

ОПИС ЕКЗОТИЧНИХ ТРИЧАСТИНКОВИХ АТОМНИХ СИСТЕМ У МЕТОДІ ГІПЕРСФЕРИЧНИХ КООРДИНАТ

М.Гайсак, М.Надь*, В.Онисько**

Інститут електронної фізики НАН України, 88016 Ужгород, вул. Університетська, 21,

*Інститут фізики Словацької АН, 84228 Братіслава, вул. Дубравська, 9

**Ужгородський державний університет, 88000 Ужгород, вул. Волошина, 54

У методі гіперсферичних координат проведено розрахунки енергії основного стану від'ємного іону позитрону в Борн-Оппенгеймерівському та адіабатичному наближенні з врахуванням внесків кутових та радіальних кореляцій. Виявлено точки квазіперетину автоіонізаційних адіабатичних потенціалів, що приводить до утворення структури у неадіабатичному потенціалі. Проведено порівняння отриманих значень енергії із розрахунками, проведеними за допомогою інших методів. Показано, що для одержання значення енергії із точністю 10^{-4} а.о. у базис для визначення адіабатичних потенціалів необхідно включати понад 100 елементів, або проводити апроксимацію Паде за розмірністю базису.

Вступ

Для врахування кореляційного руху тотожних частинок у тричастинковій системі, як правило, використовують найбільш поширені методи розрахунків спектральних характеристик, а саме: варіаційний метод, метод накладання конфігурацій, метод комплексних обертань, метод сильного зв'язку каналів, метод гіперсферичних координат (ГСК) та їхні модифікації. Однак усі ці методи, за виключенням методу ГСК, стикаються із певними труднощами при класифікації квантових станів. Це пов'язано з тим, що хоча названі методи і можуть добре описати інтегральні характеристики квантових систем, але вони не відтворюють у повній мірі усіх особливостей хвильової функції, зокрема у околах сингулярних точок гамільтоніану системи, оскільки вони опираються на певний клас функцій, елементи якого не є розв'язками рівняння Шредінгера. Навпаки, метод ГСК вже в адіабатичному наближенні дозволяє з певною точністю отримати наближені частинні розв'язки рівняння Шредінгера, тим самим класифікація квантових станів зводиться

до задання певних частинних розв'язків. Ці розв'язки можна характеризувати певною системою квантових чисел, які пов'язані з нулями хвильової функції по кожній незалежній змінній.

Метод ГСК добре зарекомендував себе при вивченні гелієподібних систем [1-4], а також при розв'язанні задач ядерної, молекулярної фізики та фізики елементарних часток (див., наприклад, огляд [5]). При розгляданні задач атомної фізики [1-3], як правило, використовується статичне наближення, оскільки відношення маси електрона до маси ядра має порядок 10^{-3} . Вивчення екзотичних атомних систем таких як $e^-e^+e^-$, $\mu^+\mu^-$, μ^+e^- , та інших, вимагає врахування руху системи центру мас. Найбільш послідовно це можна провести у методі ГСК.

Метод гіперсферичних координат

Нерелятивістське рівняння Шредінгера для тричастинкових систем із кулонівською взаємодією в атомній системі одиниць ($m_e = e = \hbar = 1$) має вигляд

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_i \frac{1}{m_i} \Delta_i + \sum_{i < j} V_{ij} \left(\left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right| \right) \right] \Psi \left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \right) = \tilde{E} \Psi \left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \right), \quad (1)$$

де m_i , \vec{r}_i – маса та радіус-вектор i -ої частинки, Δ_i – оператор Лапласа, який діє на змінні i -ої частинки, \tilde{E} – повна енергія системи, $V_{ij}(x)$ – оператор потенціальної взаємодії між двома частинками, який має вигляд

$$V_{ij} \left(\left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right| \right) = \frac{Z_i Z_j}{\left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right|}, \quad (2)$$

де Z_i – заряд i -ої частинки.

