

УДК 539.14

М. Гайсак<sup>1</sup>, М. Гнатич<sup>2</sup>, Ю. Федорняк<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Інститут електронної фізики НАН України,  
88000, м. Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна

<sup>2</sup>Інститут експериментальної фізики САН, Кошіце, Словаччина

<sup>3</sup>Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна  
e-mail: m.haysak@gmail.com

## ЕНЕРГІЯ ЗВ'ЯЗКУ СИНГЛЕТНИХ ТА ТРИПЛЕТНИХ СТАНІВ НЕГАТИВНОГО ІОНА МЮОНІЮ

У рамках адіабатичного гіперсферичного підходу проведено розрахунки нижчих двох синглетних та триплетних станів негативного іона мюонію ( $\mu^+e^-e^-$ ). У наближенні Борна – Оппенгеймера розв'язано масштабоване нерелятивістське рівняння Шредінгера. З використанням екстраполяційної формули Річардсона показано, що окрім зв'язаного синглетного стану ( $1s^2$ ) існують одночастинкові збуджені стани ( $1s2s$ ) та ( $1s3s$ ), енергія спорідненості яких рівна 0.144 та 0.053 eV, відповідно. Більше того, існують два зв'язані триплетних стани ( $1s2s$ ) та ( $2s3s$ ) з енергіями спорідненості відповідно 0.115 та 0.050 eV. Для основного стану одержана енергія рівна 0.523975 а.о., в той час як точне значення, одержане М. Фроловим варіаційним методом, становить 0.52505 а.о.

**Ключові слова:** метод гіперсферичних координат, іон мюонію, наближення Борна – Оппенгеймера.

### Вступ

У даній роботі проведені розрахунки енергетичного спектра синглетного та триплетного станів одновимірного негативного іона мюонію ( $\mu^+e^-e^-$ ) у рамках гіперсферичного адіабатичного підходу, який має ряд переваг перед іншими квантово-механічними методами розв'язування нерелятивістського рівняння Шредінгера. Таку систему можна вважати одним із легких ізотопів негативного іона водню  $\epsilon$ , звичайно, негативний іон позитронію ( $e^-e^+e^-$ ). Такі іони відіграють важливу роль у хімії негативних іонів [1]. Оскільки дана задача є сингулярною, то при визначенні енергій зв'язку розглядати мемо масштабоване нерелятивістське рівняння Шредінгера [2]. Введення масштабованої функції є еквівалентним процедурі регуляризації задачі. Виявляється, що результати для одновимірної задачі трьох тіл для ізотопів негативного іона водню співпадають із результатами для тривимірного простору, тому представляє

інтерес перевірка цього факту для легких ізотопів негативного іона водню.

Розрахунок спектральних характеристик тричастинкових атомних та молекулярних систем із кулонівською взаємодією проводиться у рамках одночастинкового наближення, наприклад, у рамках варіаційного методу [3]. У даному випадку хвильова функція системи для  $1,3S$ -станів представиться у вигляді:

$$\Psi = \frac{1}{2} (1 + \kappa P_{12}) \sum_{i=1}^N C_i \exp(-\alpha_i r_{32} - \beta_i r_{31} - \gamma_i r_{21}), \quad (1)$$

де  $C_i$ ,  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  - лінійні та нелінійні параметри, відповідно,  $P_{12}$  - оператор перестановок тотожних часток,  $\kappa = 1, -1, 0$  описує парність хвильової функції системи.

Обчисливши лінійні та нелінійні параметри, можна отримати енергію та хвильову функцію системи. Для отримання високої точності значень енергії у розкладі (1) необхідно включати значення  $N$  рівне тисячі, що дало можливість, наприклад, для енергії негативного іона позитронію зафіксувати чотирнадцять

знаків після коми [3]. До головних недоліків такого підходу слід віднести те, що розрахунки необхідно проводити для кожного квантового стану системи.

