

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P4-93-43

М. Динейхан\*, Г. В. Ефимов

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ ТРЕХТЕЛЬНОЙ  
КУЛОНОВСКОЙ СИСТЕМЫ  
В ОСЦИЛЛЯТОРНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Направлено в журнал «Ядерная физика»

---

\*Институт ядерной физики АН РК, Алма-Ата

1993

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Задача трех тел с кулоновским взаимодействием является одной из классических проблем квантовой механики. Фок первым предложил метод [1] решения уравнения Шредингера для трехтельной системы с кулоновским взаимодействием на примере атома гелия. Этот метод стал одним из основных современных подходов к решению уравнения Шредингера в проблеме трех тел. В настоящее время существуют два метода решения уравнения Шредингера для трехтельной системы: метод адиабатического представления и вариационный метод (см., например, [2,3]).

Вариационный метод, позволяющий выполнять высокоточные расчеты трехтельной кулоновской системы, алгоритмизован и реализован в виде комплекса пакетов программ на ЭВМ. В рамках вариационного метода успешно вычисляются неадиабатические поправки к уровню энергии мезомолекул, с высокой точностью определяется энергия связи и другие параметры квантомеханических систем, таких, как атом, молекула и ядро. Для улучшения сходимости при любых значениях масс и зарядов трехтельной системы используются разложения волновых функций по различным базисным состояниям: метод хиллераасовского базиса [4], метод экспоненциального разложения [5], метод разложения в сфероидальных координатах [6] и др.

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

Интерес к вариационным расчетам мезомолекул, которые практически прекратились после 1976 года, был возрожден в работе [7].

Тем не менее, вариационный метод имеет определенные недостатки. Не существует регулярных предписаний для выбора базисных функций. В вариационном методе отсутствуют прямые критерии точности аппроксимации и, вообще говоря, отсутствует возможность вычисления поправок к основному вариационному приближению. Кроме того, нарушается каноническая структура гамильтониана.

Определение собственных значений гамильтониана трехтельной кулоновской системы численными методами с высокой точностью, конечно, важно. Однако для

понимания динамики образования связанных состояний трехтельной кулоновской системы немаловажную роль играет качественное изучение зависимости собственных значений гамильтониана от масс и зарядов частиц системы. Так что имеет смысл создание аналитических методов, позволяющих с процентной точностью исследовать эти зависимости.

В данной работе сформулирован метод вычисления энергии основного состояния трехтельной системы с кулоновским взаимодействием.

В работе [8] для вычисления энергии связи системы, поведение которой определяется уравнением Шредингера, предложен метод, названный осцилляторным представлением и основанный на идеях и методах квантовой теории поля. В квантовой теории скалярного поля невзаимодействующие частицы описываются гамильтонианом, который является совокупностью осцилляторов, а взаимодействие задается произведением полевых операторов типа  $\phi^4$ . Такой гамильтониан содержит расходящийся вклад, который связан с расходимостью пропагатора скалярного поля в нуле:

$$D(0) \sim \hbar \int \frac{d^4 k}{m^2 + k^2}.$$

Подчеркнем, что это наивысшая расходимость в перенормируемой теории типа  $\phi^4$ . Эта расходимость может быть устранена перенормировкой массы скалярной частицы и энергии вакуума. Такая перенормировка эквивалентна постулату, что полевые операторы в гамильтониане взаимодействия должны быть записаны в форме нормального произведения по операторам рождения и уничтожения частиц. Можно сказать, что нормальное упорядочение гамильтониана означает, по существу, учет главного квантового вклада в формирование основного состояния системы, т.е. вакуума.

Идея введения понятия нормального произведения в нерелятивистскую квантовую механику не нова (см., например, [9]), однако вопрос состоит в том, какие принципы должны быть положены в основу реализации этой идеи. Если основное состояние квантовой системы является связанным, то волновая функция этого состояния может быть разложена по осцилляторному базису в представлении, в котором канонические переменные координата и импульс выражены через операторы рождения и уничтожения  $a^+$  и  $a$ . Возникает вопрос, как наилучшим образом определить частоту этого осциллятора. На языке гамильтонианова формализма задача вычисления энергии основного состояния может быть сформулирована следующим образом. Пусть гамильтониан системы задан. Из гамильтониана выделим чисто

осцилляторную часть с некоторой, пока неизвестной частотой  $\omega$  и представим этот гамильтониан в форме  $H_0 = \omega a^\dagger a$ , а оставшуюся часть, т.е. гамильтониан взаимодействия, представим в форме нормального произведения по операторам  $a^\dagger$ ,  $a$  и потребуем, чтобы этот гамильтониан взаимодействия не содержал какие-либо слагаемые, квадратичные по каноническим переменным. Это условие определяет частоту осциллятора.

Однако при реализации этой идеи мы сталкиваемся со следующей проблемой. Асимптотическое поведение кулоновской волновой функции на больших расстояниях не совпадает с гауссовским асимптотическим поведением осцилляторной волновой функции. Поэтому разложение кулоновских волновых функций по осцилляторному базису, хотя и корректно математически, с практической точки зрения ведет к рядам, сходящимся не достаточно быстро. Поэтому перед тем, как применить метод осцилляторного представления, в исходном уравнении Шредингера следует провести замену переменных таким образом, чтобы преобразованное уравнение обладало решениями, имеющими гауссовскую асимптотику. В кулоновской системе такая замена осуществляется переходом к четырехмерному пространству, где волновая функция кулоновской системы становится осцилляторной. В одной из ранних работ [10] Шредингер отметил существование такого преобразования, при котором кулоновская система в трехмерном пространстве переходит в осцилляторную в четырехмерном пространстве. Кустаанхейм и Стиефел [11] выписали явный вид этого преобразования и использовали его при решении классической проблемы Кеплера. С помощью этого преобразования (см., например, [12]) кулоновская задача в трехмерном пространстве переходит в осцилляторную в четырехмерном вспомогательном пространстве.

В данной работе в рамках метода осцилляторного представления рассмотрена кулоновская задача трех тел. Работа устроена следующим образом. Во втором параграфе проводится переход от трехмерного к четырехмерному пространству в трехтельной кулоновской задаче. Переход к четырехмерному вспомогательному пространству осуществляется методом, изложенным в [8]. Учет отталкивания в нуле по одной из якобиевых координат осуществляется переходом к пространству высшей размерности [8,13]. При переходе в  $d$ -мерное пространство потенциал отталкивания превращается эффективно в потенциал притяжения, размерность пространства  $d$  рассматривается как вариационный параметр. В третьем параграфе изложен метод осцилляторного представления. В четвертом параграфе гамильтониан трехтельной задачи записывается в осцилляторном представлении, и

формулируется метод вычисления энергии основного состояния. В пятом параграфе устанавливается точность оценки энергии основного состояния трехтельной системы в нулевом приближении осцилляторного представления. В шестом параграфе рассмотрена зависимость энергии основного состояния трехтельной кулоновской системы с зарядами  $(\pm 1, \mp 1, \pm 1)$  от масс, что является одной из основных проблем кулоновской задачи трех тел (подробности см. в [14,15]), и определена граница устойчивости данной системы. Зависимость энергии связи системы от масс частиц исследовалась в [16], а в [17] проведены численные расчеты, касающиеся установления границ стабильности. Более детальные исследования по установлению границ стабильности трехтельной кулоновской системы проведено в [14]. Определяя зависимость энергии основного состояния системы от масс и зарядов частиц, можно установить границы стабильности относительно масс и зарядов частиц системы. Для систем  $(pe^-C^+)$ ,  $(A^+e^-e^+)$  и  $(pB^-e^-)$  вычислены значения критических масс  $M_C = 1.945m_e$ ,  $M_A = 4.350m_e$  и  $M_B = 1.575m_e$ . Эти системы рассматривались в работах [14, 22-24], где установлены только лишь ограничения на значения критической массы.