Для відокремлення руху системи центру мас введемо відносні координати Якобі $(\vec{\rho}_k, \vec{\tau}_k)$ та радіус-вектор системи центру мас $(\vec{\mathfrak{R}})$, що визначаються співвідношеннями [6]

$$\vec{\rho}_k = d_k^{-1} (\vec{r}_j - \vec{r}_i)$$

$$\vec{\tau}_k = d_k \left(\vec{r}_k - \frac{m_i \vec{r}_i + m_j \vec{r}_j}{m_i + m_j} \right), \quad (3)$$

$$\vec{\mathfrak{R}} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2 + m_3 \vec{r}_3}{m_1 + m_2 + m_3}$$

$$\text{де } \mu = \left(\frac{m_1 m_2 m_3}{M} \right)^{1/2},$$

$$d_k = \left[\frac{m_k}{\mu} \left(1 - \frac{m_k}{M} \right) \right]^{1/2} - \text{приведена маса}$$

системи та константа нормування, $M = m_1 + m_2 + m_3$ – повна маса системи, (i,j,k) – циклічна перестановка чисел $(1,2,3)$. Як видно із (3), існує три набори незалежних відносних координат Якобі. За допомогою ортогональних перетворень, які визначаються масами частинок, можна перейти від одного набору до іншого. У змінних (3) рівняння (1) набуває вигляду

$$\left\{ \begin{aligned} \left[-\frac{1}{2\mu} (\Delta_{\rho} + \Delta_{\tau}) + V(\vec{\rho}_k, \vec{\tau}_k) \right] \varphi(\vec{\rho}_k, \vec{\tau}_k) &= E \varphi(\vec{\rho}_k, \vec{\tau}_k), \\ -\frac{1}{2M} \Delta_{\mathfrak{R}} \chi(\vec{\mathfrak{R}}) &= (\tilde{E} - E) \chi(\vec{\mathfrak{R}}), \end{aligned} \right. \quad (4)$$

де $V(x,y)$ – оператор потенціальної енергії системи, E – енергія відносного руху, а хвильова функція системи факторизується, тобто

$$\Psi \left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \right) = \varphi(\vec{\rho}_k, \vec{\tau}_k) \chi(\vec{\mathfrak{R}}).$$

Друге рівняння (4) являється рівнянням Гельмгольца і його частинні розв'язки добре відомі. Тому нам залишається знайти розв'язки першого рівняння у системі (4).

В обертовій системі координат для $^{1,3}S$ -станів рівняння відносного руху приймає досить простий вигляд [7]. За незалежні змінні зручно вибрати кути

Ейлера (δ, β, γ) , які характеризують систему як ціле та відносні змінні

гіперрадіус $R = \sqrt{\vec{\rho}_k^2 + \vec{\tau}_k^2}$ ($0 \leq R < \infty$),

гіперкут $\alpha_k = 2 \arctg \frac{\rho_k}{\tau_k}$ ($0 \leq \alpha \leq \pi$) та

кут між радіус-векторами ρ_k τ_k

$\theta = \arccos \frac{\rho_k \tau_k}{\rho_k \tau_k}$ ($0 \leq \theta \leq \pi$). У цих

змінних рівняння Шредінгера для $^{1,3}S$ -станів набуває вигляду

$$\left[\frac{1}{R^5} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^5 \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{4}{R^2} \Lambda^2 - 2V(R, \alpha, \theta) + 2E \right] f(R, \alpha, \theta) = 0, \quad (5)$$

де

$$\Lambda^2 \equiv \frac{1}{\sin^2 \alpha} \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\sin^2 \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]$$

- квадрат оператора узагальненого кутового моменту системи.

Задача на власні значення та власні функції квадрата оператора узагальненого кутового моменту

$$\Lambda^2 \varphi_{nm}(\alpha, \theta) = -\lambda \varphi_{nm}(\alpha, \theta) \quad (6)$$

з граничними умовами

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \varphi_{nm}(\alpha, 0) = \frac{\partial}{\partial \theta} \varphi_{nm}(\alpha, \pi) = 0, \quad \varphi_{nm}(0, \theta) = \varphi_{nm}(\pi, \theta) = \delta_{m0}, \quad (7)$$

