

УДК 539.184.2

І. Гайсак<sup>1</sup>, М. Гайсак<sup>2</sup>, І. Ламер<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна

<sup>2</sup>Інститут електронної фізики НАН України,  
88017, Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна  
e-mail: m.haysak@gmail.com

## ІЗОТОПІЧНІ ЕФЕКТИ ДЛЯ СИНГЛЕТНИХ ТА ТРИПЛЕТНИХ СТАНІВ НЕГАТИВНОГО ІОНА АТОМА ВОДНЮ

У рамках методу гіперсферичних координат проведені розрахунки енергій зв'язку нижчих синглетних та триплетних серій станів ізотопів негативного іону атома водню в одновимірному просторі. При визначенні адиабатичних потенціалів розв'язувалася узагальнена крайова задача на власні значення та власні функції при розмірностях базису, що дорівнюють 10, 20 та 40. Радіальна система розв'язувалася в наближенні Борна – Оппенгеймера. Для покращення результатів використана екстраполяційна формула Річардсона. Показано, що всі ізотопи у синглетному стані, окрім основного стану, мають збуджений стан, енергія спорідненості якого дорівнює  $0.0031 \pm 0.0032$  а.о. Триплетні стани ізотопів мають один зв'язаний стан, енергія спорідненості яких лежить в інтервалі  $0.0021 \div 0.0022$  а.о.

**Ключові слова:** метод гіперсферичних координат, іон атома водню, адиабатичний потенціал.

### Вступ

Малочастинкові квантові системи атомної, молекулярної, ядерної фізики та фізики твердого тіла привертають велику увагу завдяки можливості проведення майже точних розрахунків енергетичних параметрів таких систем, що дозволяє пролити світло на взаємодію та структуру цих квантових систем. Існує цілий ряд методів, які дають змогу провести розрахунки енергій та хвильових функцій із досить високою точністю. Серед таких методів важливе місце займають варіаційний [1, 2], метод комплексних обертань [3], метод гіперсферичних координат [4, 5]. Усі ці методи мають як недоліки, так і переваги, при використанні їх для знаходження розв'язків певних граничних задач та задачі розсіювання.

У даній роботі ми розглянемо просту тричастинкову систему – одновимірний негативний іон атома водню ( $e^-pe^-$ ). Для цього розв'яжемо нерелятивістське рівняння Шредінгера із кулонівською парною взаємодією між частинками. Розв'язок цієї задачі дасть можливість визначити вклад ізотопічних ефектів у значення енергії

зв'язку для гелієподібних систем. Негативний іон водню представляє значний інтерес для астрофізики та фізики плазми [6].

Матричні елементи потенціальної енергії взаємодії, за виключенням триплетних станів у наближенні нескінченної маси ядра, мають розбіжності. Для усунення таких розбіжностей у тривимірному просторі використовують розклад потенціальної енергії у ряд за ортогональними поліномами. Оскільки при розкладах обмежуються певним числом доданків ряду, то отримують скінчений розв'язок.

У своїх розрахунках ми використаємо розв'язок масштабованого рівняння Шредінгера [7]. У цьому випадку отримуємо узагальнену задачу для знаходження власних значень та власних функцій, яка вільна від розбіжних інтегралів. Узагальнена крайова задача має наступний вигляд:

$$Ax = \lambda Bx, \quad (1)$$

де  $A$  і  $B$  – матриці, а  $\lambda$  і  $x$  – власні значення та власні функції, відповідно.

**Рівняння руху системи трьох частинок у нерелятивістському підході в одновимірному просторі**

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

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

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. У даній роботі ми обмежимося кулонівським потенціалом взаємодії між частинками, який має наступний вигляд:

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

де  $z_i$  – заряд  $i$ -ї частинки. Як видно із (3), потенціальна енергія взаємодії враховує лише парну взаємодію між частинками, тим самим ми нехтуємо силами, які виникають при більш складній, наприклад, багаточастинковій взаємодії.