В методе осцилляторного представления существует возможность вычислить энергию основного состояния трехтельной кулоновской системы с любой точностью, учитывая высшие порядки теории возмущений по степеням гамильтониана взаимодействия. Результаты вычислений показывают, что в нулевом приближении отклонения от точного значения составляют меньше одного процента, т.е. ряд теории возмущений является достаточно быстро сходящимся. Этот метод дает возможность определить энергии основного состояния трехтельной кулоновской системы для любых значений масс и зарядов частиц системы. В рамках нашего метода можно изучать не только трехтельные системы, но и любые малотельные системы.

## 2. ГАМИЛЬТониАН ТРЕХ ТЕЛ ДЛЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

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

$$H\Psi = E\Psi, \quad (1)$$

где гамильтониан записывается в виде

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

Введем координаты Якоби  $\{\vec{x}, \vec{y}\}$  стандартным образом:

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= a_1 \vec{x} + b_2 \vec{y} + \vec{R} \\ \vec{r}_2 &= -b_1 \vec{y} + \vec{R} \\ \vec{r}_3 &= b_2 \vec{y} - a_3 \vec{x} + \vec{R}. \end{aligned}$$

Гамильтониан в новых переменных запишется в виде

$$H = \frac{(\vec{p}_x)^2}{2M} + \frac{\mu(\vec{p}_y)^2}{2M^2} + \frac{Z_1 Z_3 e^2}{|\vec{x}|} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{y} + a_1 \vec{x}|} - \frac{Z_3 Z_2 e^2}{|\vec{y} - a_3 \vec{x}|}. \quad (3)$$

Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned} a_3 &= \frac{m_1}{m_1 + m_3}; & a_1 &= \frac{m_3}{m_1 + m_3}; & a_1 + a_3 &= 1; \\ b_1 &= \frac{m_1 + m_3}{m_1 + m_2 + m_3}; & b_2 &= \frac{m_2}{m_1 + m_2 + m_3}; & b_1 + b_2 &= 1; \\ M &= \frac{m_1 m_3}{m_1 + m_3}; & \mu &= \frac{(m_1 + m_3) m_2}{m_1 + m_2 + m_3}. \end{aligned} \quad (4)$$

В выражении для гамильтониана (3) член кинетической энергии полной системы опущен. Проведем замену переменных:

$$\vec{x} = \frac{1}{Mc^2} \vec{r}; \quad \vec{y} = \frac{1}{\sqrt{M\mu}c^2} \vec{s}.$$

После упрощений гамильтониан (3) выражается через безразмерные переменные  $\{\vec{r}, \vec{s}\}$  в следующем виде:

$$H = Mc^4 \left\{ \frac{1}{2} \vec{p}_r^2 + \frac{1}{2} \vec{p}_s^2 + \frac{Z_1 Z_3}{|\vec{r}|} - \frac{Z_1 Z_2 c}{|\vec{s} + c_1 \vec{r}|} - \frac{Z_2 Z_3 c}{|\vec{s} - c_3 \vec{r}|} \right\}, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} c &= c_1 + c_3; \\ c_1 &= \frac{1}{m_1} \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{(m_1 + m_2 + m_3)}}; & c_3 &= \frac{1}{m_3} \sqrt{\frac{m_3 m_2 m_1}{(m_1 + m_2 + m_3)}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Энергия связи трехтельной системы с кулоновским взаимодействием в единицах  $Me^4$  имеет вид

$$E = -\frac{1}{2}Me^4U, \quad (7)$$

где  $U$  - безразмерный параметр. В этой энергетической шкале энергия определяется параметром  $U$ :

Наша задача состоит в том, чтобы вычислить энергию основного состояния  $E$  гамильтониана (5). В этом случае волновая функция системы  $\Psi = \Psi(r, s, \phi)$  зависит только от трех переменных:  $r = \sqrt{r^2}$ ,  $s = \sqrt{s^2}$  и угла  $\phi$  между векторами  $\vec{r}$  и  $\vec{s}$ . Тогда уравнение Шредингера записывается в форме

$$h\Psi = 0, \quad (8)$$

где

$$h = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{2}{s}\frac{\partial}{\partial s}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r^2} + \frac{1}{s^2}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \text{ctg}\phi\frac{\partial}{\partial \phi}\right) + V_1 \quad (9)$$

и

$$V_1 = \frac{Z_1 Z_3}{r} + \frac{U}{2} - \frac{cZ_3 Z_2}{\sqrt{s^2 + c_3^2 r^2 - 2c_3 r s \cos \phi}} - \frac{cZ_2 Z_1}{\sqrt{s^2 + c_1^2 r^2 + 2c_1 r s \cos \phi}}$$

Будем рассматривать переменные  $r, s$  и  $\phi$  в гамильтониане  $h$  (9) как независимые. При таком предположении гамильтониан  $h$  является неэрмитовым по переменной  $\phi$ , поскольку оператор

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

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

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

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

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

где введена переменная

$$u = \ln\left(\operatorname{tg}\frac{\phi}{2}\right), \quad -\infty < u < \infty.$$

Таким образом, оператор

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

является эрмитовым.

Эрмитов гамильтониан имеет вид

$$h = -\frac{1}{2\cosh^2 u} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{2\cosh^2 u} \left( \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{2}{s} \frac{\partial}{\partial s} \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r^2} + \frac{1}{s^2} \right) \frac{d^2}{du^2} + V, \quad (10)$$

где

$$V(r, s, u) = \frac{1}{\cosh^2 u} \left[ \frac{Z_1 Z_3}{r} + \frac{U}{2} - \frac{c Z_3 Z_2}{\sqrt{s^2 + c_3^2 r^2 - 2c_3 r s \operatorname{stanhu}}} - \frac{c Z_2 Z_1}{\sqrt{s^2 + c_1^2 r^2 + 2c_1 r s \operatorname{stanhu}}} \right]$$

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

Для вычисления энергии основного состояния гамильтониана (10) в рамках метода осцилляторного представления [8] волновая функция системы разлагается по осцилляторному базису. Однако разложение кулоновской волновой функции по осцилляторному базису, как говорилось выше, ведет к ряду, сходящемуся не достаточно быстро. Поэтому произведем замену переменных таким образом, чтобы асимптотическое поведение волновой функции кулоновской задачи совпадало с гауссовской асимптотикой. Следуя [8], проведем замену переменных:

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

При этой замене переменных для кинетической части гамильтониана (10) имеем

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

Оператор

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

можно рассматривать как радиальную часть четырехмерного лапласиана  $\square_Q$ . Поскольку волновая функция  $\Psi$  системы зависит только от  $Q$ ,  $q$  и  $u$ , действие операторов  $X_Q$  и  $X_q$  на  $\Psi(Q, q, u)$  можно отождествить с действием операторов  $\square_Q$ ,  $\square_q$ ,



а  $Q_\mu$  и  $q_\mu$  можно рассматривать как векторы в четырехмерном вспомогательном пространстве  $R_4$  (см. также [11,12]).

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

$$\begin{aligned} 0 < \phi < \pi & \quad \phi \Rightarrow u = \ln(\operatorname{tg} \frac{\phi}{2}) & \quad -\infty < u < \infty, \\ 0 < s < \infty & \quad s \Rightarrow q = \sqrt{s} & \quad 0 < q < \infty, \\ 0 < r < \infty & \quad r \Rightarrow Q = \sqrt{r} & \quad 0 < Q < \infty, \end{aligned} \quad (11)$$

имеет вид

$$\begin{aligned} h &= \frac{q^2}{\cosh^2 u} \frac{P_Q^2}{4} + \frac{Q^2}{\cosh^2 u} \frac{P_q^2}{4} + \left( \frac{Q^2}{q^2} + \frac{q^2}{Q^2} \right) P_u^2 + V, \\ V &= \frac{2q^2 Z_1 Z_3}{\cosh^2 u} + \frac{U Q^2 q^2}{\cosh^2 u} - \frac{2c Q^2 q^2 Z_1 Z_2}{\cosh^2 u \sqrt{q^4 + c_1^2 Q^4 - 2c_1 q^2 Q^2 \tanh u}} \\ &\quad - \frac{2c Q^2 q^2 Z_2 Z_3}{\cosh^2(u) \sqrt{q^4 + c_2^2 Q^4 + 2c_2 q^2 Q^2 \tanh u}}, \end{aligned} \quad (12)$$

где  $Q = \sqrt{Q_\mu^2}$ ,  $q = \sqrt{q_\mu^2}$  и  $Q_\mu$ ,  $q_\mu$  - векторы в четырехмерном вспомогательном пространстве,  $\square_Q = -P_Q^2$ ,  $\square_q = -P_q^2$ . Волновая функция основного состояния зависит только от трех независимых переменных  $Q$ ,  $q$  и  $u$ , т.е.  $\Psi = \Psi(Q, q, u)$ .