Для проведення числових розрахунків скористаємось методам гіперсферичних координат (ГСК), який не має недоліків, притаманних варіаційним методам. Метод ГСК ґрунтується на колективних змінних та дає можливість природно провести класифікацію квантових станів по серіям, які спостерігаються в експерименті. Знаходження розв'язку рівняння Шредінгера зводиться до розв'язування двох крайових задач. Перша пов'язана із обчисленням адиабатичних потенціалів, друга – з визначенням величини енергій одно- та двохчастинкових збуджень.

### Нерелятивістське рівняння Шредінгера для системи трьох частинок в одновимірному просторі

Для системи трьох взаємодіючих частинок нерелятивістське рівняння Шредінгера у одновимірному просторі в атомній системі одиниць ( $\hbar = m_e = e = 1$ ) має наступний вигляд:

$$\left[ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(x_1, x_2, x_3) - \tilde{E} \right] \Psi(x_1, x_2, x_3) = 0, \quad (2)$$

де  $m_i$ ,  $x_i$  – маса та положення  $i$ -ї частинки відповідно,  $V(x_1, x_2, x_3)$  – оператор потенціальної енергії взаємодії між частинками,  $\Psi(x_1, x_2, x_3)$  – хвильова функція системи трьох частинок,  $\tilde{E}$  – повна енергія системи частинок. Обмежимося простим кулонівським потенціалом взаємодії між частинками, який задається у вигляді:

$$V(x_1, x_2, x_3) = \frac{z_1 z_2}{|x_1 - x_2|} + \frac{z_1 z_3}{|x_1 - x_3|} + \frac{z_2 z_3}{|x_2 - x_3|}, \quad (3)$$

де  $z_i$  – заряд  $i$ -ої частинки. Вибраний вид потенціальної енергії дає змогу відокремити рух системи центру мас і тим самим спростити пошук частинних розв'язків рівняння Шредінгера (2).

Після введення відносних координат Якобі [4] та відокремлення змінних рівняння (2) є еквівалентним системі рівнянь

$$\begin{cases} \left[ -\frac{1}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V(\rho, \tau) - \varepsilon \right] \psi(\rho, \tau) = 0, \\ \left( \frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathfrak{R}^2} + \tilde{E} - \varepsilon \right) \phi(\mathfrak{R}) = 0, \end{cases} \quad (4)$$

де  $\rho$  і  $\tau$  – відносні координати Якобі, а  $\mathfrak{R}$  – координата системи центра мас, які пов'язані з координатами  $x_i$  наступними співвідношеннями:

$$\rho = d_1(x_3 - x_2), \quad \tau = d_2 \left( x_1 - \frac{m_2 x_2 + m_3 x_3}{m_2 + m_3} \right), \quad (5)$$

$$\mathfrak{R} = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2 + m_3 x_3}{M},$$

де  $d_i$  – константи, які вибираються так, щоб перетворення (5) були ортогональними,  $\mu_i$  – приведені маси, а саме:

$$\mu_1 = \frac{m_2 m_3}{d_1^2 m_{23}}, \quad \mu_2 = \frac{m_1 m_{23}}{d_2^2 M}, \quad (6)$$

$$M = m_1 + m_2 + m_3, \quad m_{23} = m_2 + m_3$$

Друге рівняння системи (4) є рівнянням другого порядку з постійними коефіцієнтами і його розв'язки добре відомі. Перше рівняння описує відносний рух системи, однак його розв'язки залежать від виду потенціальної енергії. Для певного класу модельних потенціалів це рівняння можна розв'язати в аналітичному вигляді. Для більшості реалістичних потенціалів воно розв'язується лише числовими методами. Таким чином, ми звели задачу знаходження розв'язку рівняння Шредінгера (2) до знаходження розв'язку відносного руху системи, яке є диференціальним рівнянням другого порядку у частинних похідних зі змінними коефіцієнтами.