Перевага вибраного потенціалу взаємодії полягає в тому, що він дозволяє відокремити рух системи центру мас у рівнянні (2). Для цього необхідно ввести відносні координати Якобі [8]. Координати Якобі мають свої певні переваги перед атомними координатами та координатами Гіллераса. Основна перевага їх полягає в тому, що гамільтоніан системи не містить доданків Юза-Еккарта [8]. Недоліком координат Якобі є відсутність прозорої симетрії при перестановках тотожних частинок.

**Відносні координати Якобі.**

**Відокремлення руху системи центру мас**

Рівняння (2) із потенціалом взаємодії (3) допускає відокремлення змінних, і тим самим вдається зменшити кількість незалежних змінних у рівнянні (2). Для

відокремлення змінних необхідно замість незалежних змінних  $x_i$  ввести відносні координати Якобі  $\rho$  і  $\tau$ , а також координату системи центру мас  $\mathfrak{R}$ , які задаються наступними співвідношеннями:

$$\rho = d_1(x_3 - x_2), \tau = d_2 \left( x_1 - \frac{m_2 x_2 + m_3 x_3}{m_2 + m_3} \right), \quad (4)$$

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

де  $d_1$  і  $d_2$  – деякі константи, причому їх величини виберемо такими, щоб перетворення (4) були ортогональними. Оскільки детермінант перетворень (4) дорівнює  $d_1 d_2$ , то у подальшому будемо фіксувати  $d_1 d_2 = 1$ .

У змінних (4) нерелятивістське рівняння Шредінгера (2) набуде вигляду:

$$\left[ -\frac{1}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{1}{2\mu_3} \frac{\partial^2}{\partial \mathfrak{R}^2} + V(\rho, \tau) - \tilde{E} \right] \Psi(\rho, \tau, \mathfrak{R}) = 0, \quad (5)$$

де  $\mu_1$ ,  $\mu_2$  і  $\mu_3$  – константи, які виражаються через маси частинок системи наступними співвідношеннями:

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

$$\mu_3 = M = m_1 + m_2 + m_3, \quad m_{23} = m_2 + m_3$$

Рівняння (5) допускає відокремлення руху системи центру мас, оскільки потенціальна енергія не залежить від координати центру мас, у цьому випадку його частинні розв'язки можна подати у вигляді  $\Psi(\rho, \tau, \mathfrak{R}) = \psi(\rho, \tau) \cdot \varphi(\mathfrak{R})$ ,  $\psi$  – хвильова функція відносного руху частинок, а  $\varphi$  – хвильова функція руху системи центра мас. Із рівняння (5) отримуємо еквівалентну систему рівнянь для функцій відносного руху  $\psi$  та функції руху системи центру мас  $\varphi$ :

$$\left[ -\frac{1}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V(\rho, \tau) - \varepsilon \right] \psi(\rho, \tau) = 0, \quad (7)$$

$$\left[ \left( \frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathfrak{R}^2} + \tilde{E} - \varepsilon \right) \varphi(\mathfrak{R}) = 0, \right.$$

де  $\varepsilon$  – енергія відносного руху системи.

Перше рівняння частинок системи (7) описує відносний рух системи, а друге – рух центру мас системи. Потенціальна енергія у змінних Якобі має наступний вигляд:

$$\frac{z_2 z_3 d_1}{|\rho|} + \frac{z_1 z_2 d_2}{\left| \tau + \frac{d_2^2 m_3}{m_{23}} \rho \right|} + \frac{z_1 z_3 d_2}{\left| \tau - \frac{d_2^2 m_2}{m_{23}} \rho \right|}. \quad (8)$$

