

УДК 539.124+539.189+530.145

М.І. Гайсак¹, І.І. Гайсак², М.Я. Євич², Р.М. Євич²

¹Інститут електронної фізики НАН України, вул. Університетська, 21, Ужгород, 88016

²Ужгородський національний університет, вул. Волошина, 54, Ужгород, 88000

e-mail: m.haysak@gmail.com

ВЗАЄМОДІЯ ПОЗИТРОНА З ВОДНЕВОПОДІБНИМИ АТОМНИМИ СИСТЕМАМИ В ГІПЕРСФЕРИЧНОМУ ПІДХОДІ

В рамках адіабатичного гіперсферичного підходу в одновимірному просторі проведені розрахунки енергій зв'язку основних та нижчих автоіонізаційних збуджень у триплетних станах для тричастинкових систем при взаємодії позитрона з атомними системами Н, He⁺ та Li²⁺. Показано, що тільки для системи (e⁺Н) енергія зв'язку лежить під порогом іонізації атома водню. В інших випадках енергія основного стану лежить над порогом іонізації відповідної системи. Виявлено існування резонансних квантових станів, які збігаються до резонансних рівнів системи.

Ключові слова: позитрон, накладання конфігурацій, автоіонізаційні стани, крайові задачі, відносні змінні Якобі, енергія спорідненості.

Вступ

Взаємодія позитронів з атомними системами має важливе теоретичне і практичне значення. Зокрема, позитронна спектроскопія застосовується для визначення різних домішок у кристалах, а також в позитронній томографії [1-2]. Крім того, оскільки позитрон є античастинкою для електрона, то важливе значення має процес анігіляції електрон-позитронної пари, який визначає час життя системи.

Резонанси в тричастинкових квантових системах (Ps⁻, e⁺Н, e⁺He⁺) розглядалися у роботах [3-8]. При розрахунках використовувались наступні методи: стабілізаційний [3], гіперсферичних координат (ГСК) [9], комплексних обертань [8], метод дискретизації [6] та функціоналу густини [7].

У даній роботі розглядається гранична задача на власні значення та власні функції системи трьох тіл з крайовими умовами Діріхле (КУД) та Неймана (КУН) в одновимірному просторі. Для знаходження енергій та хвильових функцій квантової системи використаний метод ГСК. У якості базисних функцій використані власні функції узагальненої крайової задачі при нульовому значенні

параметра [9]. При цьому взаємодія позитрона з водневоподібною атомною системою розглядалася нами як задача трьох тіл. В якості змінних вибрані відносні координати Якобі [9]. Вибір саме таких координат дозволяє відокремити рух системи центру мас та описати поляризаційні ефекти у малочастинкових системах. Розв'язок нерелятивістського рівняння Шредінгера зводиться до розв'язування узагальненої крайової задачі на власні значення та власні функції на компактній множині за кутовою змінною та крайової задачі на некомпактній множині за радіальною змінною. Розв'язок обох задач проведений нами чисельними методами.

Нерелятивістське стаціонарне рівняння Шредінгера. Відносні змінні Якобі

В одновимірному просторі оператор Гамільтона системи для задачі трьох тіл в атомній системі одиниць має простий вигляд:

$$H = -\sum_{i=1}^3 \frac{1}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{j < k=1}^3 \frac{q_j q_k}{|x_j - x_k|}, \quad (1)$$

де m_i, x_i, q_i – відповідно маса, координата та заряд i -ої частинки. Нерелятивістське стаціонарне рівняння Шредінгера має наступний вигляд:

$$H\Psi(x_1, x_2, x_3) = \tilde{E}\Psi(x_1, x_2, x_3), \quad (2)$$

де \tilde{E} – повна енергія системи, а $\Psi(x_1, x_2, x_3)$ – хвильова функція системи.

Вид гамільтоніана (1) допускає можливість відокремити рух системи центру мас. Для цього необхідно ввести відносні змінні Якобі [9], які задаються у вигляді

$$\rho = d_1(x_3 - x_2), \tau = d_2\left(x_1 - \frac{m_2x_2 + m_3x_3}{m_2 + m_3}\right), \quad (3)$$

$$\mathfrak{R} = \frac{m_1x_1 + m_2x_2 + m_3x_3}{m_1 + m_2 + m_3},$$

де d_1, d_2 – константи, які забезпечують ортогональність перетворень (3); ρ, τ – відстані між третьою і другою частинками та першою і системою центру мас другої та третьої частинок відповідно, \mathfrak{R} – координата системи центру мас. У відносних змінних Якобі (3) нерелятивістське рівняння Шредінгера (2) еквівалентне наступній системі рівнянь:

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

$$\mu_1 = \frac{m_2m_3}{d_1^2m_{23}}, \quad \mu_2 = \frac{m_1m_{23}}{d_2^2M}, \quad M = m_1 + m_2 + m_3,$$

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

де, відповідно, μ_i – відносні маси, M – повна маса, ε – енергія відносного руху системи, $V(\rho, \tau)$ – потенціальна енергія у відносних координатах Якобі (3).