Волновая функция в осцилляторном представлении должна правильно описывать поведение системы как на больших, так и на малых расстояниях. Остановимся теперь на проблеме малых расстояний. Из выражения (10) видно, что потенциал взаимодействия трехтельной кулоновской системы содержит потенциал отталкивания по переменной  $r$ . Минимум потенциала взаимодействия не находится в точке  $r = 0$ , и волновая функция имеет максимум по  $r$  в некоторой точке  $r_{max} > 0$ . В методе осцилляторного представления учет отталкивания в нуле осуществляется переходом к пространству высшей размерности [8,13]. Эффективно при переходе в  $d$ -мерное пространство потенциал отталкивания превращается в потенциал притяжения, а размерность пространства  $d$  рассматривается как добавочный вариационный параметр.

Математически это осуществляется следующим образом. Волновая функция  $\Psi$  зависит только от радиуса  $Q = \sqrt{Q_\mu^2}$  в  $R_4$ . Поэтому

$$-\frac{1}{2} \square_Q \Psi(Q) = \left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{Q^{3/2}} \left( \frac{\partial}{\partial Q} \right)^2 Q^{3/2} + \frac{L_4(L_4 + 1)}{2Q^2} \right] \Psi(Q), \quad (13)$$

где  $L_d = (d-3)/2$ . Волновую функцию  $\Psi(Q)$  представим в виде

$$\Psi(Q) = Q^{(d-4)/2} \Phi_d(Q), \quad (14)$$

где  $d$ -некоторый параметр. Подставляя (14) в (13), имеем

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \square_Q \Psi(Q) &= Q^{(d-4)/2} \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{d-1}{Q} \frac{\partial}{\partial Q} \right) + \frac{L_d(L_d+1)}{2Q^2} - \frac{L_d(L_d+1)}{2Q^2} \right] \Phi_d(Q) \\ &= Q^{(d-4)/2} \left[ -\frac{1}{2} \Delta_d - \frac{d(d-4)}{4Q^2} \right] \Phi_d(Q), \end{aligned} \quad (15)$$

поскольку оператор

$$X_d = \left( \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{d-1}{Q} \frac{\partial}{\partial Q} \right)$$

является радиальной частью лапласиана  $\Delta_d$  в пространстве  $R_d$ . Еще раз подчеркнем, что эти формулы справедливы в случае, когда волновая функция  $\Psi$  системы зависит только от  $Q > 0$ ,  $q > 0$  и  $-\infty < u < \infty$ . Таким образом,  $Q_j$  можно рассматривать как вектор в  $d$ -мерном вспомогательном пространстве  $R_d$ . Из (15) видно, что в этом представлении в пространстве  $R_d$  эффективно возник потенциал притяжения.

Итак, гамильтониан трехтельной кулоновской системы для основного состояния окончательно записывается в виде

$$h = \frac{q^2}{\cosh^2 u} \frac{P_Q^2}{4} + \frac{Q^2}{\cosh^2 u} \frac{P_q^2}{4} + \left( \frac{Q^2}{q^2} + \frac{q^2}{Q^2} \right) P_u^2 - \frac{d(d-4)}{16 \cosh^2 u} \frac{q^2}{Q^2} + V, \quad (16)$$

где  $Q_j$ -вектор в  $d$ -мерном пространстве, а  $V$  определено в (12).

В заключение этого пункта отметим следующее. Использование в нашем подходе  $d$ -мерного пространства  $R_d$  означает, что для основного состояния решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (12) эквивалентно решению уравнения Шредингера с гамильтонианом (16) в пространстве  $R_d$ . С математической точки зрения это значит, что волновая функция основного состояния и ее орбитальные возбуждения зависят только от радиальной переменной  $Q^2 = r$ :

$$\Psi_0 = e^{-\frac{Q^2}{2}} = e^{-\frac{r}{2}}.$$

Здесь для простоты опущен нормировочный фактор. Радиальные возбуждения можно записать в виде

$$\Psi_n = N_n (a_j^\dagger a_j^\dagger)^n \Psi_0 = P_n^{(D)}(r) e^{-\frac{r}{2}}.$$

где  $P_n^{(D)}(r)$  — полином  $n$ -го порядка, а  $a_j^\pm$  — оператор рождения и  $D = d/2$ . Условие ортогональности имеет вид

$$\left( \Psi_n, \Psi_m \right) = \int_0^\infty \frac{dr r^{D-1} e^{-r}}{\Gamma(D)} P_n^{(D)}(r) P_m^{(D)}(r) = \delta_{nm}.$$

Видно, что это условие справедливо для любых положительных  $D$ . Так, можно сказать, что мы ищем решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (16) в класс полиномов, ортогональных на интервале  $0 < r < \infty$  с весовой функцией

$$\rho(r) = \frac{r^{D-1} e^{-r}}{\Gamma(D)}.$$

Размерность  $d$  пространства  $R_d$  может рассматриваться как дополнительный вариационный параметр.

Величина  $U$ , определяющая энергию основного состояния исходной системы, входит как параметр в гамильтониан  $h$  (16), поэтому наша задача формулируется следующим образом. Мы должны найти основное состояние гамильтониана (16), т.е. решить уравнение Шредингера:

$$h\Psi = \varepsilon\Psi, \quad (17)$$

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

$$\varepsilon = \varepsilon(U).$$

Согласно уравнению Шредингера (8), эта энергия равна нулю, так что уравнение

$$\varepsilon(U) = 0$$

определяет параметр  $U$ . Тогда, согласно (7), энергия трехтельной системы с кулоновским взаимодействием равна

$$E = -\frac{1}{2} M \alpha^2 U.$$

### 3. ОСЦИЛЛЯТОРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Метод основан на идеях и методах квантовой теории скалярного поля и состоит в следующем. Любое основное связанное состояние системы всегда может быть аппроксимировано волновой функцией некоторого осциллятора. Возникает вопрос, каким образом выбрать этот осциллятор, и здесь мы воспользуемся идеями квантовой теории поля.

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

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

Естественно считать, что квадратичный "свободный" гамильтониан  $H_0$  описывает основное состояние, если константа связи  $g$  мала. Однако в формирование основного состояния основной вклад, возникающий благодаря взаимодействию  $H_I$  при любой величине константы связи  $g$ , дают так называемые "диаграммы-головастики", или диаграммы "кактусного" типа на языке теории возмущений. Эти диаграммы пропорциональны  $D(0) = \langle 0|\phi(0)\phi(0)|0 \rangle$  и в квантовой теории поля составляют основную расходимость. Вклад этих диаграмм можно учесть перенормировкой массы скалярной частицы  $m$  и энергии вакуума, которая в квантовой теории поля обычно не рассматривается. Только после выделения из гамильтониана взаимодействия этих вкладов можно считать, что квадратичный свободный гамильтониан описывает основное состояние системы, а гамильтониан взаимодействия, содержащий полевые операторы в степенях три и более, дает малые добавки при малой константе связи. В формализме квантовой теории поля эта задача решается путем введения понятия нормального произведения, если использовать представление полевых операторов через операторы рождения и уничтожения. Требование, что гамильтониан взаимодействия, во-первых, должен содержать полевые операторы в степени более двух и, во-вторых, должен быть записан в форме нормального произведения операторов, эффективно приводит к учету этих основных вкладов.