Частинні розв'язки другого рівняння системи (7) добре вивчені [9], оскільки воно є рівнянням Гельмгольца. Таким чином, для знаходження енергій квантових станів системи необхідно знайти частинні розв'язки лише першого рівняння системи (7). Для цього зручно перейти до еліптичної системи координат [10], а саме замість незалежних змінних Якобі  $(\rho, \tau)$  введемо радіальну та кутову змінні  $(R, \alpha)$ :

$$R = \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu} \rho^2 + \frac{\mu_2}{\mu} \tau^2}, \quad (9)$$

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\sqrt{\mu_1} \rho}{\sqrt{\mu_2} \tau}, \quad \left( 0 \leq R < \infty, \right. \\ \left. 0 \leq \alpha \leq \pi/2 \right).$$

$$\frac{1}{R\sqrt{\mu}} \left( \frac{z_2 z_3 d_1 \sqrt{\mu_1}}{|\sin \alpha|} + \frac{z_1 z_2 d_2 \sqrt{\mu_2} \sin \beta_2}{|\sin(\alpha + \beta_2)|} + \frac{z_1 z_3 d_2 \sqrt{\mu_2} \sin \beta_3}{|\sin(\alpha - \beta_3)|} \right). \quad (12)$$

В якості базису для знаходження частинних розв'язків рівняння (10) виберемо власні функції оператора, який отримується із рівняння (10) при фіксованому значенні  $R$ , тобто

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - 2R^2 V(R, \alpha) + 2R^2 U_v(R) \right) \chi_v(R, \alpha) = 0, \quad (13)$$

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 (13).

Задачу Діріхле для власних значень та власних функцій рівняння (13) для певних квантових станів можна звести до розв'язування системи однорідних алгебраїчних рівнянь за допомогою методу Бубнова-Гальоркіна [11]. Для цього слід ско-

де  $\mu_i$  – відносні маси, які визначені у (6), а  $\mu$  – довільна константа.

У змінних (9) рівняння відносного руху частинок системи (7) набуде вигляду

$$\left[ -\frac{1}{2\mu} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( R \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) + V(R, \alpha) - \varepsilon \right] \psi(R, \alpha) = 0. \quad (10)$$

Потенціальна енергія взаємодії у змінних (9) задається наступним виразом:

$$\frac{1}{R\sqrt{\mu}} \left( \frac{z_2 z_3 d_1 \sqrt{\mu_1}}{|\sin \alpha|} + \frac{z_1 z_2 d_2 \sqrt{\mu_2}}{\left| \cos \alpha + \frac{\sqrt{\mu_1 \mu_2}}{m_2} \sin \alpha \right|} + \frac{z_1 z_3 d_2 \sqrt{\mu_2}}{\left| \cos \alpha - \frac{\sqrt{\mu_1 \mu_2}}{m_3} \sin \alpha \right|} \right), \quad (11)$$

де  $\mu_i$  – відносні маси (6). Якщо ввести додаткові кути  $\beta_i$ - ( $i=2,3$ ) за формулою

$$\operatorname{ctg} \beta_i = \frac{\sqrt{\mu_1 \mu_2}}{m_i}, \quad \text{то вираз для}$$

потенціальної енергії (11) запишеться у вигляді:

ристанись ортонормованим базисом  $\varphi: \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cos(2(2n-1)\alpha) \right\}$  та  $\left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sin(4n\alpha) \right\}$  для синглетних і триплетних станів, які мають періоди  $\pi$  та  $\pi/2$ , відповідно.

Для певних квантових станів будемо шукати каналові функції  $\chi_v(R, \alpha)$  у вигляді розкладу

$$\chi_v(R, \alpha) = \sum_{k=1}^{N+1} C_{kv}(R) \varphi_k(\alpha), \quad (14)$$

де  $C_{kv}(R)$  - невідомі коефіцієнти, які параметрично залежать від радіальної змінної. Підставивши (14) у рівняння (13), одержимо систему однорідних алгебраїчних рівнянь, яка визначає як каналові функції  $\chi_v(R, \alpha)$ , так і адіабатичні потенціали  $U_v(R)$ .