Шукати частинні розв'язки рівняння відносного руху зручно в еліптичній системі координат. Для цього замість змінних  $\rho$  і  $\tau$  введемо змінні  $R$  та  $\alpha$ , які задаються наступним чином:

$$R = \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu} \rho^2 + \frac{\mu_2}{\mu} \tau^2}, \operatorname{tg} \alpha = \frac{\sqrt{\mu_1} \rho}{\sqrt{\mu_2} \tau}, \left( \begin{array}{l} 0 \leq R < \infty, \\ 0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2} \end{array} \right), \quad (7)$$

де  $\mu$  - довільна константа.

У змінних (7) рівняння відносного руху набуде вигляду:

$$\left[ -\frac{1}{2\mu} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( R \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) + V(R, \alpha) - \varepsilon \right] \psi(R, \alpha) = 0. \quad (8)$$

Для знаходження частинних розв'язків рівняння (8) введемо каналові функції, які є власними функціями оператора, що одержується з рівняння (8) при фіксованому значенні радіальної змінної  $R$ , а саме:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - 2R^2 V(R, \alpha) + 2R^2 U_v(R) \right) \chi_v(R, \alpha) = 0, \quad (9)$$

де  $U_v(R)$  – власні значення (адіабатичні потенціали), а  $\chi_v(R, \alpha)$  – власні функції (каналові функції). Як адіабатичні потенціали, так і каналові функції параметрично залежать від радіальної змінної ( $R$ ),  $v$  – квантове число, яке характеризує частинні розв'язки рівняння (9). Потенціальну енергію (3) в еліптичних змінних можна записати у вигляді:

$$\frac{d_2}{R\sqrt{\mu}} \left( \frac{z_2 z_3 d_1 \sqrt{\mu_1}}{d_2 |\sin \alpha|} + \frac{z_1 z_2 \sqrt{\mu_2} \sin \beta_2}{|\sin(\alpha + \beta_2)|} + \frac{z_1 z_3 \sqrt{\mu_2} \sin \beta_3}{|\sin(\alpha - \beta_3)|} \right), \quad (10)$$

$$\text{де } \operatorname{ctg} \beta_i = \frac{\sqrt{\mu_1 \mu_2}}{m_i}.$$

Як видно з (10), потенціальна енергія має полюси, які визначаються масами частинок системи. Для усунення розбіжностей скористаємось масштабованим рівнянням Шредінгера [2]. У даній роботі використаємо масштабовану функцію виду:

$$g(\alpha) = |\sin \alpha \sin(\alpha + \beta_1) \sin(\alpha - \beta_2)|, \quad (11)$$

яка задовольняє всім умовам для масштабованої функції [2].

Маючи каналові функції, їх зручно використати як базисні при знаходженні частинних розв'язків рівняння (8), а саме:

$$\psi(R, \alpha) = \sum_{\mu} f_{\mu}(R) \chi_{\mu}(R, \alpha), \quad (12)$$

де  $f_{\mu}(R)$  – коефіцієнти, які задовольняють системі диференціальних рівнянь, що слідує з (9) та (8):

$$\left[ \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( R \frac{\partial}{\partial R} \right) + U_v(R) + 2\mu E \right] f_v(R) + \sum_{\kappa} \left( 2P_{v\kappa}(R) \frac{d}{dR} + Q_{v\kappa}(R) \right) f_{\kappa}(R) = 0, \quad (13)$$

де  $P_{v\kappa}(R)$  і  $Q_{v\kappa}(R)$  - неадіабатичні потенціали, які визначаються каналовими функціями наступним чином:

$$P_{v\kappa}(R) = \left\langle \chi_v(R, \alpha) \left| \frac{\partial}{\partial R} \chi_{\kappa}(R, \alpha) \right. \right\rangle, \quad (14)$$

$$Q_{v\kappa}(R) = \left\langle \chi_v(R, \alpha) \left| \frac{\partial^2}{\partial R^2} \chi_{\kappa}(R, \alpha) \right. \right\rangle,$$

де дужками  $\langle | \rangle$  позначено інтегрування за кутовою змінною.