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

Вводимое нами *осцилляторное представление* является реализацией этого представления квантовой теории поля в квантовой механике. Основную идею осцилляторного представления продемонстрируем на примере уравнения Шредингера в пространстве  $R_3$  (детали см. в [8]):

$$H\Psi = \left(\frac{\vec{p}^2}{2} + V(r)\right)\Psi = E\Psi, \quad (18)$$

где предполагается для простоты, что потенциал  $V(r)$  имеет минимум при  $r = 0$  и допускает существование связанного состояния. Наша задача заключается в том, чтобы найти энергию основного состояния системы, описываемой гамильтонианом  $H$ . Выделим в гамильтониане чисто осцилляторную часть:

$$H = \frac{1}{2}(\vec{p}^2 + \omega^2 \vec{r}^2) + [V(r) - \frac{\omega^2}{2} \vec{r}^2], \quad (19)$$

где  $\omega$ -свободный параметр. Канонические переменные осциллятора  $(\vec{p}, \vec{r})$  выразим через операторы рождения  $a^+$  и уничтожения  $a$ :

$$\vec{x} = \frac{\vec{a} + \vec{a}^+}{\sqrt{2\omega}}, \quad \vec{p} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \frac{\vec{a} - \vec{a}^+}{i}, \quad [a_i, a_j^+] = \delta_{ij}. \quad (20)$$

Введем понятие нормального произведения. Эта идея не нова (см., например, [9]), но вопрос состоит в том, как реализуется эта идея. Потребуем, чтобы гамильтониан взаимодействия не содержал каких-либо слагаемых, квадратичных по каноническим переменным. Это требование будем называть *условием осцилляторного представления*. Для этого подставим в потенциал  $V(r)$  представление (20) и перейдем к нормальному упорядочению операторов рождения и уничтожения

$$\begin{aligned} V(r) &= \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{V}(k^2) \exp(i\vec{k} \frac{\vec{a} + \vec{a}^+}{\sqrt{4\omega}}) \\ &= \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{V}(k^2) \exp(-\frac{\vec{k}^2}{4\omega}) : \exp(i\vec{k} \frac{\vec{a} + \vec{a}^+}{\sqrt{4\omega}}) :, \end{aligned}$$

где  $:*$  - знак нормального упорядочения. Потребуем, чтобы

$$\begin{aligned} V(r) - \frac{\omega^2}{2} \vec{x}^2 &= \left[ \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{V}(k^2) \exp(-\frac{\vec{k}^2}{4\omega}) - \frac{\omega^2}{4} \right] \\ &+ \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{V}(k^2) \exp(-\frac{\vec{k}^2}{4\omega}) : (\exp(i\vec{k}\vec{x}) - 1 + \frac{\vec{k}^2}{2} \vec{x}^2) :, \end{aligned}$$

что справедливо, если коэффициент при  $x^2$  равен нулю

$$\frac{\omega^2}{2} - \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{V}(k^2) \frac{\vec{k}^2}{2} \exp\left(-\frac{\vec{k}^2}{4\omega}\right) = 0. \quad (21)$$

Это уравнение определяет свободный параметр  $\omega$ .

Тогда гамильтониан системы имеет вид

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_I + E_0, \\ H_0 &= \omega \vec{a}^\dagger \vec{a}, \\ E_0 &= \frac{\omega^2}{4} + \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{V}(k^2) \exp\left(-\frac{\vec{k}^2}{4\omega}\right), \\ H_I &= \int \frac{d\vec{k}}{2\pi} \tilde{V}(k^2) \exp\left(-\frac{\vec{k}^2}{4\omega}\right) : \left( \exp(i\vec{k}\vec{x}) - 1 + \frac{\vec{k}^2}{2} \vec{x}^2 \right) :, \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь  $H_0$ -гамильтониан свободного осциллятора,  $E_0$  определяет уровень энергии в нулевом приближении и  $H_I$ -гамильтониан взаимодействия в форме нормального произведения, причем  $H_I = O(:\vec{x}^4:)$  при  $x^2 \rightarrow 0$ .

Легко показать, что уравнение для  $\omega$  (21), полученное из условия осцилляторного представления, совпадает с уравнением, определяющим минимум энергии основного состояния  $E_0(\omega)$  по  $\omega$ .

Гамильтониан взаимодействия в форме нормального произведения (22) не приводит к появлению диаграмм "кактусного" типа в ряду теории возмущений, их вклад, как и в случае квантовой теории скалярного поля, включается в определение основного состояния, т.е. в частоту осциллятора  $\omega$ . Таким образом, вклад диаграмм "кактусного" типа эффективно суммируется и определяет главный квантовый вклад взаимодействия в формирование основного состояния системы. Следующие поправки могут быть вычислены методом теории возмущений по  $H_I$ .

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

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

где  $p$  и  $q$  - канонические переменные и  $V(q)$ -потенциал, допускающий существование связанного состояния. Введем некоторый потенциал  $V_0(q)$ , зависящий от каких-то параметров

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2} + V(q) = \left( \frac{p^2}{2} + V_0(q) \right) + (V(q) - V_0(q)) = H_0 + H_I, \\ H_0 &= \frac{p^2}{2} + V_0(q), \quad H_I = V(q) - V_0(q), \end{aligned} \quad (23)$$

причем будем предполагать, что уравнение Шредингера

$$H_0 \Psi_0 = \left( \frac{p^2}{2} + V_0(q) \right) \Psi_0 = E_0 \Psi_0 \quad (24)$$

может быть решено точно. Естественно, будем выбирать потенциал  $V_0(q)$  "максимально близко" к потенциалу  $V(q)$ . Произведем вариационную оценку исходного гамильтониана по волновой функции, являющейся решением уравнения (24)

$$\mathcal{E} = \min_{\Psi_0} \left( \Psi_0 \left[ \frac{p^2}{2} + V(q) \right] \Psi_0 \right), \quad (25)$$

где минимизация проводится по параметрам потенциала  $V_0(q)$ . В результате фиксируются параметры потенциала  $V_0(q)$  и волновая функция  $\Psi_0(q)$ .

Теперь будем вычислять энергию основного состояния по теории возмущений, где в качестве возмущения выбирается гамильтониан  $H_1$ , имеем

$$E = E_0 + E_1 + E_2 + \dots = \mathcal{E} + E_2 + \dots,$$

поскольку

$$\begin{aligned} E_1 &= \left( \Psi_0 [V(q) - V_0(q)] \Psi_0 \right) \\ &= \left( \Psi_0 \left[ \frac{p^2}{2} + V(q) - \frac{p^2}{2} - V_0(q) \right] \Psi_0 \right) = \mathcal{E} - E_0. \end{aligned}$$

Заметим, что  $\mathcal{E}$  является оценкой сверху для энергии основного состояния

$$E < \mathcal{E}.$$

Если выбрать в качестве потенциала  $V_0(q)$  осциллятор с неизвестной частотой, то мы получим введенное выше осцилляторное представление. Следует отметить, осцилляторное представление имеет то несомненное преимущество, что формализм операторов рождения и уничтожения значительно упрощает вычисления.

Рассмотрим в качестве примера гамильтониан, имеющий непосредственное отношение к трехтельной задаче

$$H = \frac{p^2}{2} + V(q) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} - \frac{W(u)}{\cosh^2 u}, \quad (26)$$

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

удобнее поступить следующим образом. Имеем

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_I, \\ H_0 &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} - \frac{\theta(\theta+1)}{2 \cosh^2 u}, \\ H_I &= -\frac{2W(u) - \theta(\theta+1)}{2 \cosh^2 u}, \end{aligned}$$

где  $\theta$ -некоторая положительная постоянная. Уравнение

$$H_0 \Psi_0 = \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} - \frac{\theta(\theta+1)}{2 \cosh^2 u} \right) \Psi_0 = E_0 \Psi_0$$

имеет решение

$$\Psi_0(u) = \frac{1}{N(\theta) [\cosh u]^\theta}, \quad E_0 = -\frac{\theta^2}{2}. \quad (27)$$

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

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

где  $B(x, y)$  - функция Эйлера. Далее необходимо действовать согласно изложенным выше правилам.

