccc} l'_2 & l''_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

Для произведения двух биполярных гармоник применяем

$$\begin{aligned} \{Y_{l'_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) \otimes Y_{l'_2}(\hat{\mathbf{r}}_2)\}_{L'M'} \{Y_{l''_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) \otimes Y_{l''_2}(\hat{\mathbf{r}}_2)\}_{L''M''} = \\ = \sum_{LM} C_{L'M'L''M''}^{LM} \sum_{l_1 l_2} B_{l'_1 l'_2 L' l''_1 l''_2 L''}^{l_1 l_2 L} \{Y_{l_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) \otimes Y_{l_2}(\hat{\mathbf{r}}_2)\}_{LM}, \quad (\text{Б.7}) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} B_{l'_1 l'_2 L' l''_1 l''_2 L''}^{l_1 l_2 L} = \sqrt{\frac{(2l'_1+1)(2l'_2+1)(2l''_1+1)(2l''_2+1)(2L'+1)(2L''+1)}{(4\pi)^2}} \times \\ \times C_{l'_1 0 l''_1 0}^{l_1 0} C_{l'_2 0 l''_2 0}^{l_2 0} \left\{ \begin{array}{ccc} l'_1 & l''_1 & l_1 \\ l'_2 & l''_2 & l_2 \\ L' & L'' & L \end{array} \right\}. \quad (\text{Б.8}) \end{aligned}$$

С использованием этих соотношений при конкретных значениях орбитального квантового числа, вычисляются интегралы по угловым переменным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Eides M. I. et al. // Phys. Rep. 2001. V. 342. P. 61.
2. Amsler C. et al. Review of Particle Physics // Phys. Lett. B. 2008. V. 667. P. 1.
3. Berestetskii V. B., Lifshitz E. M., Pitaevskii L. P. Quantum Electrodynamics. 2nd Ed. Oxford: Pergamon Press, 1982.
4. Caswell W. E., Lepage G. P. // Phys. Lett. B. 1986. V. 167. P. 437.
5. Kinoshita T., Nio M. // Phys. Rev. D. 1996. V. 53. P. 4909.
6. Dineykhon M. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2009. V. 42. P. 145001.
7. Dineykhon M., Zhaugasheva S. A., Toinbaeva N. Sh. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2010. V. 43. P. 015003–015009.
8. Dineykhon M., Zhaugasheva S. A. // Part. Nucl. 2011. V. 42. P. 379–413.
9. Feynman R. P., Hibbs A. P. Quantum Mechanics and Path Integrals. N. Y.: McGraw-Hill, 1963.
10. Dineykhon M., Efimov G. V., Namsrai Kh. // Fortschr. Phys. 1991. V. 39. P. 259.
11. Dineykhon M. et al. Oscillator Representation in Quantum Physics. Lecture Notes in Physics. Berlin: Springer-Verlag, 1995. V. 26.

12. Эфрос В. Д. // ЖЭТФ. 1985. Т. 90. С. 10.
13. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. М.: Наука, 1975.
14. Dineykhаn M., Efimov G. V. // Rep. Math. Phys. 1995. V. 36. P. 287; Yad. Fiz. 1996. V. 59. P. 862; Dineykhаn M. // Z. Phys. D. 1997. V. 41. P. 77; Dineykhаn M., Nazmitdinov R. G. // Yad. Fiz. 1999. V. 62. P. 143; Dineykhаn M., Zhaugasheva S. A., Nazmitdinov R. G. // JETP. 2001. V. 119. P. 1210.
15. Jentschura U. D., Soff G., Mohr P. J. // Phys. Rev. A. 1997. V. 56. P. 1739; Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 53.
16. Бете Г. А., Солнтер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: Физматгиз, 1960.
17. Yelkhovsky A. // Phys. Rev. A. 2001. V. 64. P. 062104; Pachucki K. // J. Phys. B. 1998. V. 31. P. 3547.
18. Korobov V. I. // Phys. Rev. A. 2004. V. 69. P. 054501.
19. Yan Z.-C., Zhang J.-Y., Li Y. // Phys. Rev. A. 2003. V. 67. P. 062504.
20. Korobov V. I. // Phys. Rev. A. 2006. V. 73. P. 024502; 2004. V. 70. P. 012505.

Получено 19 марта 2012 г.