Для нескінченної маси ядра ( $m_1$ ) та рівних мас другої і третьої частинок, потенціальна енергія має два полюси у точках  $\alpha = 0$  та  $\alpha = \beta_2 = \beta_3 = \pi/4$ . Однак

базисні функції для триплетних станів у цих точках рівні нулеві, так що матричні елементи потенціальної енергії є скінченими величинами. У випадку, коли маса ядра скінчена, то полюс потенціальної енергії, який міститься у точці  $\alpha = \pi/4$ , зміщується із цієї точки у напрямку менших кутів. У цьому випадку матричні елементи потенціальної енергії визначаються розбіжними інтегралами.

Для розв'язання рівняння (10) зручно скористатись масштабованим рівнянням Шредінгера [7]. Для цього помножимо рівняння (10) на деяку функцію  $g(\alpha)$ , яка у області змінної  $\alpha \in (0, \pi/2)$  є додатною, а в особливих точках  $\alpha = \beta_i$  обертається в нуль, при цьому вона повинна задовольняти наступній умові:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \beta_i} g(\alpha)V(R, \alpha) = a_i, \quad (15)$$

де  $a_i$  – константи, відмінні від нуля. Саме ці константи несуть інформацію про полюси потенціальної енергії. У роботі [12] розглянуто кілька можливих виразів для масштабованої функції  $g(\alpha)$ . Виявляється, що різні масштабовані функції лише впливають на швидкість збіжності рядів розкладу за каналовими функціями. У даній роботі ми використовуємо масштабовану функцію виду:

$$g(\alpha) = |\sin \alpha \sin(\alpha + \beta_1) \sin(\alpha - \beta_2)|. \quad (16)$$

Такого ж виду масштабована функція була використана у роботі [13].

### Адіабатичні потенціали та каналові функції

Для знаходження адіабатичних потенціалів та каналових функцій запишемо масштабоване рівняння, яке одержується із рівняння (13) після множення його на масштабований множник (16) при фіксованій радіальній змінній, а саме:

$$g(\alpha) \left( \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - 2R^2V(R, \alpha) + 2R^2U_v(R) \right) \chi_v(R, \alpha) = 0. \quad (17)$$

Скориставшись розкладом (14), одержимо рівняння (1) для узагальненої крайової задачі на власні значення та власні функції. Розв'язуючи одержану крайову задачу, отримуємо адіабатичні потенціали та каналові функції.

Числові розрахунки проведені для розмірності базису, що дорівнює 10, 20 та 40. Такі числові розмірності дають змогу провести екстраполяцію одержаних значень енергій за формулою Річардсона [14]. Залежність адіабатичних потенціалів від радіальної змінної для синглетних та триплетних нижчих трьох серій приведено на рисунках 1 та 2.

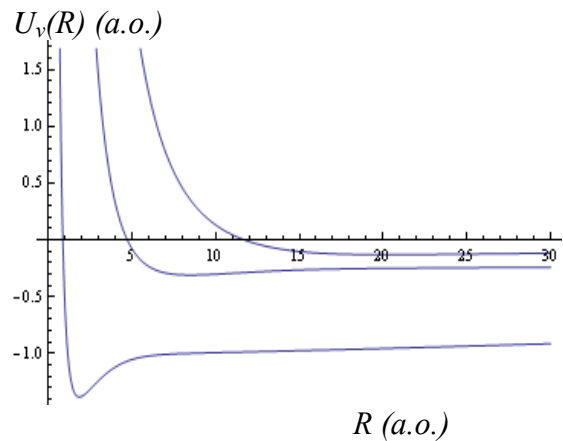


Рис. 1. Залежність нижчих синглетних адіабатичних потенціалів від радіальної незалежної змінної, які одержані при розмірності базису, що дорівнює 40.