має аналітичний розв'язок, причому власні значення визначаються формулою $\lambda = (n + m + 1)^2 - 1 = (n + m)(n + m + 2)$, а власні функції виражаються через поліноми Гегенбауера ($C_n^{(m)}(x)$) та Лежандра ($P_m(x)$) наступним співвідношенням

$$\varphi_{nm}(\alpha, \theta) = N_{nm} (\sin \alpha)^m C_n^{(m+1)}(\cos \alpha) P_m(\cos \theta) \quad (8)$$

де N_{nm} – константи орто нормування, які задаються виразом

$$N_{nm} = 2^m \Gamma(m+1) \left[\frac{(2m+1)(n+m+1)\Gamma(m+1)}{\pi \Gamma(2m+n+2)} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$\Gamma(x)$ – гама функція, n та m степені поліномів Гегенбауера та Лежандра відповідно. Ці функції часто називають гіперсферичними гармоніками. Оскільки власні функції (8) залежать від двох квантових чисел, то зручно ввести інші два квантових числа [8], а саме $\sigma = n + m$ та $\rho = m - n$. Квантове число σ пов'язане з величиною узагальненого кутового моменту, а ρ - з проекцією цього моменту на вісь квантування. Введення квантових

чисел (σ, ρ) розбиває квантові стани на мультиплети. У кожному мультиплеті, який задається квантовим числом σ , міститься певне число станів, які різняться квантовим числом ρ , що змінюється у межах $\sigma \geq \rho \geq -\sigma$ через дві одиниці. Тобто у мультиплеті містяться стани із квантовими числами (σ, σ) , $(\sigma, \sigma - 2)$, $(\sigma, \sigma - 4)$, ... $(\sigma, -\sigma)$, що слідує із формули для власних значень квадрата оператора узагальненого кутового моменту. Таким чином, кількість станів у мультиплеті рівна $\sigma + 1$. Власні функції (8) ортонормовані з вагою $\sin^2 \alpha \sin \theta$ і є зручними для використання в якості базисних функцій при розв'язуванні цілої низки задач сучасної фізики з короткодіючими потенціалами взаємодії. У нашому випадку потенціал взаємодії (2) є кулонівським, тому в якості базисних функцій слід використати власні функції оператора $\frac{4}{R^2} \Lambda^2 - 2V(R, \alpha, \theta)$, який отримується із (5) при фіксованому значенні гіперрадіусу R [9]. Задача на власні значення та власні функції цього оператора набуває вигляду

$$\left[\Lambda^2 - \frac{R^2}{2} V(R, \alpha, \theta) \right] \chi_\mu(R, \alpha, \theta) = -R^2 U_\mu(R) \chi_\mu(R, \alpha, \theta) \quad (9)$$

з граничними умовами, аналогічними граничним умовам крайової задачі (6), а саме

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \chi_\mu(R, \alpha, 0) = \frac{\partial}{\partial \theta} \chi_\mu(R, \alpha, \pi) = 0, \quad .$$

$$\chi_{\mu}(R, 0, \theta) = \chi_{\mu}(R, \pi, \theta) = \delta_{\mu 0} \quad (10)$$

Як видно із (9), власні значення $U_{\mu}(R)$ та власні функції $\chi_{\mu}(R, \alpha, \theta)$ параметрично залежать від гіперрадіуса. По аналогії з молекулярною фізикою [1-3,5] власні значення та власні функції крайової задачі (9), (10) називатимемо адиабатичними потенціалами та каналовими функціями відповідно. Крайова задача (9), (10) має аналітичний розв'язок лише при нульовому значенні гіперрадіуса. У цьому випадку адиабатичні потенціали та каналові функції співпадають з власними значеннями та власними функціями крайової задачі (6). При всіх інших значеннях гіперрадіуса задачу (9), (10) можна розв'язати лише чисельно. У даній роботі ми зведемо задачу (9), (10) до

розв'язання системи однорідних алгебраїчних рівнянь. Якщо розв'язки задачі (9), (10) відомі, то можна розв'язати і задачу (5).

