

**Бекбаев А.К.^{1,3*}, Азнабаев Д.Т.^{2,3}, Коробов В.И.³,
Кемелжанова С.Е.¹**

¹Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
Казахстан, г. Алматы, *e-mail: bekbaev-askhat@mail.ru

²Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Казахстан, г. Астана

³ОИЯИ, ЛТФ им. Н.Н. Боголюбова, Россия, г. Дубна

ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ВОДОРОДА H_2^+ И HD^+

Для решения фундаментальных проблем физики, химии, биологии и других наук, которые включают в себя множество повседневных практических задач, необходимо располагать методами исследования, позволяющими определять качественный и количественный составы вещества, его строение, свойства и другие параметры в широких пределах температур и давлений, в различных агрегатных состояниях, при малых и больших концентрациях и прочих физических условиях. Универсальным методом, который удовлетворяет всем этим условиям, является спектроскопия. Спектроскопия – раздел физики занимающийся исследованием строения вещества с помощью электромагнитного излучения, поглощенного, испущенного, рассеянного или отраженного объектом исследования. Электромагнитное излучение, разложенное по длинам волн или по энергии, образует спектр. Все современные учения о спектрах электромагнитного излучения базируются на квантовой теории, и тем самым молекулярная спектроскопия основывается на квантовых законах. В данной работе мы используем экспоненциальное разложение волновой функций с вариационным базисным набором типа $\exp(-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_n)$ для систематического вычисления нерелятивистских энергии связанного состояния молекулярных ионов водорода H_2^+ , HD^+ . Мы выполняем расчеты для состояний с общим орбитальным моментом $L = 0-4$ и с набором колебательных квантовых чисел $\nu = 0-10$.

Ключевые слова: энергетический спектр, уравнение Шредингера.

Bekbaev A.K.^{1,3*}, Aznabayev D.T.^{2,3}, Korobov V.I.³ and Kemelzhanova S.E.¹

¹Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty, *e-mail: bekbaev-askhat@mail.ru

²L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Astana

³JINR, BLTP, Russia, Dubna

Determination of the non-relativistic energy spectrum of molecular hydrogen ions H_2^+ and HD^+

To solve the fundamental problems of physics, chemistry, biology and other sciences, which include many day-to-day practical tasks, it is necessary to have research methods that allow us determining the qualitative and quantitative composition of a substance, its structure, properties and other parameters in wide ranges of temperature and pressure, various aggregative states, at low and high concentrations and other physical conditions. A universal method that satisfies all these conditions is spectroscopy. Spectroscopy is the section of physics engaged in the study of the structure of matter using electromagnetic research, absorbed, emitted, scattered or reflected by the object of study. Electromagnetic radiation, decomposed by wavelength or energy, forms a spectrum. All modern studies on the spectra of electromagnetic radiation are based on quantum theory, and thus molecular spectroscopy is based on quantum laws. In this paper, we use the exponential expansion of the wave functions with the variational basis set type $\exp(-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_n)$ for the systematic calculation of non-relativistic bound state energy hydrogen molecular ion H_2^+ and HD^+ . We perform calculations for the

state with the total orbital angular momentum $L=0-4$ with a full set of vibrational quantum numbers $\nu=0-10$.

Key words: energy spectrum, Schrödinger equation.

Бекбаев А.К.^{1,3*}, Азнабаев Д.Т.^{2,3}, Коробов В.И.³, Кемелжанова С.Е.¹

¹әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ., *e-mail: bekbaev-askhat@mail.ru

²А.Н. Гумилев атындағы Евразиялық ұлттық университеті, Қазақстан, Астана қ.

³БЯЗИ, Н.Н. Боголюбов атындағы ТФЛ, Ресей, Дубна

Сутегі молекулалық иондарының H_2^+ және HD^+ релятивистік емес энергиялық спектрін анықтау