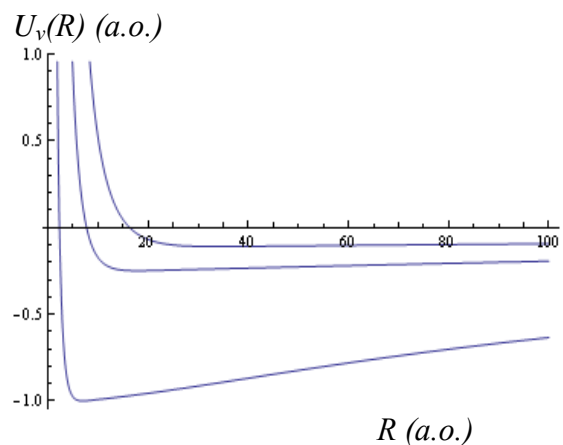


Рис. 2. Залежність нижчих триплетних адіабатичних потенціалів від радіальної незалежної змінної, які одержані при розмірності базису, що дорівнює 40.

Таблиця 1

**Значення енергій зв'язку (- E а.о.)  $^{1,3}\text{S}$  - основних станів ізотопів негативного іона водню, які одержані при розрахунках адіабатичних потенціалів, при розмірності базису, що дорівнює 40, та екстраполіровані за формулою Річардсона**

Стани ізотопів	- E при N=40	Експ. (-E)	$\langle r \rangle$ а.о.	$\langle r^2 \rangle$ а.о.	Інші підходи (- E)	Відн. пох. %
$^1\text{S} (^{\infty}\text{H}^-)$	0.521985	0.525398	4.690	5.266	0.527751 [15]	0.5
$^1\text{S} (^3\text{T}^-)$	0.521923	0.525343	4.691	5.268	0.527649 [15]	0.4
$^1\text{S} (^2\text{D}^-)$	0.521901	0.525319	4.693	5.269	0.527598 [15]	0.4
$^1\text{S} (^1\text{H}^-)$	0.521816	0.525234	4.696	5.273	0.527446 [15]	0.4
$^3\text{S} (^{\infty}\text{H}^-)$	0.482855	0.502175	17.347	18.589	0.4859[16], 0.478[17]	3.8
$^3\text{S} (^3\text{T}^-)$	0.482838	0.502164	12.5719	13.342		3.8
$^3\text{S} (^2\text{D}^-)$	0.482835	0.502158	12.5708	13.341		3.8
$^3\text{S} (^1\text{H}^-)$	0.482805	0.502143	12.581	13.351		3.8

Таблиця 2

**Залежність енергій зв'язку (- E а.о.)  $^{1,3}\text{S}$  - станів нижчих двох серій негативного іону ізотопу водню ( $^{\infty}\text{H}^-$ ) від розмірності базису при визначенні адіабатичних потенціалів**

Рівні	10	20	40	екстрапол.	Інші підходи
$^1\text{S}(1s^2)$	0.505837	0.517587	0.521985	0.525398	
$^1\text{S}(1s2s)$	0.405607	0.450403	0.475804	0.503207	
$^1\text{S}(1s3s)$	0.351878	0.414626	0.454413	0.499809	
$^1\text{S}(2s^2)$	0.1187143	0.126256	0.129424	0.13219	0.148782 [18]
$^1\text{S}(2s3s)$	0.092868	0.107211	0.116133	0.126222	0.126021 [18]
$^1\text{S}(2s4s)$	0.079350	0.097214	0.109557	0.124174	0.125058 [18]
$^3\text{S}(1s2s)$	0.429726	0.464340	0.482855	0.502175	0.4859 [16], 0.478 [17]
$^3\text{S}(1s3s)$	0.371971	0.426953	0.461138	0.499786	
$^3\text{S}(1s4s)$	0.328533	0.396461	0.442308	0.496077	
$^3\text{S}(2s3s)$	0.098155	0.111494	0.118840	0.126637	0.1271 [18]
$^3\text{S}(2s4s)$	0.083626	0.100554	0.111742	0.124746	0.1251 [18]
$^3\text{S}(2s5s)$	0.073177	0.092277	0.106105	0.122785	0.1250 [18]