Для цього розкладемо функцію $f(R, \alpha, \theta)$ у ряд за каналовими функціями $\chi_{\mu}(R, \alpha, \theta)$, які утворюють повну ортонормовану систему функцій від двох незалежних змінних, тобто

$$f(R, \alpha, \theta) = \sum_{\mu=1}^{\infty} F_{\mu}(R) \chi_{\mu}(R, \alpha, \theta), \quad (11)$$

де $F_{\mu}(R)$ -невідомі радіальні функції. Для визначення цих функцій із рівняння (5) та ортонормованих властивостей каналових функцій отримуємо нескінчену систему звичайних диференціальних рівнянь другого порядку

$$\sum_{\nu=1}^{\infty} \left\{ \left[\frac{1}{R^5} \frac{d}{dR} \left(R^5 \frac{d}{dR} \right) + 4U_{\mu}(R) - 2E \right] \delta_{\mu\nu} - Q_{\mu\nu}(R) - P_{\mu\nu}(R) \frac{d}{dR} \right\} F_{\nu}(R) = 0, \quad (12)$$

де $Q_{\mu\nu}(R)$ та $P_{\mu\nu}(R)$ -неадиабатичні потенціали, які визначаються каналовими функціями за допомогою співвідношень

$$Q_{\mu\nu}(R) = \left\langle \chi_{\mu}(R, \alpha, \theta) \left| \frac{\partial^2}{\partial R^2} \chi_{\nu}(R, \alpha, \theta) \right. \right\rangle, \\ P_{\mu\nu}(R) = \left\langle \chi_{\mu}(R, \alpha, \theta) \left| \frac{\partial}{\partial R} \chi_{\nu}(R, \alpha, \theta) \right. \right\rangle \quad (13)$$

де дужками $\langle | \rangle$ позначено інтегрування за незалежними кутковими змінними α та θ з ваговим множником $\sin^2 \alpha \sin \theta$.

Для визначення каналових функцій скористаємось власними ортонормованими функціями крайової

задачі (6), (7), яка має тільки дискретний спектр, оскільки незалежні змінні належать обмеженим областям. Розкладемо каналову функцію у ряд за функціями (8)

$$\chi_{\mu}(R, \alpha, \theta) = \sum_{n,m=1}^{\infty} g_{\mu nm}(R) \varphi_{nm}(\alpha, \theta), \quad (14)$$

де $g_{\mu nm}(R)$ - невідомі функції, для визначення яких із (9) одержуємо нескінчену систему однорідних алгебраїчних рівнянь

$$\sum_{n'm'=0}^{\infty} \left\{ \left[-\frac{(n+m)(n+m+2)}{R^2} + U_{\mu}(R) \right] \delta_{nm} \delta_{n'm'} - \frac{1}{2} \langle n'm' | V(R, \alpha, \theta) | nm \rangle \right\} g_{\mu nm}(R) = 0, \quad (15)$$

де дужками $\langle | \rangle$ позначені матричні елементи оператора потенціальної енергії

взаємодії, інтегрування проводиться за кутковими змінними з ваговим множником

$\sin^2 \alpha \sin \theta$. Ці матричні елементи можна виразити у вигляді аналітичних формул, які досить громіздкі і тому приводити їх явний вид тут не будемо. Розмірність

системи алгебраїчних рівнянь (15) залежить від величини квантового числа σ і задається формулами:

для синглетних станів

$$N = \begin{cases} \frac{(\sigma + 2)^2}{4}, & \sigma - \text{парне}, \\ \frac{(\sigma + 1)(\sigma + 3)}{4}, & \sigma - \text{непарне}, \end{cases}$$

для триплетних станів

$$N = \begin{cases} \frac{\sigma(\sigma + 2)}{4}, & \sigma - \text{парне}, \\ \frac{(\sigma + 1)^2}{4}, & \sigma - \text{непарне}. \end{cases}$$

Розрахунки адиабатичних та неадиабатичних потенціалів

Таким чином, знаходження розв'язку рівняння Шредингера (4) звелось до розв'язування системи однорідних алгебраїчних рівнянь (15) та розв'язання системи диференціальних рівнянь другого порядку (12). Знаходження розв'язку системи диференціальних рівнянь задача досить складна. У даній роботі обмежимось двома наближеннями. Перше з них часто називають наближенням Борна-Оппенгеймера і суть його полягає у нехтуванні неадиабатичними потенціалами (13), тобто вважається, що каналові функції повільно змінюються із зміною гіперрадіуса. Друге наближення є так зване адиабатичне наближення. У цьому наближенні нехтуємо лише недиагональними неадиабатичними потенціалами. При обох цих наближеннях система (12) розщеплюється і у кожному каналі необхідно розв'язувати лише одне диференціальне рівняння другого порядку. Обидва ці наближення дають нижню та верхню межі для власних значень енергії у певному каналі.