#### 4. ГАМИЛЬТониАН В ОСЦИЛЛЯТОРНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

В этом разделе сформулируем метод вычисления функции  $\epsilon(U)$  как энергии основного состояния гамильтониана (16). Для вычисления энергии основного состояния системы перепишем гамильтониан  $h$  (16) в виде

$$h = h_0 + h_I + \epsilon_0. \quad (28)$$

Здесь  $h_0$  осцилляторная часть гамильтониана, определенная следующим образом:

$$\begin{aligned} h_0 &= \frac{1}{2\kappa_Q} \left[ \frac{1}{2} (P_Q^2 + \Omega^2 Q^2) - \frac{d\Omega}{2} \right] + \frac{1}{2\kappa_q} \left[ \frac{1}{2} (P_q^2 + \omega^2 q^2) - 2\Omega \right] \\ &+ \frac{1}{\kappa_u} \left[ \frac{1}{2} P_u^2 - \frac{\theta(\theta+1)}{2 \cosh^2(u)} + \frac{\theta^2}{2} \right], \end{aligned} \quad (29)$$



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

$$h_0 \Psi_0(Q, q, u) = 0. \quad (30)$$

Решение этого уравнения для основного состояния имеет вид

$$\Psi_0(Q, q, u) = N \frac{1}{[\cosh u]^\theta} \exp \left\{ -\frac{\Omega}{2} Q^2 - \frac{\omega}{2} q^2 \right\}, \quad (31)$$

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

Учитывая (16) и (29), получаем для  $h_I + \varepsilon_0$ :

$$\begin{aligned} h_I + \varepsilon_0 = & \frac{1}{2\kappa_Q} \left( \frac{d\Omega}{2} - \frac{\Omega^2 Q^2}{2} \right) + \frac{1}{2\kappa_q} \left( \frac{4\omega}{2} - \frac{\omega^2 q^2}{2} \right) \\ & + \frac{1}{2\kappa_u} \left( \frac{\theta(\theta+1)}{2[\cosh u]^2} + \frac{\theta^2}{2} \right) + \frac{P_Q^2}{4} \left( \frac{q^2}{[\cosh u]^2} - \frac{1}{\kappa_Q} \right) + \frac{P_q^2}{4} \left( \frac{Q^2}{[\cosh u]^2} - \frac{1}{\kappa_q} \right) \\ & + \frac{P_u^2}{2} \left( \frac{2Q^2}{q^2} + \frac{2q^2}{Q^2} - \frac{1}{\kappa_u} \right) - \frac{d(d-4)}{16[\cosh u]^2} \frac{q^2}{Q^2} + V, \end{aligned} \quad (32)$$

где потенциал  $V$  представлен в (12). Из (32) определим гамильтониан взаимодействия и энергию основного состояния в нулевом приближении. Введем определение:

$$\begin{aligned} : P_Q^2 : & := P_Q^2 - (\Psi_0 P_Q^2 \Psi_0) = P_Q^2 - \frac{d\Omega}{2}, \\ : Q^2 : & := Q^2 - (\Psi_0 Q^2 \Psi_0) = Q^2 - \frac{d}{2\Omega}, \\ : P_q^2 : & := P_q^2 - (\Psi_0 P_q^2 \Psi_0) = P_q^2 - 2\omega, \\ : q^2 : & := q^2 - (\Psi_0 q^2 \Psi_0) = q^2 - \frac{2}{\omega}, \\ : P_u^2 : & := P_u^2 - (\Psi_0 P_u^2 \Psi_0) = P_u^2 - \frac{\theta^2}{2\theta+1}. \end{aligned} \quad (33)$$

и

$$: A : := A - (\Psi_0 A \Psi_0),$$

где  $A$  - произвольный оператор.

Подставим представление (33) в (32) и потребуем выполнения условия осцилляторного представления, т.е. потребуем, чтобы полученное выражение для гамильтониана взаимодействия не содержало квадратных слагаемых по  $: Q^2 :$ ,  $: q^2 :$ ,

:  $P_Q^2$  ::, :  $P_q^2$  ::, :  $P_u^2$  ::. Из условия равенства нулю коэффициентов при :  $P_Q^2$  ::, :  $P_q^2$  :: и :  $P_u^2$  :: определяются параметры  $\kappa_Q$ ,  $\kappa_q$ , и  $\kappa_u$ :

$$\begin{aligned}\frac{1}{\kappa_Q} &= \left( \Psi_0 \frac{q^2}{[\cosh u]^2} \Psi_0 \right) = \frac{4}{\omega} \frac{\theta}{2\theta + 1}, \\ \frac{1}{\kappa_q} &= \left( \Psi_0 \frac{Q^2}{[\cosh u]^2} \Psi_0 \right) = \frac{d}{\Omega} \frac{\theta}{2\theta + 1}, \\ \frac{1}{\kappa_u} &= \left( \Psi_0 \left[ \frac{2Q^2}{q^2} + \frac{2q^2}{Q^2} \right] \Psi_0 \right) = \frac{d\omega}{\Omega} + \frac{8}{d-2} \frac{\Omega}{\omega}.\end{aligned}\quad (34)$$

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

$$\begin{aligned}\varepsilon_0(U) &= \min_{\Omega, \omega, \theta, d} (\Psi_0 h \Psi_0) = \min_{\Omega, \omega, \theta, d} \left\{ \frac{2\theta}{2\theta + 1} \left[ \frac{d}{4} \left( \frac{\Omega}{\omega} + \frac{\omega}{\Omega} \right) + \frac{\theta}{2} \left( \frac{4}{d-2} \frac{\Omega}{\omega} \right) \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{d\omega}{2\Omega} \right] + \frac{4Z_1 Z_3}{\omega} + \frac{Ud}{\omega\Omega} - \frac{d(d-4)\Omega}{4(d-2)\omega} \right\} - \frac{c}{2} \frac{d(d+2)(d+4)\Gamma(2\theta)}{4^{\theta}\Gamma^2(\theta)} f(\Omega, \omega, \theta, d),\end{aligned}\quad (35)$$

где

$$\begin{aligned}f &= \int_0^1 dy y^{d/2} (1-y)^2 \int_{-1}^1 d\tau (1-\tau^2)^{\theta} \left[ \frac{Z_2 Z_3}{\sqrt{(1-y)^2 \Omega^2 + c_3^2 y^2 \omega^2 - 2c_3 y (1-y) \tau \omega \Omega}} \right. \\ &\left. + \frac{Z_2 Z_1}{\sqrt{(1-y)^2 \Omega^2 + c_1^2 y^2 \omega^2 + 2c_1 y (1-y) \tau \omega \Omega}} \right],\end{aligned}$$

а  $h_I$ -гамильтониан взаимодействия, записывается в виде

$$\begin{aligned}h_I &= \frac{\theta}{2\theta + 1} \left( \frac{1}{2} : P_Q^2 :: q^2 : + \frac{1}{2} : P_q^2 :: Q^2 : + \theta : \frac{1}{q^2} :: Q^2 : + \theta : \frac{1}{Q^2} :: q^2 : + 2U : q^2 :: Q^2 : \right. \\ &\left. - \frac{d(d-4)}{8} : \frac{1}{Q^2} :: q^2 : \right) + : P_u^2 : \left( : \frac{1}{q^2} :: Q^2 : + : \frac{1}{Q^2} :: q^2 : + \omega : Q^2 : + \frac{2\Omega}{d-2} : q^2 : \right. \\ &\left. + \frac{d}{2\Omega} : \frac{1}{q^2} : + \frac{2}{\omega} : \frac{1}{Q^2} : \right) + (2Z_1 Z_3 : q^2 : + U : Q^2 :: q^2 : + \frac{d}{2\Omega} U : q^2 : + \frac{2}{\omega} U : Q^2 : \\ &\left. + \frac{1}{4} : P_Q^2 :: q^2 : + \frac{1}{4} : P_q^2 :: Q^2 : + \frac{1}{2\omega} : P_Q^2 : + \frac{d}{8\Omega} : P_q^2 : + \frac{d\Omega}{8} : q^2 : + \frac{\omega}{2} : Q^2 : \right. \\ &\left. - \frac{d(d-4)}{4\omega} : \frac{1}{Q^2} : - \frac{d(d-4)\Omega}{8(d-2)} : q^2 : \right) : \frac{1}{[\cosh u]^2} : - : W : ,\end{aligned}\quad (36)$$