Көптеген күнделікті практикалық тапсырмаларды қамтитын физика, химия, биология және басқа ғылымдардың іргелі мәселелерін шешу үшін температураның және қысымы кең ауқымдардағы заттардың, оның құрылымының, қасиеттерінің төмен және жоғары концентрацияларын, басқа да физикалық жағдайларда әртүрлі агрегаттық күйлер үшін параметрлердің сапалық және сандық құрамын анықтауға мүмкіндік беретін зерттеу әдістерін қолдану қажет. Барлық осы шарттарды қанағаттандыратын әмбебап әдіс спектроскопия әдісі болып табылады. Спектроскопия әдісі физика саласын зертеу барысындағы электромагнитті зерттеу әдістерін қолданып, зерттеу нысанымен зерттелетін, сіңірілетін, шығарылатын, шашыратылған немесе көрінетін заттардың құрылымын зерттеумен айналысатын негізгі әдістердің бірі болып табылады. Толқын ұзындығы немесе энергиясы арқылы ыдырайтын электромагниттік сәуленің спектрін құрайды. Электромагниттік сәулелену спектрлеріндегі барлық қазіргі заманғы ілімдер кванттық теорияға негізделген, сондықтан молекулалық спектроскопия кванттық заңдарға негізделген. Біз бұл жұмыста H_2^+ , HD^+ сутегі молекулалық иондарының релятивистік емес энергияның байланыс күйінің жүйелілігін есептеу үшін $\exp(-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_n)$ базистік түрдегі толқындық функцияны пайдаланамыз. $\nu=0-10$ тербеблмелі кванттық сандардың толық жиыны бар және $L=0-4$ жалпы орбиталдық моменттері бар күйлер үшін есептеулер жүргіземіз.

Түйін сөздер: энергиялық спектр, Шредингер теңдеуі.

Введение

Молекулярные спектры ионов водорода, описываются более сложным образом, нежели двухатомные. Наряду с движением электронов существенную роль играют периодические колебания относительного расположения ядер – колебательное движение молекулы и периодические изменения ориентации молекулы как целого в пространстве – вращательное движение молекулы. Таким образом, в молекуле существует три вида движений – электронное, колебательное и вращательное. Это приводит к тому, что спектры молекул значительно сложнее спектров атомов и как правило, имеют очень характерный вид.

В данной работе рассматривается квантовая задача трех тел с кулоновским взаимодействием, которая является одной из наиболее известных неинтегрируемых задач в квантовой механике. Задача на связанные состояния для системы трех частиц допускает сколь угодно точные численные решения на современных вычислительных машинах.

Основной задачей является вычисление нерелятивистских уровней энергии в квантовой

системе трех частиц, в частности рассматриваем молекулярные ионы водорода H_2^+ и HD^+ .

Предложенные эксперименты по лазерной спектроскопии [1,2] для высокоточных измерений колебательного спектра молекулярных ионов водорода H_2^+ и HD^+ , представляют метрологический интерес и нацелены на высокую точность, для того, чтобы улучшить современную точность отношения масс электронов к протону [3], неопределенность спектроскопических данных, а также теоретические расчеты спектров для сравнения. Чтобы удовлетворить этим строгим требованиям, теоретические расчеты должны достичь, по крайней мере, уровня 10 кГц (или 10^{-11} в атомных единицах).

Вариационная волновая функция. Экспоненциальное разложение.

Экспоненциальное разложение для S – состояний имеет вид:

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}, \quad (1)$$

где параметры в экспоненте выбираются тем или иным образом. В ранних работах [4], исполь-

зовавших разложение (1), полученное представление связывали с дискретизацией интегрального представления волновой функции

$$\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) = \int \varphi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A; \alpha) f(\alpha) d\alpha, \quad (2)$$

предложенного еще Гриффином и Уиллером [5] в 1957 году. При этом параметры α_n , β_n и γ_n выбирались в соответствии с различными квадратурными формулами интегрирования (2). Систематическое исследование разложения (1) с использованием параметров, генерируемых с помощью псевдослучайных чисел, было дано в [6]. В предлагаемом подходе нелинейные параметры из уравнения (1) генерируются с помощью следующих простых формул:

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \left[\left[\frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\alpha} \right] (A_2 - A_1) + A_1 \right], \\ \beta_n &= \left[\left[\frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\beta} \right] (B_2 - B_1) + B_1 \right], \\ \gamma_n &= \left[\left[\frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\gamma} \right] (C_2 - C_1) + C_1 \right], \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $[x]$ обозначает дробную часть x , а p_α, p_β и p_γ – некоторые простые числа. Преимущество этих простых генераторов псевдослучайных чисел состоит в воспроизводимости результатов вариационных вычислений. Скорость сходимости экспоненциального разложения с псевдослучайной стратегией выбора нелинейных параметров (3) необычайно высока на наборах базисных функций умеренных размерностей (до 100–200 пробных функций). К недостаткам метода следует отнести быстрое вырождение базиса, что приводит к потере устойчивости вычислений в арифметике двойной точности уже при размерностях базиса $N \sim 200$.