На рис.1 приведена залежність адиабатичного потенціалу для основного терму від'ємного іону позитронію від розмірності базису, який отримано при розв'язанні системи однорідних алгебраїчних рівнянь (15). Верхня крива відповідає розмірності базису, рівній 9, а наступні відповідно - 16, 36 та 49. Із

рисунка видно, що при малих значеннях гіперрадіуса величина адиабатичного потенціалу слабо залежить від розмірності базису. Однак при великих значеннях гіперрадіуса залежність адиабатичного потенціалу від розмірності базису істотна.

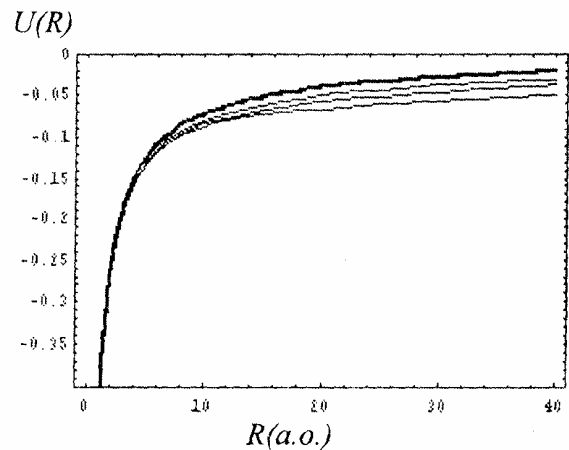


Рис.1. Залежність адиабатичного потенціалу для основного терму від'ємного іону позитронію від розмірності базису

Маючи адиабатичні потенціали і каналові функції, можна визначити неадиабатичні потенціали. На рис.2 приведено залежність неадиабатичного потенціалу Q_{00} від гіперрадіуса. Як видно із рисунка, величина неадиабатичного потенціалу незначна і відмінна від нуля при малих та середніх значеннях гіперрадіуса, однак, як форма потенціалу, так і його величина із збільшенням розмірності базису змінюються.

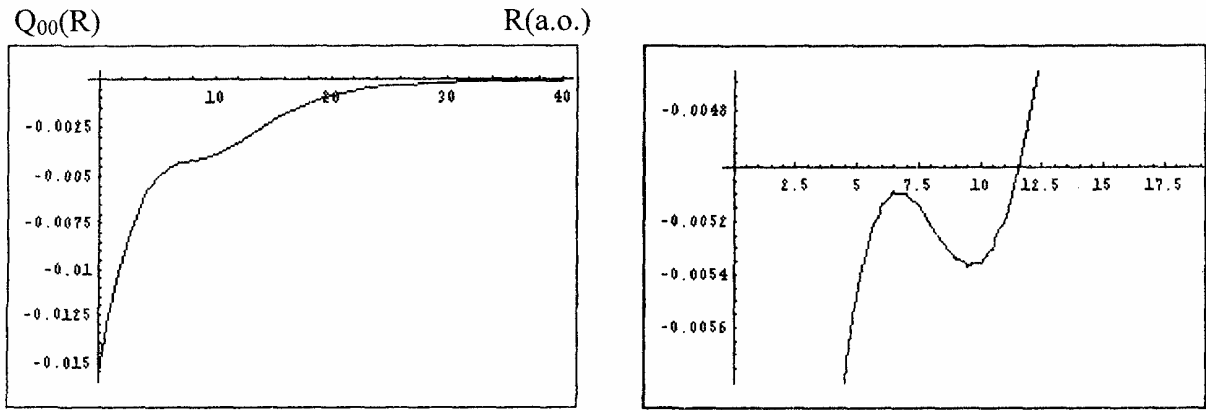


Рис. 2. Залежність неадіабатичного потенціалу $Q_{00}(R)$ від гіперрадіусу для від'ємного іону позитронію при розмірності базису, рівній 16 та 36

Викликає певний інтерес поява структури на неадіабатичному потенціалі, яка міститься в області значень гіперрадіуса, що відповідає точці квазіперетину адіабатичних потенціалів автоіонізаційних серій (1,1) та (1,-1), які відповідають серіям $2p^2$ та $2s^2$ класифікації незалежних електронів. Адіабатичні терми, які відповідають цим серіям, наведені на рис.3.