Перше рівняння системи (4) описує відносний рух системи, а друге – рух системи центру мас. Оскільки друге рівняння (4) є відомим рівнянням Гельмгольца, розв'язки якого добре відомі,

нам необхідно знайти частинні розв'язки першого рівняння (4).

Знаходження розв'язків відносного руху системи (4) зручно проводити у еліптичній системі координат. Для цього замість змінних (ρ, τ) введемо змінні полярну та кутову (R, α) , які задаються у вигляді:

$$R = \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu} \rho^2 + \frac{\mu_2}{\mu} \tau^2}, \quad \operatorname{tg} \alpha = \frac{\sqrt{\mu_1} \rho}{\sqrt{\mu_2} \tau},$$

$$\mu = \sqrt{\mu_1 \mu_2}, \quad \left(0 \leq R < \infty, \quad 0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2} \right). \quad (5)$$

В еліптичних змінних (5) відносне рівняння руху набуде вигляду:

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \left(\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) + V(R, \alpha) - \varepsilon \right] \psi(R, \alpha) = 0. \quad (6)$$

Частинні розв'язки рівняння (6) несуть інформацію як про енергію системи, так і про хвильові функції.

Адіабатичні потенціали та радіальне рівняння

При постійній радіальній змінній рівняння (6) стає звичайним лінійним диференціальним рівнянням другого порядку із змінними коефіцієнтами. Розв'язки такого рівняння залежать від виду потенціальної енергії і можуть бути знайдені в аналітичному вигляді, або чисельно. Таким чином, рівняння (6) можна розглядати як параметричне рівняння, в якому в якості параметра вибрано радіальну змінну (R) . При фіксованому значенні радіальної змінної рівняння (6) набуде вигляду:

$$\left(\frac{d^2}{d\alpha^2} - 2R^2 \mu V(R, \alpha) + 2\mu R^2 U_v(R) \right) \chi_v(R, \alpha) = 0. \quad (7)$$

де

$$V(R, \alpha) = \frac{\sqrt{\mu\mu_2}}{R} \left(\frac{q_2q_3d_1\sqrt{\mu_1}}{|\sin \alpha| \sqrt{\mu_2}} + \frac{q_1q_2d_2 \sin \beta_2}{|\sin(\alpha + \beta_2)|} + \frac{q_1q_3d_2 \sin \beta_3}{|\sin(\alpha - \beta_3)|} \right)$$

а β_2, β_3 – кути, які виражаються через маси системи, а саме $\text{ctg } \beta_i = \frac{\sqrt{\mu_1 \mu_2}}{m_i}$.

Рівняння (7) є рівнянням на власні значення $U_\nu(R)$ (адіабатичні потенціали) та власні функції $\chi_\nu(R, \alpha)$ (каналові функції). Як видно із (7), власні значення та власні функції параметрично залежать від радіальної змінної (R). Рівняння (7) має аналітичний розв'язок лише при нульовому значенні параметра (R). При цьому власні значення співпадають з константою, яка визначається періодичністю розв'язку, а власні функції задаються тригонометричними функціями. При всіх інших значеннях параметру (R) рівняння (7) розв'язується лише чисельно.

Для $R=0$ крайова задача (7) з КУД на інтервалі $[0, \pi/2]$ має періодичні розв'язки з періодом π $\{\sin(2n\alpha)\}$, а з КУН – $\{\cos(2n\alpha)\}$. Із цих тригонометричних функцій можна будувати базисні функції, які задовольняють КУД, КУН чи мішаним умовам для синглетних та триплетних станів тричастинкових квантових систем. Так, наприклад, для синглетних станів з КУД за змінною α система ортонормованих базисних функцій має вигляд $\varphi_n(\alpha) = \{2/\sqrt{\pi} \sin(2n\alpha)\}$, а для триплетних – $\phi_n(\alpha) = \{2/\sqrt{\pi} \sin(4n\alpha)\}$. Аналогічно будуються синглетні та триплетні системи для КУН та мішаних задач.