Другой существенной особенностью метода является медленная сходимость разложения для систем с двумя тяжелыми ядрами, такими как H_2^+ и HD^+ . Подобное поведение можно легко объяснить отсутствием осцилляций у экспоненты, описывающей взаимное движение тяжелых ядер, в то время как осцилляторное поведение характерно для колебательных степеней свободы молекулярных систем. Однако рецепт, позволяющий избавиться от этого недостатка, очень прост, достаточно ввести вместо вещественных экспонент в (1) комплексные и перейти к базису

состоящему из вещественных и мнимых частей исходного базиса:

$$\begin{aligned} \psi(r_1, r_2, r_{12}) &= \sum_{n=1}^N \{ C_n \operatorname{Re}[\exp(-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma r_{12})] + \\ &+ D_n \operatorname{Im}[\exp(-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma r_{12})] \}. \end{aligned} \quad (4)$$

Данный рецепт был предложен Ребане и Юсуповым [7] (в варианте для одной комплексной базисной функции) и независимо Коробовым В.И. [8], а также в несколько менее эффективной форме Фроловым и Смитом [9]. Для построения вариационной функции для молекулярных систем при полном орбитальном моменте не равном нулю, удобно использовать разложение по биполярным гармоникам,

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l_1+l_2=L} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}), \quad (5)$$

аналогичное обобщенному хиллераасовскому разложению с произвольным полным угловым моментом системы L

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l_1+l_2=L} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \left[e^{-\alpha r_1 - \beta r_2 - \gamma r_{12}} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{lmn} r_1^l r_2^m r_{12}^n \right], \quad (6)$$

которое связывается с молекулярным разложением

$$\begin{aligned} \psi_M^{L\pi}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \sum_{m=\mu(\pi)}^L \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi} * (\Phi, \Theta, \varphi) F_m^{L\pi}(R, r, \theta); \\ \mu(\lambda) &= \begin{cases} 0, & \text{для } \pi = (-1)^L, \\ 1, & \text{для } \pi = (-1)^{L+1}. \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

с помощью следующего соотношения:

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= \sqrt{2\pi} \sum_{m=\varepsilon(\pi)}^{l_2} T_{l_1 l_2}^{L\pi m} \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi} * (\Phi, \Theta, \varphi) Y_{l_2 m}(\theta, 0), \\ \varepsilon(\pi) &= L - L = l_1 + l_2 - L, \end{aligned} \quad (8)$$

где коэффициенты $T_{l_1 l_2}^{L\pi m}$ выражаются через коэффициенты Клебша-Гордана:

$$T_{l_1 l_2}^{L\pi m} = \left[\left(\frac{1 + \pi(-1)^{l_1+l_2}}{1 + \delta_{0m}} \right) \left(\frac{2l_1 + 1}{2L + 1} \right) \right]^{1/2} \langle l_1 0 l_2 m | L m \rangle. \quad (9)$$

При этом геометрия выбирается так, что $R = r_1$, а $r = r_2$. В этом случае разложение по угловым переменным индексируется параметром l_2 – угловым моментом легкой частицы и быстро сходится по l_2 , так как подпространства

$$\mathcal{H}_m = \sum_{m=\varepsilon(\pi)}^{m_{\max}} \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi}(\Phi, \Theta, \varphi) F_m^{L\pi}(R, r, \theta), \quad (10)$$

и

$$\overline{\mathcal{H}}_m = \sum_{l_2=\varepsilon(\pi)}^{m_{\max}} R^{l_1} r^{l_2} \{Y_{l_1} \otimes Y_{l_2}\}_{LM} G_{l_1 l_2}^{L\pi}(R, r, \theta) \quad (11)$$

совпадают.

Для удобства выпишем экспоненциальное вариационное разложение в полном виде с учетом угловой зависимости волновой функции, описывающей вращательные степени свободы:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{l_1+l_2=\mathcal{L}} Y_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}), \\ G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}) &= \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}, \end{aligned} \quad (12)$$

где $\mathcal{L} = L$, или $L + 1$, в зависимости от пространственной четности состояния, а комплексные параметры в экспоненте генерируются псевдослучайным образом (3).

Замедление сходимости наблюдается в молекулярных расчетах, особенно для состояний с большим вибрационным квантовым числом, это объясняется тем, что частота осцилляций (волновое число) зависит от R – расстояния между ядрами в системе и его изменение обусловлено спадом потенциала эффективного взаимодействия между тяжелыми частицами. В то же время, оптимизируя вариационный интервал для нелинейного параметра, который определяет волновое число решения в наиболее существенной для энергии области, мы получаем неэффективное приближение в других областях по R . Чтобы исправить создавшееся положение необходимо строить многослойное вариационное разложение, состоящее из нескольких неза-

висимых наборов базисных функций, оптимальные вариационные нелинейные параметры для которых ищутся независимым образом. Таким образом, каждый набор базисных функций, определяет оптимальное приближение в определенной области координат системы. Подобная стратегия приводит к тому, что экспоненциальное разложение становится наиболее эффективным и универсальным методом решения для связанных состояний в квантовой задаче трех тел с кулоновским взаимодействием. Возможности этого метода были продемонстрированы в [10-11].