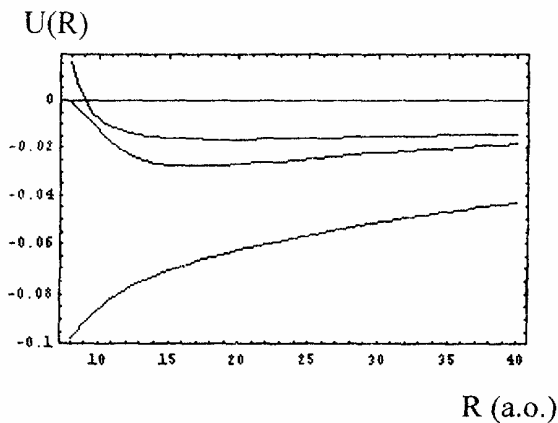


Рис.3. Залежність нижчих адіабатичних потенціалів U_{00} , U_{11} та U_{1-1} від'ємного іону позитронію від гіперрадіуса, які отримані при розмірності базису, рівній 16

Визначення енергії основного стану іону позитронію та обговорення результатів

Визначені адіабатичні та неадіабатичні потенціали дають змогу провести розрахунки значення енергії для основного стану від'ємного іону позитронію в наближенні Борна – Оппенгеймера та адіабатичному наближенні. Результати розрахунків енергії основного стану від'ємного іону позитронію наведені у табл.1. Там же наведені дані, які отримані у методі гіперсферичних координат при врахуванні кореляцій з використанням К-гармонік [19,15], що залежать від п'яти незалежних змінних та іншими методами. Так, наприклад, М.І. Гафтел та М.Б. Манделцвейг [10,11] досліджували вплив кореляцій на значення енергії зв'язаного стану за допомогою так званої кореляційної функції. У цьому випадку хвильова функція тричастинкової системи представляється у вигляді добутку двох функцій, а саме $\psi = \chi \phi$, де χ - кореляційна функція, яка вибирається так, щоб врахувати сингулярні властивості хвильової функції системи. У роботах

[10,11] кореляційну функцію вибрано у вигляді двопараметричної функції

$$\chi = \exp[-\gamma (r_{13} + r_{23}) - \delta r_{12}] , \quad (16)$$

де γ та δ параметри, які вибираються з певних фізичних міркувань. Існує декілька незалежних шляхів для вибору параметрів γ та δ , які ґрунтуються на відсутності кулонівської сингулярності у рівнянні, яке визначає кореляційну функцію χ (каспова параметризація [16]), екстремальних властивостях енергії (варіаційна параметризація [17]) та асимптотичної поведінки кореляційної функції (асимптотична параметризація [15]). Функція ϕ будується у вигляді ряду за гіперсферичними гармоніками типу (8). Коефіцієнти цього ряду визначаються при розв'язуванні відповідної системи диференціальних рівнянь другого порядку, яка одержується із рівняння Шредінґера [10]. Як видно із табл.1, енергія основного стану досить чутлива до параметрів γ та δ , які залежать від розглядуваної системи. Так, наприклад, при розрахунках енергій основного та збудженого стану атому гелію параметри γ та δ рівні відповідно 2 та 0. Рівність нулеві параметра δ означає, що електрони знаходяться на досить великих відстанях один від одного і їх рух слабо скорельований. При розгляданні від'ємного іону позитронію [11, 12] розрахунки проводились при декількох значеннях параметрів. Деякі результати розрахунків наведені у четвертій колонці таблиці. Бачимо, що більш підходящими є параметри ($\gamma = 0.5$, $\delta = 0$). Більш того, при розмірності базису, рівній 169, отримане значення енергії основного стану від'ємного іону позитронію становить 0.262002, що блискуче узгоджується із розрахунками за варіаційним методом. У третій колонці наведені результати, які отримані з використанням К-гармонік, що залежать від п'яти незалежних кутових