### Обговорення результатів

В таблицях 1-5 наведені результати проведених нами розрахунків. У таблиці 1 наведені значення енергій синглетних та триплетних основних станів ізотопів негативного іону водню, одержані при значеннях розмірності базису, що

дорівнює 40, середні та середньоквадратичні радіуси, екстрапольовані значення енергій за формулою Річардсона при розмірностях базису 10, 20 та 40, а також значення енергій, отриманих у інших підходах.

Таблиця 3

**Залежність енергій зв'язку (-  $E$  а.о.)  $^{1,3}\text{S}$  - станів нижчих двох серій негативного іону ізотопу водню ( $^1\text{H}$ ) від розмірності базису при визначенні адіабатичних потенціалів**

Рівні	10	20	40	екстрапол.
$^1\text{S}(1s^2)$	0.505649	0.517411	0.521815	0.525234
$^1\text{S}(1s2s)$	0.405527	0.450339	0.475754	0.503175
$^1\text{S}(1s3s)$	0.351818	0.414576	0.454374	0.499785
$^1\text{S}(2s^2)$	0.118657	0.126202	0.129372	0.13214
$^1\text{S}(2s3s)$	0.092836	0.107183	0.116110	0.126206
$^1\text{S}(2s4s)$	0.079326	0.097192	0.109539	0.124162
$^3\text{S}(1s2s)$	0.429652	0.464277	0.482805	0.502143
$^3\text{S}(1s3s)$	0.371916	0.426907	0.461076	0.499694
$^3\text{S}(1s4s)$	0.328490	0.396423	0.442277	0.496056
$^3\text{S}(2s3s)$	0.098125	0.111466	0.118817	0.126622
$^3\text{S}(2s4s)$	0.083604	0.100534	0.111724	0.124731
$^3\text{S}(2s5s)$	0.073159	0.092260	0.106092	0.122778

Таблиця 4

**Залежність енергій зв'язку (-  $E$  а.о.)  $^{1,3}\text{S}$  - станів нижчих двох серій негативного іону ізотопу водню ( $^2\text{D}$ ) від розмірності базису при визначенні адіабатичних потенціалів**

Рівні	10	20	40	екстрапол.
$^1\text{S}(1s^2)$	0.505743	0.517499	0.521901	0.525319
$^1\text{S}(1s2s)$	0.405567	0.450371	0.475779	0.503191
$^1\text{S}(1s3s)$	0.351849	0.414601	0.454393	0.499796
$^1\text{S}(2s^2)$	0.118686	0.126229	0.12940	0.132171
$^1\text{S}(2s3s)$	0.092851	0.107197	0.116121	0.126212
$^1\text{S}(2s4s)$	0.079338	0.097293	0.109548	0.123988
$^3\text{S}(1s2s)$	0.429689	0.464309	0.482830	0.502158
$^3\text{S}(1s3s)$	0.371942	0.426930	0.461095	0.499707
$^3\text{S}(1s4s)$	0.328511	0.396442	0.442293	0.496068
$^3\text{S}(2s3s)$	0.098140	0.111480	0.118829	0.126631
$^3\text{S}(2s4s)$	0.083615	0.100544	0.111733	0.124738
$^3\text{S}(2s5s)$	0.073168	0.092268	0.106098	0.122781

Аналіз приведених результатів та порівняння їх із точними результатами, одержаними А. Фроловим [15] за допомогою варіаційного методу з використанням лінійних та нелінійних параметрів, показує, що для основних синглетних станів негативного іону водню одержані результати співпадають із відносно похибкою, яка не перевищує половину відсотка. Значення енергій основного стану ізотопів уже при розмірності базису, рівній 40,

різняються лише у четвертому знаку після коми, а середні значення радіусів різняться в третьому знаку. Для триплетних станів енергія основних станів змінюється у п'ятому знаку, а для середніх значень радіусів – у четвертому знаку. Більше того, екстраполяційні значення енергій у всіх ізотопів лежать під порогом іонізації атому водню. Такий самий результат показує метод використаний у роботі [19].