Розв'язуючи систему диференціальних рівнянь (13), отримуємо енергії та радіальну частину хвильової функції, а тим самим і відносну хвильову функцію (12). Таким чином, знаходження частинних розв'язків рівняння відносного руху зведено до знаходження розв'язків граничної задачі (9) за кутовою змінною та граничної задачі (13) за радіальною змінною.

### Адіабатичні потенціали та каналові функції

Рівняння (9) має аналітичний розв'язок лише при радіальній змінній рівній нулеві. Частинні розв'язки у цьому випадку є тригонометричні функції. При рівних масах другої та третьої частинок потенціальна енергія є періодичною функцією з періодом  $\pi$  та  $\pi/2$ , тому і частинні розв'язки можна вибрати

періодичними функціями з такими ж періодами.

У якості базисних функцій для синглетного та триплетного станів вибираються ортонормовані функції на інтервалі  $[0, \pi/2]$ :

$$\begin{aligned} \varphi_n(\alpha) &= \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cos(2(2n-1)\alpha) \right\}; \\ \phi_m(\alpha) &= \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sin(4m\alpha) \right\}; \quad n, m = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (15)$$

Каналові функції шукаємо у вигляді ряду за базисними функціями (15):

$$\chi_\nu(R, \alpha) = \sum_{k=1}^N C_{k\nu}(R) \varphi_k(\alpha), \quad (16)$$

де  $C_{k\nu}(R)$  - невідомі коефіцієнти. Підставляючи (16) у (9), одержимо однорідну систему алгебраїчних рівнянь, розв'язок якої дає як адіабатичні потенціали, так і коефіцієнти  $C_{k\nu}(R)$ , а тим самим і каналові функції (16).

Отримані адіабатичні потенціали та каналові функції дають змогу визначити енергетичний спектр, розв'язавши систему радіальних рівнянь (13). У даній роботі обмежимося наближенням Борна-Оппенгеймера при визначенні енергій основних та збуджених станів. Суть наближення Борна-Оппенгеймера полягає у нехтуванні залежністю каналової функції від гіперрадіуса, що призводить до відсутності зв'язку між каналами у системі (13).

### Чисельні розрахунки та обговорення результатів

Чисельні розрахунки адіабатичних потенціалів проводились при розмірностях базису, що дорівнює 10, 20 та 40. Результати розрахунків для синглетних та триплетних термів приведено на рисунках 1 та 2.

Наявність масштабованого множника призводить до того, що задача на власні значення та власні функції стає узагальненою, яка має вигляд:

$$Ax = \lambda Bx, \quad (17)$$

де  $A$  та  $B$  квадратні матриці, розмірності яких співпадають з розмірністю базису, на якому діагоналізується гамільтоніан системи (9),  $\lambda$  - власні значення, а  $x$  - власні вектори.

$U_\nu(R)$  (a.o.)

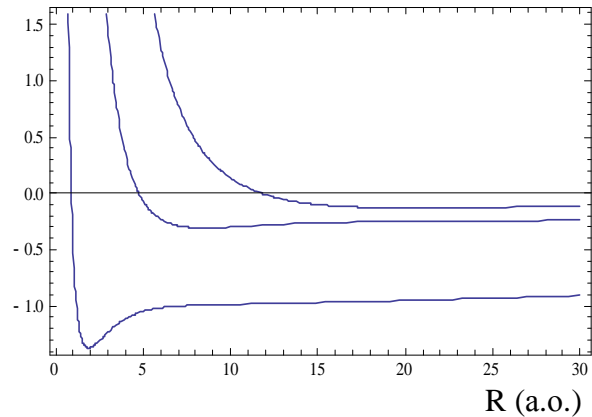


Рис. 1. Залежність адіабатичних термів для нижчих трьох синглетних серій негативного іона мюонію, що одержані при розмірності базису 40.

$U_\nu(R)$  (a.o.)