змінних, при розв'язуванні системи N радіальних рівнянь. Як видно із наведених результатів, різниця між значеннями енергії у налиженні Борна-Оппенгеймера і адіабатичному наближенні складає $5 \cdot 10^{-3}$ а.о., більш того, результати адіабатичного наближення знаходяться у задовільному узгодженні із результатами роботи [15] та доброму узгодженні з результатами роботи [19]. Похибки складають 10^{-4} а.о. та 10^{-5} а.о., відповідно. Порівнюючи результати, які отримані у адіабатичному наближенні, з результатами робіт [16,19] можна судити про величину зсуву енергетичних рівнів, зумовленою міжканаловою взаємодією. Таким чином, бачимо, що міжканалова взаємодія приводить до зсуву положення основного стану від'ємного іону позитронію на величину порядку $8 \cdot 10^{-4}$ а.о..

Отримані результати можна покращити, якщо використати Паде-апроксимацію для екстраполяції [20] за розмірністю базису. Очевидно, що енергія основного стану від'ємного іону позитронію залежить від розмірності базису, тобто $E_N = f(N)$. Якщо цю функцію записати у вигляді діагональної апроксимації Паде $[M, M]$, то можемо перейти до границі при $N \rightarrow \infty$, а саме

$$E = \lim_{N \rightarrow \infty} E_N = \frac{P_M(N)}{Q_M(N)}, \quad (16)$$

де $P_M(N)$ і $Q_M(N)$ – поліноми M -ої степені від розмірності базису. Взавши [1,1] апроксимацію Паде та використавши значення енергії, отриманої при розмірностях базису 72, 49 та 36 для визначення коефіцієнтів поліномів апроксимації, одержимо значення енергії, рівне 0.262145 а.о., що дуже добре узгоджується із наведеними точними розрахунками.

Таблиця 1

Залежність енергії (-E) основного стану від'ємного іону позитронію (e^+e^-) (а.о.) від розмірності базису при визначенні адиабатичних потенціалів

N(σ) число каналів	Дані розрахунків.	K- гармоніки	Кореляційна функція	Варіаційний метод
1(0)	0.11528		0.20669 ^g	
4(2)	0.220600 ^a	0.220598 ^c	0.24658 ^g	0.261996 [12] 0.262001 [13] 0.262005 [14]
	0.222490 ^b	0.220937 ^d		
9(4)	0.241697 ^a	0.241696 ^c	0.24685 ^g	
	0.244830 ^b	0.242245 ^d	0.2589 ^f	
		0.2423 ^e		
16(6)	0.249793 ^a	0.249791 ^c	0.26111 ^g	
	0.253676 ^b	0.250464 ^d	0.2603 ^f	
		0.2505 ^e		
25(8)	0.253572 ^a	0.253586 ^c	0.26207 ^g	
	0.257865 ^b	0.254306 ^d	0.2609 ^f	
		0.2543 ^e		
36(10)	0.255997 ^a	0.255986 ^c	0.26212 ^g	
	0.260518 ^b	0.256723 ^d	0.2613 ^f	
		0.2567 ^e		
49(12)	0.257403 ^a	0.257494 ^c	0.26196 ^g	
	0.262170 ^b	0.258231 ^d		
72(15)	0.258769 ^a			
	0.263618 ^b			

a - адиабатичне наближення,

b - наближення Борна-Оппенгеймера,

c - незв'язана система радіальних рівнянь [19],

d - зв'язана система радіальних рівнянь [19],

e - зв'язана система радіальних рівнянь [15],

g - ($\gamma=0.5, \delta=0$) [12],

f - ($\gamma=0.362, \delta=0$) [11]

Зауважимо, що при одержанні даного результату не використовувалось жодного довільного параметру. Таким чином, бачимо, що метод гіперсферичних координат дає змогу уже в адиабатичному наближенні досить точно врахувати внесок кутових та радіальних кореляцій. Викликає неабиякий інтерес провести розрахунки внеску кореляцій у значення енергій основного та автоіонізаційних $^{1,3}S$ - станів за допомогою двовимірного базису [7].