Використовуючи базисні функції, можна знайти розв'язок крайової задачі (7), тобто знайти адіабатичні потенціали та каналові функції для синглетних і триплетних станів. Розв'язки рівняння (7) зручно звести до розв'язування однорідної системи N -го порядку алгебраїчних однорідних рівнянь за методом накладання конфігурацій [9]. Для цього розкладемо каналову функцію (7) для певного стану за відповідним базисом у ряд Фур'є за кутовою змінною, при цьому коефіцієнти розкладу будуть параметрично залежати від радіальної змінної (R)

$$\chi_\nu(R, \alpha) = \sum_{n=1}^N C_{\nu n}(R) \varphi_n(\alpha), \quad (8)$$

де $C_{\nu n}(R)$ – невідомі коефіцієнти. Скориставшись ортогональною системою функцій $\varphi_n(\alpha)$ на інтервалі $[0, \pi/2]$, з врахуванням (7) одержимо систему N лінійних однорідних рівнянь для визначення невідомих коефіцієнтів $C_{\nu n}(R)$, що задають як каналові функції $\chi_\nu(R, \alpha)$, так і адіабатичні потенціали $U_\nu(R)$. Оскільки розв'язки однорідної задачі задаються з точністю до константи, то цю константу вибирають так, щоб каналові функції задовольняли умові нормування

$$\int_0^{\pi/2} \chi_\nu(R, \alpha) \chi_\mu(R, \alpha) d\alpha = \delta_{\nu\mu}. \quad (9)$$

Каналові функції використаємо в якості базисних функцій при розв'язуванні радіального рівняння, яке ми отримуємо при знаходженні розв'язку (6), використавши метод змішування конфігурацій. Для цього представимо розв'язок (6) у вигляді ряду за каналовими функціями крайової задачі (7), а саме:

$$\psi(R, \alpha) = \sum_\nu f_\nu(R) \chi_\nu(R, \alpha) \quad (10)$$

де $f_\nu(R)$ – невідомі коефіцієнти. Підставляючи (10) у (6), і, використавши (7), одержимо систему рівнянь, якій задовольняють невідомі коефіцієнти $f_\nu(R)$:

$$\left[\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial}{\partial R} \right) + U_\nu(R) + 2\mu\varepsilon \right] f_\nu(R) + \sum_\kappa \left(2P_{\nu\kappa}(R) \frac{d}{dR} + Q_{\nu\kappa}(R) \right) f_\kappa(R) = 0, \quad (11)$$

де $P_{\nu\kappa}(R), Q_{\nu\kappa}(R)$ – неадіабатичні потенціали, які виражаються через каналові функції $\chi_\nu(R, \alpha)$, а саме

$$P_{\mu\nu}(R) = \left\langle \chi_\mu(R, \alpha) \left| \frac{\partial}{\partial R} \chi_\nu(R, \alpha) \right. \right\rangle, \\ Q_{\mu\nu}(R) = \left\langle \chi_\mu(R, \alpha) \left| \frac{\partial^2}{\partial R^2} \chi_\nu(R, \alpha) \right. \right\rangle, \quad (12)$$

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

Систему радіальних рівнянь (11) розв'язуємо у наближенні Борна-Оппенгеймера, тобто знехтуємо неадіабатичними потенціалами, що еквівалентно умові плавної залежності каналових функцій від радіальної змінної (R)

$$\left(\frac{\partial}{\partial R} \chi_o(R, \alpha) \approx 0\right).$$

У цьому наближенні система (11) розщеплюється.

Розрахунки адіабатичних потенціалів та енергій зв'язку квантових систем

Для отримання адіабатичних потенціалів необхідно розв'язати крайову задачу (7) та лінійну алгебраїчну однорідну систему, що містить N рівнянь. При складанні такої системи необхідно знайти матричні елементи від оператора потенціальної енергії

$$\langle \varphi_i | V | \varphi_j \rangle = \int_0^{\pi/2} \varphi_i(\alpha) V(R, \alpha) \varphi_j(\alpha) d\alpha. \quad (13)$$