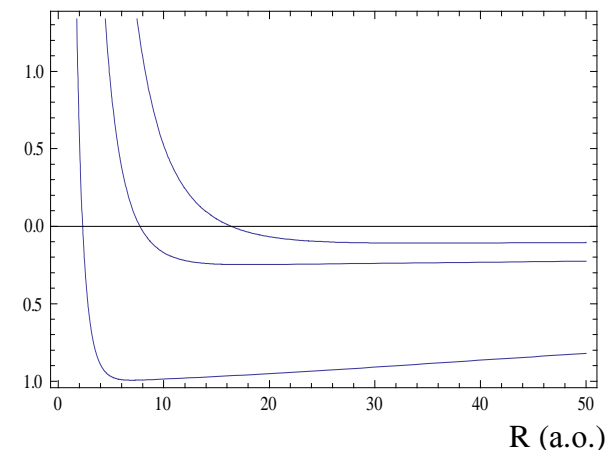


Рис. 2. Залежність адіабатичних термів для нижчих трьох триплетних серій негативного іона мюонію, що одержані при розмірності базису 40.

У табл. 1 наведені значення енергій зв'язку нижчих двох серій для синглетних та триплетних станів негативного іона мюонію, які отримані при розмірності базису 10, 20 та 40. Це дало змогу застосувати формулу Річардсона [7] для екстраполяції результатів на базис більшої розмірності.

**Значення енергій (-E а.о.), середніх та середньоквадратичних радіусів нижчих двох серій негативного іона мюонію для синглетних та триплетних станів**

Стани системи	20	40	Екстра-поляція	$\Delta E(eV)$	$\langle r \rangle$ а.о.	$\overline{\langle r^2 \rangle}$ а.о.	Значення (E) в інших підходах
$^1S(1s^2)$	0.516026	0.520489	0.523975	0.718	4.76	5.41	0.52505 [3] 0.516313 [5] 0.510832 [6]
$^1S(1s2s)$	0.449831	0.475351	0.502907	0.144	15.30	16.19	
$^1S(1s3s)$	0.414164	0.454046	0.499562	0.053	21.51	23.11	
$^3S(1s2s)$	0.463783	0.482389	0.501826	0.115	12.65	13.42	
$^3S(1s3s)$	0.426531	0.460752	0.499445	0.050	19.54	21.02	
$^3S(1s4s)$	0.396352	0.441988	0.495301		25.05	27.09	

Отримані хвильові функції дозволили провести розрахунки середніх та середньоквадратичних радіусів як в основних, так і збуджених станах. Одержані значення енергій порівнюються з наявними розрахунками, проведеними для тривимірного простору в інших підходах, зокрема у варіаційному методі з використанням нелінійних параметрів [3] та  $K$  - гармонік [5].

Аналіз числових розрахунків показує, що отримані результати добре узгоджуються із наявним точним розрахунком, проведеним варіаційним методом [3]. Відносна похибка одержаних результатів для синглетного основного стану складає менше трьох десятих відсотка. Зауважимо, що всі наведені в таблиці результати розрахунків, одержані в інших підходах, проведені для реального тривимірного простору.

Цікавим є факт, що після застосування екстраполяції квантові стани  $1s2s$  та  $1s3s$  як для синглетного, так і для триплетного станів лежать під порогом іонізації атома

мюонію ( $E_I=0.4976$  а.о.). Енергія спорідненості  $\Delta E = - (E_{3e} - E_I)$  зв'язаних  $^{1,3}S$ -станів наведена в табл. 1. Цей факт вказує на можливість існування зв'язаного триплетного стану у ізотопів негативного іона водню. Питання існування такого стану піднімалось у роботах [8, 9].

**Висновки**

Одержані результати показують, що використання масштабованого рівняння Шредінгера [2] у гіперсферичному підході [10] відкриває нові можливості для врахування кутових та радіальних кореляцій у малочастинкових квантових системах атомної і молекулярної фізики та фізики твердого тіла.

Для одержання більш точних результатів необхідно здійснити вихід за рамки наближення Борна-Оппенгеймера, а також оцінити внесок неадіабатичних потенціалів.

**СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ**

1. Гольданский В.И., Шантарович В.П. Физика XX века. Развитие и перспективы. – Москва: Наука, 1984.
2. Nakatsuji H. // Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol.93. - N3. – P. 030403.
3. Frolov A.M., Smith V.H., Jr. // Phys.Rev. – 1994. - №2. - A49.
4. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. – Москва: Мир, 1982. - Т.3.

5. Chattopadhyay R., Das T.K. // Phys. Rev. – 1997. - N2. - A56. – P. 1281.
6. Barham M., Darewych J. // arXiv: 0706.3017v1 [physics. atom-ph] (2007).
7. Шехтгер Х., Анализ методов дискретизации для обыкновенных дифференциальных уравнений. – Москва: Мир, 1978.
8. Hylleraas E. // Astrophysica Norvegica. – 1964. – Vol.9. - N 32. – P. 345.
9. Rau A.R.P. // J. Astrophys. – 1996. - Abstr. 17. – P. 113.
10. Lin C.D. // Phys. Rept.. – 1995. – Vol.257. – N 1.

Стаття надійшла до редакції 29.05.2011

M. Haysak<sup>1</sup>, M. Hnatich<sup>2</sup>, Yu. Fedornyak<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Electron Physics NASc of Ukraine, Uzhhorod

<sup>2</sup>Institute of Experimental Physics SASc, Kosice

<sup>3</sup>Uzhhorod National University, Uzhhorod

e-mail: m.haysak@gmail.com

## THE BOUNDING ENERGY FOR SINGLET AND TRIPLET STATES OF THE NEGATIVE MUONIUM ION

Calculations were performed for two singlet and triplet states of negative muonium ion ( $\mu^+e^-e^-$ ) in the framework of adiabatic hyperspherical approximation. In the Born-Oppenheimer approach scaling non-relativistic Schrödinger equation was solved. Application of Richardson extrapolation equation revealed that in addition to bound singlet state ( $1s^2$ ) one-particle excited states ( $1s2s$ ) and ( $1s3s$ ) exist. The affinity energy value for these states is 0.144 and 0.53 eV. Moreover, two bound triplet states - ( $1s2s$ ) and ( $2s3s$ ) – exist with affinity energy values equal to 0.115 та 0.050 eV. The energy value of 0.523975 a.u. for the ground state was received while the precise value obtained by M. Frolov in variational method is equal to 0.52505 a.u.

**Key words:** hyperspherical coordinates method, adiabatic potentials, muonium ion, Born-Oppenheimer approach.

М. Гайсак<sup>1</sup>, М. Гнатич<sup>2</sup>, Ю. Федорняк<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт электронной физики НАН Украины,

88000, Ужгород, ул. Университетская, 21, Украина

<sup>2</sup>Институт экспериментальной физики САН, Кошице, Словакия

<sup>3</sup>Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина

## ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ СИНГЛЕТНЫХ И ТРИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА МЮОНИЯ

В рамках адиабатического гиперсферического подхода проведены расчеты низших двух синглетных и триплетных состояний отрицательного иона мюония ( $\mu^+e^-e^-$ ). В приближении Борна – Оппенгеймера решено масштабированное нерелятивистское уравнение Шредингера. С использованием экстраполяционной формулы Ричардсона показано, что, кроме связанного синглетного состояния ( $1s^2$ ) существуют одночастичные возбужденные состояния ( $1s2s$ ) и ( $1s3s$ ), энергия сродства которых равна 0.144 та 0.053 eV, соответственно. Более того, существуют два связанных триплетных состояния ( $1s2s$ ) и ( $2s3s$ ) с энергиями сродства соответственно 0.115 и 0.050 eV. Для основного состояния полученная энергия составляет 0.523975 а.е., в то время как точное значение, полученное М. Фроловым вариационным методом, равно 0.52505 а.е.

**Ключевые слова:** метод гиперсферических координат, ион мюония, адиабатический потенциал, приближение Борна – Оппенгеймера.