1. U. Fano, Rep.Prog.Phys., 97(1983).
2. C.D. Lin, Phys., 22, 77(1986).
3. С.И. Никитин, В.Н. Островский, т.8, 3 (1983).
4. Р.И.Джибути, К.В.Шитикова, Метод гиперсферических функций в атомной и ядерной физике, Москва: Энергоатомиздат, 1993.

5. C.D. Lin, Phys.Rev.A, 257, 1(1995).
6. B.R. Johnson, J.Chem.Phys. 73, 5051(1980).
7. M.I. Haysak, M.M. Dovhanich, V.I. Lengyel, V.V. Onysko, J.Phys.Stud.1, 521(1997).
8. Е. Вигнер, Теория групп и ее приложение к квантовомеханической теории атомных спектров, ИЛ (1961).
9. J.H. Macek, J.Phys.B, 1, 831(1968).
10. M.I. Haftel, V.B. Mandelzweig, Phys.Rev.A, 39, 2813(1989).
11. M.I. Haftel, V.B. Mandelzweig, Phys.Rev.A, 38, 5995(1988).
12. W. Kolos, C.C.J. Roothaan, R.A. Sack, Rev.Mod.Phys. 32, 178(1960).
13. A.A. Frost, M. Inokuti, J.P. Lowe, J.Chem.Phys. 41, 482(1964).
14. P. Petelenz, V.H. Smith, Phys.Rev.A, 36, 5125(1987).
15. M.I. Haftel, V.B. Mandelzweig, Ann.Phys.(N.Y.), 150, 48(1983).
16. M.I. Haftel, V.B. Mandelzweig, Phys.Lett. 120, 230(1987).
17. C. Abbott, E.N. Maslen, J.Phys.B 19, 1595(1986).

18. M.I. Haftel, V.B. Mandelzweig, Ann.Phys.(N.Y.), **152**, (1990).
19. R. Chattopadhyay, T.K. Das, Phys.Rev.A, **56**, 1281(1997).
20. Бейкер Дж., Грейвс-Моррис, Аппроксимация Паде, 1986, М: Мир, 504.

DESCRIPTION OF EXOTIC THREE-BODY ATOMIC SYSTEMS IN HYPERSPHERICAL COORDINATES METHOD

M.Haysak, M.Nagy* , V.Onysko**

Institute of Electron Physics NAS of Ukraine, 88016 Uzghorod, str. Universitetska, 21,

*Institute of Physics of Slovak AS, 842 28 Bratislava, str. Dubravska, 9

**Uzhgorod State University, 88000 Uzhgorod, str. Voloshina, 54

The energy of ground state of positron negative ion in the hyperspherical coordinates method has been calculated in Borb-Oppenheimer and adiabatic approximation accounting the contribution of angle and radial correlation. Quasi-crossing points for autoionizing adiabatic potentials were revealed, which forms a structure in non-adiabatic potential. The received energy values have been compared with results of calculations performed using other methods. It was shown that in order to receive energy values with accuracy 10^{-4} a.u. it is necessary to include more than 70 elements into the basis for determination of adiabatic potentials or to use Pade approximation on the basis dimension..



Михайло Іванович Гайсак - провідний науковий співробітник Інституту електронної фізики НАН України. Народився в 1945 р. В 1970 році закінчив фізичний факультет Ужгородського державного університету. У 1972-1975 рр. В 1976 році захистив кандидатську дисертацію, а в 1996 році - докторську. Доктор фіз.-мат.наук.



Мирослав Ференцович Надь - провідний науковий співробітник Інституті фізики Словацької Академії наук у м.Братіслава.

Народився в 1948 р.. У 1972 році закінчив Братіславський університет ім. Я.А.Коменського. В 1981 році захистив кандидатську дисертацію, а у 1995 році – докторську. Доктор фіз.-мат.наук



Онисько Василь Васильович - головний інженер інформаційно-обчислюваного центру УЖДУ

Народився в 1969 р.У 1993 році закінчив фізичний факультет Ужгородського державного університету. В 1994-1997 рр. навчався у аспірантурі при кафедрі теоретичної фізики УЖДУ.