Оскільки оператор потенціальної енергії має полюси за кутовою змінною, то скористаємось методом, запропонованим Г. Накатсуї [11]. Для цього введемо масштабований множник $g(\alpha, \beta_i)$, який є функцією кутової змінної, що задовольняє в полюсних точках β_i умові

$$\lim_{\alpha \rightarrow \beta_i} g(\alpha, \beta_i) V(R, \alpha, \beta_i) = \kappa_i \neq 0. \quad (14)$$

Масштабований множник визначається функціональною залежністю оператора потенціальної енергії. Як показано у роботі [11], від цього множника залежать швидкості збіжності функціональних рядів розкладу за базисними функціями (8). Для нашого випадку розглянемо масштабовану функцію виду

$$g(\alpha, \beta_i) = |\sin(\alpha) \sin(\alpha + \beta_2) \sin(\alpha - \beta_3)|. \quad (15)$$

Оскільки маси позитрона (m_2) та електрона (m_3) рівні, то кути $\beta_2 = \beta_3$, а $\beta_1 = 0$. Введення масштабованого множника є процедурою, еквівалентною переходу до

неортогонального базису, що призводить до узагальненої задачі на власні значення та власні функції.

Використавши розклад (8) з (7), одержимо систему алгебраїчних лінійних однорідних рівнянь для знаходження адіабатичних потенціалів та каналових функцій

$$\sum_{m=1}^N \langle \varphi_n | g \left(\frac{d^2}{d\alpha^2} - 2R^2 \mu V(R, \alpha) + 2\mu R^2 U_v(R) \right) | \varphi_m \rangle C_{vm}(R) = 0. \quad (16)$$

Розв'язавши систему (16), отримаємо адіабатичні потенціали $U_v(R)$ та коефіцієнти $C_{vm}(R)$, а тим самим - каналові функції з (8). Система (16) розв'язувалась нами для різних розмірностей N базисних функцій, які задовольняють КУН та КУД.

На рис. 1 представлені графіки перших чотирьох риплетних термів, які описують енергетичний спектр основного стану системи позитрон - позитивний іон атома гелію (e^+He^+) та їх збуджень. Розрахунки проведено при чотиривимірному базисі.

Як видно з представлених на рисунку даних, величини термів залежать від граничних умов крайової задачі. Проведені розрахунки показали, що при збільшенні розмірності базису (2–1600) результати прямують до близьких значень як потенціалів, так і енергій. Маючи адіабатичні потенціали, можна визначити величини енергетичних рівнів розглядуваної тричастинкової системи.

В таблицях 1–3 наведені значення енергій основних станів систем (e^+H , e^+He^+ , e^+Li^{2+}) при різних розмірностях базису та значення середніх радіусів (CP), а також при розмірності базису 400-радіальні збудження системи.

Як видно із табл. 1, значення енергії для КУН лежить під порогом іонізації атома (H 0.5 а.о.), а величина енергії близька до наведеної у [6], при цьому енергія спорідненості дорівнює 0.656 eV.

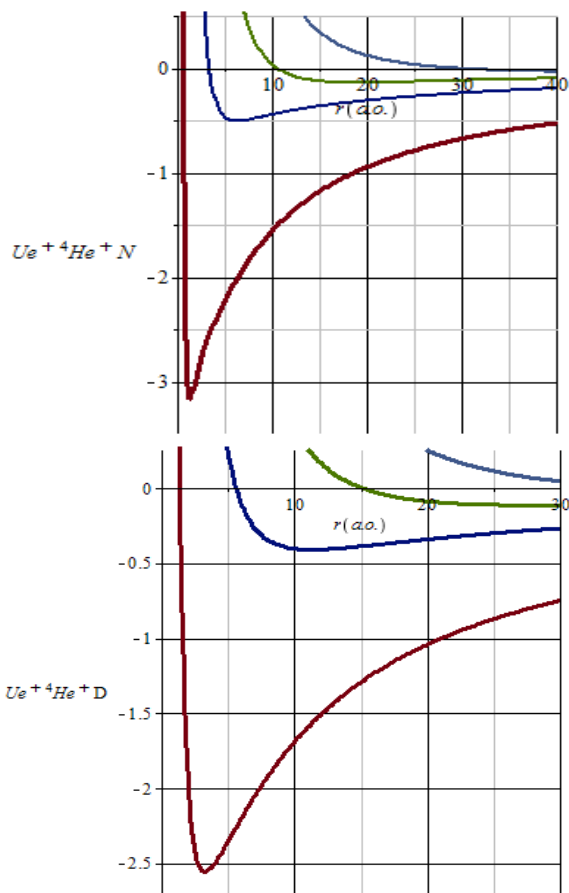


Рис.1. Залежність адиабатичних потенціалів від радіальної змінної, отриманих з КУН та КУД для чотиривимірного базису.