**Залежність енергій зв'язку ( $-E$  а.о.)  $^{1,3}\text{S}$  - станів нижчих двох серій негативного іону ізотопу водню ( $^3\text{T}$ ) від розмірності базису при визначенні адіабатичних потенціалів**

Рівні	10	20	40	екстрапол.
$^1\text{S}(1s^2)$	0.505774	0.517528	0.521928	0.525343
$^1\text{S}(1s2s)$	0.405580	0.450382	0.475787	0.503195
$^1\text{S}(1s3s)$	0.351858	0.414610	0.454400	0.499799
$^1\text{S}(2s^2)$	0.1186953	0.126238	0.129407	0.132174
$^1\text{S}(2s3s)$	0.092857	0.107202	0.116125	0.126215
$^1\text{S}(2s4s)$	0.079342	0.097206	0.109551	0.124171
$^3\text{S}(1s2s)$	0.429702	0.464319	0.482838	0.502164
$^3\text{S}(1s3s)$	0.371952	0.426938	0.461101	0.499711
$^3\text{S}(1s4s)$	0.328518	0.396448	0.442298	0.496071
$^3\text{S}(2s3s)$	0.098145	0.111485	0.118833	0.126633
$^3\text{S}(2s4s)$	0.083619	0.100547	0.111736	0.124742
$^3\text{S}(2s5s)$	0.073171	0.092272	0.106099	0.122777

У таблицях 2-5 наведені результати одночастинкових та двочастинкових збуджень для нижчих синглетних та триплетних станів. Цікаво відмітити, для синглетних станів ізотопів результати екстраполяції показують, що стани  $1s2s$  лежать під порогом іонізації у межах  $0.0031\div 0.0032$  а.о., в той час як для триплетних станів ізотопів ці стани лежать, відповідно, у межах  $0.0021\div 0.0022$  а.о. Різниця між цими значеннями дає оцінку, яка характеризує величину спин-спінової взаємодії, що складає приблизно  $10^{-3}$  а.о.

**Висновки**

Проведені розрахунки показали, що використання масштабованого рівняння Шредінгера для задачі трьох тіл в одновимірному просторі дає змогу отримати

спектр мас для ізотопів негативного іону атома водню та визначити величини ізотопічних ефектів для довільної системи трьох частинок. При цьому спектр одновимірного негативного іону водню співпадає із результатами для тривимірного простору, принаймні, для  $^{1,3}\text{S}$  - станів.

Використання екстраполяційної формули Річардсона відкриває шлях до доведення існування збудженого стану для негативного іону атома водню. Існування такого стану залишається відкритим питанням [6]. Для підтвердження такого факту необхідно провести розрахунки при виході за рамки наближення Борна-Оппенгеймера, тобто визначити внесок неадіабатичних потенціалів.

**СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ**

1. Frolov A.M. // Phys. Rev.A – 1998. - V. 57. - N4. - P. 2436.
2. Accad H., Pekeris C.L., Schiff B. // Phys. Rev.A – 1971. – V.4. – N2. - P. 516.
3. Ho Y.K., Bhatia A.K. // Phys. Rev.A – 1991. – V.44. – P.2895.
4. Lin C.D. // Phys. Rep. – 1995. – V.257. – P. 1.
5. Macek J.H. // J. Phys. B. – 1968. – v.1. - P. 831.
6. Rau A.R.P. // J.Astrophys. Astr. – 1996. – V.17. - P. 113.
7. Nakatsuji H. // Phys. Rev. Lett. – 2004. – V.93. - N3. - P. 030403.
8. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики, т.3. – Москва: Мир, 1982. - 443 с.
9. Варшалович Д.А., Москальов А.Н., Херсонский В.К., Квантовая теория углового момента. – Ленинград: Наука, 1975. – 441 с.