где использовано обозначение

$$W = \frac{2cQ^2 q^2 Z_3 Z_2}{\cosh^2 u \sqrt{q^4 + c_3^2 Q^4 - 2c_3 q^2 Q^2 \tanh u}} + \frac{2cQ^2 q^2 Z_2 Z_1}{\cosh^2(u) \sqrt{q^4 + c_1^2 Q^4 + 2c_1 q^2 Q^2 \tanh u}}$$

Согласно (30, 31) и (35, 36), выполняются следующие соотношения:

$$(\Psi_0 h_0 \Psi_0) = 0, \quad (\Psi_0 h_I \Psi_0) = 0.$$

Отсюда следует, что первая поправка по гамильтониану взаимодействия  $h_I$  равна нулю  $\varepsilon_1 = 0$ . В этом случае, так же, как в (21), определение параметров  $\omega$ ,  $\Omega$  из условия осцилляторного представления эквивалентно определению их из минимума энергии основного состояния.

Параметры  $\omega$ ,  $\Omega$ ,  $\theta$ ,  $d$  определяются из условия минимума  $\varepsilon_0$ -энергии основного состояния, или другими словами, из уравнений

$$\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \Omega} = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \omega} = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial d} = 0. \quad (37)$$

Эти уравнения определяют параметры  $\omega$ ,  $\Omega$ ,  $\theta$ ,  $d$  как функции от  $U$  и, следовательно, энергия  $\varepsilon_0$  является функцией параметра  $U$ :

$$\varepsilon_0(U) = \varepsilon_0(\omega(U), \Omega(U), \theta(U), d(U), U).$$

Таким образом, исходная задача сведена к решению уравнения Шредингера:

$$(h_0 + h_I + \varepsilon_0)\Psi = \varepsilon(U)\Psi, \quad (38)$$

где  $U$  является единственным свободным параметром. Параметр  $U$ , определяющий энергию основного состояния трехтельной задачи (7), вычисляется из условия

$$\varepsilon(U) = 0.$$

Мы будем решать уравнение (38) по теории возмущений, рассматривая гамильтониан взаимодействия  $h_I$  как возмущение. Для энергии основного состояния получим ряд

$$\varepsilon(U) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n(U),$$

где  $\varepsilon_n(U)$  - поправка  $n$ -ого порядка по гамильтониану взаимодействия. Условие

$$\varepsilon(U) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n(U) = 0 \quad (39)$$

определяет параметр  $U$  и тем самым энергию исходной трехтельной системы по формуле (7). В реальных расчетах энергия  $\varepsilon(U)$  вычисляется только в нескольких

низших порядках теории возмущений. Поэтому параметр  $U$  в  $N$ -ом порядке теории возмущений определяется уравнением

$$\varepsilon^{(N)}(U^{(N)}) = \sum_{n=0}^N \varepsilon_n(U^{(N)}) = 0. \quad (40)$$

Тогда, согласно (7), энергия основного состояния трехтельной системы в  $N$ -ом приближении осцилляторного представления равна

$$E^{(N)} = -\frac{1}{2}\mu\alpha^2 U^{(N)}. \quad (41)$$

При численных расчетах вместо решения системы четырех уравнений (37) и (40) удобно искать минимум функционала:

$$F_N(\Omega, \omega, \theta, d, U) = \sqrt{\left(\sum_{n=0}^N \varepsilon_n\right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \Omega}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \theta}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial d}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \omega}\right)^2}. \quad (42)$$

Легко видеть, что параметры  $\omega, \Omega, \theta, d$  и  $U$ , определяющие минимум этого функционала, являются решениями уравнений (37) и (40).

Покажем теперь, что функция

$$\varepsilon = \varepsilon(\Omega(U^{(0)}), \omega(U^{(0)}), \theta(U^{(0)}), d(U^{(0)}), U^{(0)}),$$

где параметр  $U^{(0)}$  взят в нулевом порядке теории возмущений, т.е. минимизирует функционал  $F_0(\Omega, \omega, \theta, d, U)$  в (35), является верхней оценкой энергии основного состояния исходной трехтельной системы. Действительно, рассмотрим функцию  $\varepsilon_0(U)$  (35). Параметры  $\Omega, \omega$  и  $\theta$  неотрицательны, поэтому из соотношений (35) следует

$$\frac{\partial \varepsilon_0(U)}{\partial U} = \frac{2d}{\Omega(U)\omega(U)} \frac{\theta(U)}{2\theta(U) + 1} \geq 0.$$

Другими словами,  $\varepsilon_0$  является растущей функцией параметра  $U$ . Точное выражение для энергии определяется формулой

$$\varepsilon(U) = \varepsilon_0(U) + \varepsilon_{pc}(U),$$

где через  $\varepsilon_{pc}(U)$  обозначен вклад всего ряда теории возмущений. С точки зрения уравнения Шредингера (38),  $\varepsilon_0(U)$  является верхней вариационной оценкой энергии основного состояния гамильтониана (28), так что для любых  $U$

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

Поскольку  $U^{(0)}$  определяется из уравнения

$$\varepsilon_0(U^{(0)}) = 0, \quad (43)$$

то решение уравнения (43) удовлетворяет условию  $U \geq U^{(0)}$  и

$$E(U) \leq E(U^{(0)}) = E^{(0)},$$

что и требовалось доказать.

## 5. ТОЧНОСТЬ НУЛЕВОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

В методе осцилляторного представления есть возможность определить энергию основного состояния трехтельной кулоновой системы с любой точностью, учитывая высшие порядки теории возмущений по степеням гамильтониана взаимодействия  $\hbar_I$ . В данной работе мы не будем вычислять следующую поправку к энергии основного состояния, а определим точность метода, сравнивая результат расчета в нулевом приближении с точными значениями энергии, полученными численными методами. Для этого вычислим энергии основного состояния следующих кулоновских систем:  $H^-$ ,  $H_2^+$ ,  $(eee)$  и  $(pp\mu)$ ,  $(dd\mu)$ ,  $(dt\mu)$ .

Энергии этих трехтельных систем вычислены многими авторами и разными методами (см., например, [2-6, 18]). С усовершенствованием вычислительной техники точность вычисления энергии трехтельной кулоновской системы достигла очень высокого уровня. Поэтому эти результаты можно считать точными значениями уровней энергии трехтельной системы.

Выражение (35) для энергии основного состояния в нулевом приближении перепишем в виде

$$\varepsilon_0(U) = \min_{\Omega, \omega, \theta, d} \left\{ \frac{2\theta}{2\theta + 1} \left[ \frac{d}{4} \left( \frac{\Omega}{\omega} + \frac{\omega}{\Omega} \right) + \frac{\theta}{2} \left( \frac{d}{d-2} \frac{\Omega}{\omega} + \frac{d\omega}{2\Omega} \right) + \frac{4Z_1Z_3}{\omega} + \frac{Ud}{\omega\Omega} - \frac{d(d-4)\Omega}{4(d-2)\omega} \right] - \frac{cd(d+2)(d+4)\Gamma(2\theta)}{2 \cdot 4^\theta \Gamma^2(\theta)} f(\Omega, \omega, \theta, d) \right\} = 0, \quad (44)$$

где

$$f = \int_0^1 dy y^{d/2} (1-y)^2 \int_{-1}^1 d\tau (1-\tau^2)^\theta \left[ \frac{Z_2Z_3}{\sqrt{(1-y)^2\Omega^2 + c_3^2y^2\omega^2 - 2c_3y(1-y)\tau\omega\Omega}} + \frac{Z_2Z_1}{\sqrt{(1-y)^2\Omega^2 + c_1^2y^2\omega^2 + 2c_1y(1-y)\tau\omega\Omega}} \right].$$

Уравнение (44) определяет параметр  $U$  как функцию зарядов и масс частиц. Энергия оперделается по формуле (41).