Таблиця 1.

Значення енергій (а.о.) для основного стану (³S) та середніх радіусів (а.о.) (e⁺H) при розмірності базису N

N	-Е КУН	СР	-Е КУД	СР
400	0.5240752 0.49825*	2.63 20.66	0.498768 0.49616*	16.6 23.66
800	0.5240925	2.63	0.499467	21
1600	0.5240965	2.63	0.499745	25.3
0.550436989 ⁶ ; 0.49974 ⁷ ;				

Таблиця 2.

Значення енергій (а.о.) для основного стану та середніх радіусів (а.о.) (e⁺He⁺) при розмірності базису N

N	-Е КЗН	СР	-Е КЗД	СР
2	0.950676	1.46	0.772082	2.84
100	1.882388	10.4 9	1.88239	10.5 4

400	1.953804	25.3 9	1.953843	25.4 1
	1.945986 *	25.7 2	1.946034*	25.7 4
800	1.971104	39.8 2	1.971116 2	39.8 4
1600	1.981915	62.6 4	1.981918 9	62.6 5
0.371 ^{3,4} ; 0.195 ^{3,4} ; 0.250012 ⁵ ; 0.075595 ⁵				

Значення з КУД лежать під порогом іонізації і співпадають з результатами, одержаними у [7]. Цікаво, що отримані результати для позитрон-водневої системи є досить близькі до результатів електрон-водневої системи [12].

Таблиця 3.

Значення енергій (а.о.) для основного стану та середніх радіусів (а.о.) (e⁺Li²⁺) при розмірності базису N

N	-Е КЗН	СР	-Е КЗД	СР
100	4.187560	7.82	4.188586	7.82
400	4.376252 4.3589*	18.77 18.99	4.3763558 4.359024*	19.17 19.01
800	4.422345	29.38	4.4223780	29.9
1600	4.451297	46.15	4.451297	46.75

Як видно з даних, наведених в таблицях 2-3, величини енергій позитрон-іонної системи для КУН та КУД з високою точністю співпадають, в той час їх СР різняться уже в десятих частках одиниці. Можна зробити висновок, що для зв'язаних станів позитрон-водневої системи із збільшенням розмірності базису середні значення радіусів КУН не змінюються, а для автоіонізаційних станів КУД (величина енергій яких лежить над порогом іонізації) залежить від розмірності базису.

Для інших квантових позитрон-іонних систем потенціал іонізації іонів гелію та літію становить 2 а.о. і 4.5 а.о., відповідно. Тому, як видно із даних таблиць 2-3, середні радіуси позитрон-іонних систем залежать від розмірності базису, на якому діагоналізується гамільтоніан системи.

Поряд із триплетними станами розглядуваних систем існують також і

синглетні стани. Ці стани описуються базисними функціями, які задаються наступним чином: $\varphi_n(\alpha) = \{\cos(4n\alpha)\}$, де $n = 0, 1, 2, \dots$ і $\phi_n(\alpha) = \{\sin(2n\alpha)\}$, де $n = 1, 2, \dots$. Базисна система, яка містить косинуси, є періодичною з періодом $\pi/2$, а та, що містить синуси – з періодом π . Проведені розрахунки показують, що результати обчислень енергій для синглетних станів залежать від розмірності базисної системи, тобто функціональні ряди (8) є розбіжними. Однак, якщо власні значення за модулем зростають, то їх СР прямують до нуля. У даному випадку необхідно проводити процедуру регуляризації, або шукати відповідну масштабуючу функцію, яка дасть можливість усунути дані розбіжності. Резонансні стани для системи (e^+He^+),

отримані у роботах [3-5], пов'язані із першим та другим збудженими термами, що відповідають позитронієвому збудженню. Так, наприклад, енергія основного стану другого каналу складає 0.4784 а.о., а третього – 0.2086 а.о. при розмірності базису 400.

Таким чином, проведені розрахунки показали, що у методі ГСК розв'язування масштабованого рівняння Шредінгера у наближенні Борна-Оппенгеймера дає можливість в одновимірному просторі одержати для триплетних станів резонанси у позитрон-іонних системах, які пов'язані із кутовими та радіальними збудженнями їх підсистем.