10. Уиттекер Э.Т., Ватсон Дж.Н. Курс современного анализа, т.2. – Москва: Физ.-мат. лит., 1963. – 516 с.
11. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. – Москва: Наука, 1976. – 580 с.
12. Nakashima H., Nakatsuji H., // J.Chem. Phys. – 2007. – V.127. - P. 224104.
13. Nakashima H., Nakatsuji H., // J.Chem. Phys. – 2008. – V.128. - P. 154107.
14. Шехттер Х. Анализ методов дискретизации для обыкновенных дифференциальных уравнений. – Москва: Мир, 1978. – 461 с.
15. Frolov A.M., Smith V.H. // Phys. Rev. A. -1994. – V.49, - №2. – P. 3580.
16. Lowrey G.R., Present R.D. // Ap.J. – 1957. – V.125. - P. 611L.
17. Гайсак М., Довганич М., Онисько В. // Вісник УжНУ, Серія Фізика. – 2000. – Т.8. – С. 173.
18. Chen M.K. // J. Phys. B. – 1997. - V.30. – P. 1669.
19. Гайсак М., Чундак М. // Вісник УжНУ, Серія Фізика. – 2009. – Т.24. – С. 57.

Стаття надійшла до редакції 29.05.2011

I. Haysak<sup>1</sup>, M. Haysak<sup>2</sup>, I. Lamer<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54

<sup>2</sup>Institute of Electron Physics NASc of Ukraine, 88017, Uzhhorod, Universitetskaya Str., 21

## ISOTOPIC EFFECTS FOR SINGLET AND TRIPLET STATES OF NEGATIVE HYDROGEN ATOM ION

Bounding energy values for lower two singlet and triplet series of the negative hydrogen atom ion in one-dimensional space were calculated in the framework of hyperspherical coordinates method. Generalized boundary problem on eigenvalues and eigenfunctions for basis dimensions 10, 20 and 40 was solved while founding the adiabatic potentials. The radial system was solved in the Born – Oppenheimer approximation. Extrapolation Richardson's formula was used in order to improve the results. It was found that all isotopes in singlet state except the basic state have an excited state, affinity energy of which is  $0.0031 \div 0.0032$  a.u. Triplet states have one bound state, affinity energy value of which lies in the interval of  $0.0021 \div 0.0022$  a.u.

**Key words:** hyperspherical coordinates method, adiabatic potentials, hydrogen atom.

И. Гайсак<sup>1</sup>, М. Гайсак<sup>2</sup>, И. Ламер<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

<sup>2</sup>Институт электронной физики НАН Украины, 88017, Ужгород, ул. Университетская, 21

## ИЗОТОПИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ ДЛЯ СИНГЛЕТНЫХ И ТРИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА АТОМА ВОДОРОДА

В рамках метода гиперсферических координат проведено расчеты энергий связи двух нижних синглетных и триплетных серий изотопов отрицательного иона атома водорода в одномерном пространстве. При определении адиабатических потенциалов решалась обобщенная краевая задача на собственные значения и собственные функции при размерностях базиса 10, 20 и 40. Радиальная система решалась в приближении Борна-Оппенгеймера. Для улучшения результатов применена экстраполяционная формула Ричардсона. Показано, что все изотопы в синглетном состоянии, кроме основного состояния, имеют возбужденное состояние, энергия сродства которого составляет  $0.0031 \div 0.0032$  а.е. Триплетные состояния изотопов имеют одно связанное состояние, энергия сродства которых лежит в интервале  $0.0021 \div 0.0022$  а.е.

**Ключевые слова:** метод гиперсферических координат, атом водорода, адиабатический потенциал.