При вычислении конкретной трехтельной системы использовались следующие значения масс:  $m_\mu = 206.77m_e$ ,  $m_p = 1836.15m_e$ ,  $m_d = 3670.48m_e$  и  $m_t = 5496.9m_e$ , где  $m_e$ -масса электрона. Результаты вычисления приведены в таблицах 1 и 2. Для сравнения результатов нашего вычисления в таблицах приведены точные значения уровней энергии этих систем, приведенных в работе [14].

Таблица 1

	$\omega$	$\Omega$	$\theta$	$d$	$U^{or}$	$U^{ex}$	$\Delta U(\%)$
$e^+e^-e$	5.076	.1034	.1022	4.102	.520	.52399	.762
$\mu e^-e^-$	4.833	.1102	.103	4.106	1.050	1.05011	.011
$pe^-e^-$	4.835	.1105	.104	4.107	1.050	1.0547	.446
$ppe^-$	.0852	.1113	.102	4.101	1.190	1.1943	.360

В таблице 1 приведены результаты вычисления параметра  $U$  для трехтельной атомной системы.  $U^{or}$ -наш результат и  $U^{ex}$ -точное значение, а  $\Delta U = |U^{or} - U^{ex}|/U^{ex}100\%$  определяет точность нулевого приближения.

Таблица 2

	$\omega$	$\Omega$	$\theta$	$d$	$E^{or} \text{ ev}$	$E^{ex} \text{ ev}$	$\Delta E(\%)$
$pp\mu$	5.339	.1048	.1031	4.1195	-2781	-2782	.036
$dd\mu$	8.750	.895	.100	4.104	-2987	-2988	.034
$dt\mu$	.0867	.8325	.100	4.128	-3028	-3029	.033

В таблице 2 приведены значения термов мезомолекул, где  $E^{or}$ -наши результаты, вычисленные по формуле (41),  $E^{ex}$ -точные значения и  $\Delta E = |E^{ex} - E^{or}|/E^{ex}100\%$ .

Уровни энергии кулоновской трехтельной системы вычислены для основного состояния. Из таблиц 1 и 2 видно, что отклонение от точного значения результатов наших вычислений в нулевом приближении составляет меньше одного процента.

## 6. ГРАНИЦА СТАБИЛЬНОСТИ

Исследование зависимости энергии связи системы от масс частиц и зарядов является одним из ключевых вопросов для понимания особенностей энергетических спектров различных систем.

Определение границ стабильности трехтельной кулоновской системы является одной из основных проблем кулоновской задачи трех тел (подробности см. в [14,15]). Зависимость энергии связи системы от масс частиц исследовалась в [16], а в [17] проведены численные расчеты, касающиеся установления границ стабильности. Более детальное исследование по установлению границ стабильности трехтельной кулоновской системы проведено в [14].

В рамках нашего метода исследуем зависимость энергии трехтельной системы от масс частиц и определим границу стабильности. Согласно [14], вместо масс частиц  $m_j$  используем переменные

$$\alpha_j = \frac{1}{m_j} / \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right) \quad (j = 1, 2, 3), \quad (45)$$

удовлетворяющие условию

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1.$$

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

Наша задача состоит в том, чтобы на треугольнике стабильности найти границу, разделяющую устойчивые и неустойчивые состояния трехтельной системы. Для этого рассмотрим молекулу (А,В,С) с единичными электрическими зарядами, т.е. ( $q_B = \mp 1, q_A = q_C = \pm 1$ ) и массами  $M_A, M_B, M_C$ . Меняя массу одной частицы (пусть  $M_B$ ) при фиксированных значениях масс других частиц ( $M_A = \text{const}, M_C = \text{const}$ ) и вычисляя энергию основного состояния по формуле (44), определим значение массы В- частицы (так называемую критическую массу), при которой система переходит от стабильного состояния к нестабильному, или наоборот. Стабильность данной системы определяется относительно канала распада:

$(A, B, C) \Rightarrow (A, B) + C$  или  $(A, B, C) \Rightarrow (B, C) + A$ . Энергия связи системы  $(A, B, C)$  вычисляется по формуле

$$\Delta E = -\frac{1}{2}e^4 \frac{M_A M_B}{M_A + M_B} (U - 1), \quad (46)$$

где  $U$  как функция от  $M_B$  определяется выражением (44). Критическая масса частицы  $B$  вычисляется из условия  $\Delta E = 0$ .

Прежде всего отметим соответствующими точками на треугольнике некоторые хорошо известные системы:  $(ppe^-)$ ,  $(pe^-e^-)$ ,  $(e^+e^-e^-)$ ,  $(pe^-\mu^-)$  и  $(pe^-e^+)$ . Система  $(e^+e^-e^-)$  изучена в [18,19] и является связанной, а  $(ppe^-) = H_2^+$ -обычный ион молекулы водорода. Система  $(pe^-e^-) = H^-$ -ион атома водорода является связанной [18,20], а  $(pe^-\mu^-)$  является несвязанной системой [21]. Остается открытым вопрос, стабильна или нет молекула  $(pe^-e^+)$  (подробности см. в [14]).

Приступим к определению критической массы для трехтельной системы в нашем подходе. Все вычисления проводятся по формуле (44).

Молекулы  $(pe^-e^+)$  и  $(ppe^-)$  отличаются массами позитрона и протона. Исследуем энергию связи системы  $(pe^-C^+)$  как функции от  $M_C$  — массы  $C$ -частицы, т.е. будем изменять массу  $M_C$  в пределах от  $m_e$  до  $m_p$ . В результате оказывается, что при значении массы  $C$ -частицы  $M_C = m_e$  имеем  $U = .901$ , т.е.  $(pe^-e^+)$  система является нестабильной, а при  $M_C = 1.945m_e$  параметр  $U = 1.0$  и система переходит в стабильное состояние. Таким образом, значение массы  $C$ -частицы  $M_C = 1.945m_e$  для системы  $(pe^-C^+)$  является критической массой, или границей перехода от нестабильного к стабильному состоянию. Ограничения на критическое значение  $M_C$  для системы  $(pe^-C^+)$  рассмотрено разными авторами. В частности, в [22] получено верхнее ограничение:  $M_C < 2.20m_e$ , а в работе [23] — нижнее ограничение  $M_C > 1.51m_e$  при  $m_p = \infty$ . Результат [24] при  $m_p = \infty$  гласит:  $M_C \geq 1.57m_e$ . В работе [14] получено ограничение  $M_C \geq 1.9m_e$ .

Молекулы  $(pe^-e^+)$  и  $(e^+e^-e^+)$  также отличаются только массами позитрона и протона. Рассмотрим систему  $(A^+e^-e^+)$ . При значении массы  $A$ -частицы  $M_A = m_p$  система нестабильна, а при  $M_A = m_e$  стабильна. Уменьшая массу  $A$ -частицы до  $M_A = 4.35m_e$ , имеем  $U = 1$ , т.е. система  $(A^+e^-e^+)$  становится связанной. В [14] для системы  $(A^+B^-B^+)$  установлено нижнее ограничение для критической массы частицы  $A$ :  $M_A > 4.19M_B$ .

При определении зависимости энергии основного состояния систем  $(pe^-C^+)$  и  $(A^+e^-e^+)$  от масс частиц  $C$  и  $A$  установлены границы стабильности, т.е. вычислены значения критических масс для этих систем  $M_C = 1.945m_e$  и  $M_A = 4.35m_e$ . Эти системы



рассматривались в работах [14, 22-24], где установлены ограничения на значения критических масс.