У подальшому планується провести розрахунки як положень, так і ширин резонансів при врахуванні адиабатичного наближення та міжканалових зв'язків.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Гольданский В.И. Физическая химия позитронов и позитрония. М: Наука, 1968. – 176 с.
2. Bhatia A.K. Positron Interactions with Atoms and Ions // J. Atom. Mol. Cond. Nano Phys. – 2014. – V. 1. – P. 45–63.
3. Bhatia A.K., Drachman R.J. Search for resonances in positron-atom systems // Phys. Rev. A.– 1990. – V. 42. – P. 5117–5121.
4. Ho Y.K. Resonances in Three-Body Atomic Systems Involving Positrons // Chin. J. Phys. – 1997. – V. 2. – P. 97-120.
- A. Igarashi A., Shimamura I.S-wave resonances in positron scattering by He^+ // Phys. Rev. A. – 1997. – V. 6. – P. 4733-4736.
5. Tolstikhin O.I., Namba C. CTBC–A Program to Solve the Collinear Three-Body Coulomb Problem: Bound States and Scattering Below the Three-Body Disintegration Threshold. - Tokyo: National Institute for Fusion Science, Japan, 2003.
- A. Zubiaga A., Tuomisto F., Puska M.J. Full correlation single-particle positron potentials for a positron and a positronium interacting with atoms // arXiv: 1305.6809v9 [physics.atm-clus], 2014.
6. Gasaneo G., Colavecchia F.D. A wave function for three charged particles with arbitrary masses // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. – 2002. – V. 192. – P. 150-156.
7. Lin C.D. Hyperspherical coordinate approach to atomic and other Coulombic three-body systems // Phys. Rep. – 1995. – V. 257. – P. 1-83.
8. Ho Y.K. The method of complex coordinate rotation and its applications to atomic collision processes // Phys. Rep. – 1983. – V.99. – P. 1-68.
9. Nakatsuji H. Scaled Schrödinger Equation and the Exact Wave Function // Phys. Rev. Lett. – 2004. – V. 93. – P. 030403.
10. Гайсак І., Гайсак М., Ламер І. Ізотопічні ефекти для синглетних та триплетних станів негативного іона атома водню // Вісник УжНУ, Серія фізика. – 2011. – Т.30. – С. 195-202.

Стаття надійшла до редакції 20.08.2015.

M.I. Haysak¹, I.I. Haysak², M.Ya. Yevych², R.M. Yevych²

¹Institute of electron physics NASc Ukraine, str. Universitets'ka, 21, Uzhhorod, 88016

²Uzhgorod national university, Voloshinstr.,54, Uzhhorod,88000

INTERACTION OF POSITRONS WITH HYDROGEN-LIKE ATOMIC SYSTEMS IN HYPERSPHERICAL APPROACH

Within hyperspherical adiabatic approach in one-dimensional space calculations of energies were performed for the main and lower autoionising excitations in triplet states for three-particle systems in positron interactions with atomic systems H, He⁺ and Li²⁺ were performed. It was shown that only for the (e⁺H) systems bond energy is under the ionization threshold of the hydrogen atom. In other cases, the energy of the ground state lays above the ionization threshold of the appropriate system. Existence of resonance quantum states, which coincide to the resonance levels of the system was found.

Keywords: positron, mixing configurations, autoionization states, boundary value problems, Jacobi relative variables, affinity energy.

М.И. Гайсак¹, И.И. Гайсак², М.Я. Евич², Р.М. Евич²

¹Институт электронной физики НАН Украины, ул. Университетская, 21, Ужгород, 88016

²Ужгородский национальный университет, ул. Волошина, 54, Ужгород,88000

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОЗИТРОНА С ВОДОРОДОПОДОБНЫМИ АТОМНЫМИ СИСТЕМАМИ В ГИПЕРСФЕРИЧЕСКОМ ПОДХОДЕ

В рамках адиабатического гиперсферического подхода в одномерном пространстве выполнены расчеты энергий связи основных и низших автоионизационных возбуждений в триплетных состояниях для трехчастичных систем при взаимодействии позитрона с атомными системами H, He⁺ и Li²⁺. Показано, что только для системы (e⁺H) энергия связи лежит под порогом ионизации атома водорода. В других случаях энергия основного состояния лежит над порогом ионизации соответствующих систем. Выявлено существование резонансных квантовых состояний, которые сходятся к резонансным уровням системы.

Ключевые слова: позитрон, наложение конфигураций, автоионизационные состояния, граничные задачи, относительные переменные Якоби, энергия сродства.