Теперь рассмотрим молекулу ( $p\mu^-e^-$ ) и ион атома водорода ( $pe^-e^-$ ). Эти системы различаются только массами мюона и электрона. Увеличиваем массу В-частицы в системе ( $pB^-e^-$ ). При значении  $M_B = 1.575m_e$  — для массы В-частицы параметр  $U=1$ . Таким образом, для ( $pB^-e^-$ ) критическое значение массы равно  $M_B = 1.575m_e$ . В [14,24] для молекулы ( $pB^-e^-$ ) получены критические значения массы  $M_B \geq 1.57m_e$ .

Обратимся к системе ( $A^+A^-e^-$ ). В этом случае массы А-частиц увеличиваем от  $M_A = m_e$  до  $M_A = m_p$ . При этом критическая масса оказалась  $M_A = 2.45m_e$ .

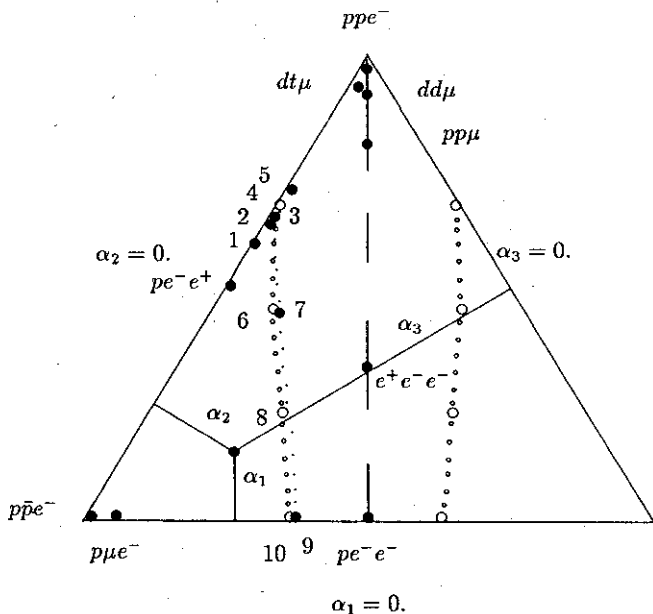


Рис.1. Треугольник стабильности. Система ( $pe^-C^+$ ) обозначена точками 1- $M_C = 1.51m_e$ , 2 -  $M_C = 1.57m_e$ , 3 -  $M_C = 1.9m_e$  и 5 -  $M_C = 2.2m_e$ , а при  $M_C = 1.945m_e$  - кружками с номером 4. Система ( $pB^-e^-$ ) обозначена соответственно точкой 9 -  $M_B = 1.57m_e$ , а при  $M_B = 1.575m_e$  кружком - 10. Система ( $A^+e^-e^+$ ) отмечена точкой 7 -  $M_A = 4.19m_e$ , а при  $M_A = 4.35m_e$  кружком - 6. ( $A^+A^-e^-$ ) система обозначена кружком 8 -  $M_A = 2.45m_e$ .

Таким образом, для систем  $(pB^-e^-)$  и  $(A^+A^-e^-)$  определены значения критических масс  $M_B = 1.575m_e$  и  $M_A = 2.450m_e$ . В работах [14, 24] установлено ограничение на значения критических масс этих систем.

Граница стабильности, полученная по формуле (44), изображена кружками на Рис.1. В [14,22-24] установлены ограничения на значения критических масс систем  $(pe^-C^+)$ ,  $(pB^-e^-)$  и  $(A^+e^-e^+)$ . Наши результаты согласуются с результатами этих работ. Граница стабильности, установленная в [14], изображена точками на Рис.1.

Высота треугольника к оси  $\alpha_1 = 0$ , на которой любая молекула стабильна, является осью зарядовой симметрии трехтельной системы. Точки на левой части от оси симметрии отображаются на правую часть треугольника. Поэтому линия границы стабильности отображается на правую часть треугольника. Таким образом, внутренняя часть треугольника, ограниченная этими линиями, является областью стабильности (см. на Рис.1), т.е. молекула, соответствующая любой точке этой области, является стабильной.

Авторы выражают благодарность В.Б.Беляеву, С.И.Виницкому и Л.И.Пономареву за полезные обсуждения.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Фок В.А.Изв. Акад.наук СССР сер.Физ 18 с.161(1954).
- [2] Беляев В.В. и др. ЖЭТФ,37,с.1652(1959);  
Masek J., Jour. Phys. B1,р.831(1968);  
Виницкий С.И., Пономарев Л.И., ЭЧАЯ 13,с.1336(1982).
- [3] Kohn W., Phys. Rev., 71,р.902(1947);  
Bishop D.,Cheung L., Phys. Rev., 16,р.640(1977);  
Alexander S.A.,Monkhorst H.J., Phys. Rev.,38, р.26(1988).
- [4] Bhatia A.K.,Drachman R.J. Phys. Rev., A30,р.2138(1984);  
Hu C.Y. Phys. Rev., A32, р.1245(1985).
- [5] Фролов А.М. , Эфрос В.Д. Письма в ЖЭТФ, 39, с.449(1984);  
ЯФ, 41, с.828(1985); J. Phys.B 18 р.265(1985).
- [6] Halpern A. Phys. Rev. Lett. 13, р.660(1964);  
Виницкий С.И. и др., ЖЭТФ 91, с.705(1986);

- Phys. Lett., B196, p.272(1987).
- [7] Демков Ю.Н., Филиппский А.В., Тезисы Всесоюзной Конф. по атомам и атомных спектров. Минск: Изд-во АНБССР с.22(1983).
- [8] Efimov G.V., Preprint IC/91/31.Miramare-Trieste (1991);  
Preprint IC/90/23.Miramare-Trieste (1990).
- [9] Caswell W.E., Ann. Phys. 123, p.153(1979).
- [10] Schrodinger E., Proc.R.Irish Acad.46,p.183(1941).
- [11] Kustaanheimo P.and Stiefel E., J. Reine Angew.Math., 218,p.204(1965).
- [12] Duru I.H. and Kleinert H.,Fortsch. der Phys. 30,p.401(1982).
- [13] Mlodinow L.D., Papanicolaow N., Ann. Phys., 131, p.1(1981);  
Сергеев А.В. ЯФ, 50, с.945(1989).
- [14] Martin A., et al., Phys. Rev., A46, p.3697(1992);  
Martin A., Preprint CERN-TH 6376/92, Geneve (1992).
- [15] Thirring W., *A Course in Mathematical Physics*,  
V.3 (Springer-Verlag,1981).
- [16] Bhatia A.K. and Drachman R.J., Phys. Rev. A35, p.4051(1989);  
Papovic Z.S. and Vukajlovic F.R., Phys. Rev., A36, p.1936(1987).
- [17] Poshusta R.D., J. Phys. B18, p.1887(1985).
- [18] S. Cohen, J.R. Hiskes and R.J. Riddell, Phys. Rev. 119, p.1025(1960);  
H. Wind, J. Chem. Phys. 42, p.2371(1965); 43, p.2956(1965);  
W. Kolos, Acta Phys. Acd. Sci. Hung. 27, p.241(1969);  
C.L. Beckel, B.D. Hausen and J.M. Peek, J. Chem. Phys. 53,p.3681(1970);  
M.C.Struensee, J.S. Cohen and R.T. Pack, Phys. Rev. A34, p.3605(1986);  
A.C. Fonseca and A.Pena, Phys. Rev. A38, p.4967(1988).
- [19] Mills A.P., Phys. Rev. Lett. 46, p.717(1981).
- [20] Hill R.N., J.Math. Phys., 18, p.2316(1977).
- [21] Wightman A.S., Thesis, Princeton University (1949).
- [22] Rotenberg M. and Stein J., Phys. Rev. 182, p.1(1969).
- [23] Armour E.A.G. and Schrader D.M., Can. J. Phys. 60, p.581(1982).
- [24] Glaser V., et al.,in *Mathematical Problems in Theoretical Physics*,  
Proc.Int.Conf.Math.Phys. Lausanne(1979), ed.K.Osterwalder  
( Lectures Notes in Physics, vol.116, Springer-Verlag, Berlin,1980).

Рукопись поступила в издательский отдел  
12 февраля 1993 года.