Чтобы решить проблему численной неустойчивости расчетов при больших значениях N первоначально использовался модуль программ «multiprecision» разработанный Бейли [12] для работы с Фортраном-90. Этот пакет позволяет производить расчеты в арифметике с любой наперед заданной точностью. Позднее Коробовым В.И. были разработаны модули программ шестерной и восьмерной точности (соответственно, 48 и 64 десятичных цифр), которые помогли ускорить время счета в пять и более раз по сравнению с пакетом «multiprecision». Важной особенностью нового стандарта Фортрана 90 является возможность использовать модули расширенной точности без существенного изменения исходных программ.

Далее решаем уравнение Шредингера для трехтельной кулоновской системы, используя вариационный подход, основанный на экспоненциальном разложении с произвольно выбранными показателями. Этот подход был обсужден в работах [13-15]. Подробности и конкретная стратегия выбора вариационных нелинейных параметров и базисной структуры, которые были использованы можно найти в [16].

В рамках нашего подхода рассмотрена трехтельная кулоновская система, в которой определены энергетические спектры и волновая функция (ВФ) с учетом релятивистских поправок. Волновую функцию для состояния с общим орбитальным моментом L и с пространственной четностью $\pi = (-1)^L$ запишем следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi_{LM}^{\pi}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1) &= \sum_{l_1+l_2=L} Y_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{r}}_1) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(R, r_1, r_2) \\ G_{l_1 l_2}^{L\pi}(R, r_1, r_2) &= \sum_{n=1}^N \{C_n \operatorname{Re}[e^{-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_2}] + D_n \operatorname{Im}[e^{-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_2}]\} \end{aligned} \quad (13)$$

где комплексные экспоненты, α , β и γ , генерируются псевдослучайным образом.

Когда показатели α_n , β_n и γ_n являются реальными, метод обнаруживает медленную сходимость для кулоновских систем молекулярного типа. Таким образом, использование комплексных показателей позволяет воспроизвести осцилляторное поведение колебательной

части волновой функции и улучшить сходимость [17-19].

Значения нерелятивистских энергий для ро-вибрационных состояний представлены в таблицах I и II. Точность расчетов составляет 10^{-15} – 10^{-21} а.е.м. которая достигается при использовании базового набора функций $N = 10000$ - 24000 .

Таблица 1 – H_2^+ . Нерелятивистские энергии ро-вибрационных состояний с общим орбитальным моментом $L = 0-4$ и вибрационным квантовым числом $\nu = 0 - 10$. N – число базисных функций

ν	N	E(L=0)	N	E(L=1)
0	10000	-0.597139063081376670963	12000	-0.59687373878687954923
1	10000	-0.587155679101444713781	10000	-0.586904320924614380
2	10000	-0.5777519044232167853	10000	-0.5775140340657336467
3	10000	-0.5689084987415003994	10000	-0.568683708270965639
4	16000	-0.560609220862442689	16000	-0.5603971714131924453
5	16000	-0.55284074991111841	16000	-0.5526411715648436
6	20000	-0.545592651009840162	20000	-0.54540534397317974
7	24000	-0.538857386984525910	24000	-0.53868222425807562
8	24000	-0.532630379374145566	24000	-0.53246731121551050
9	24000	-0.526910124034590286	24000	-0.5267591846776329
10	24000	-0.52169836903255114	24000	-0.52155968637179901
ν	N	E(L=2)	N	E(L=3)
0	10000	-0.596345205491918999	10000	-0.59555763898337169218
1	10000	-0.586403631534449060	10000	-0.585657611883906690
2	10000	-0.577040237171615740	10000	-0.576334350228669387
3	10000	-0.568235992982634681	10000	-0.567569034844973164
4	16000	-0.559974864833213010	16000	-0.559345838241807626
5	16000	-0.552243738633085362	16000	-0.551651852949522041
6	20000	-0.54503238992232136	20000	-0.54447706506636723
7	24000	-0.5383350007876060	24000	-0.5378143750491274
8	24000	-0.53214272275155271	24000	-0.53165966969948405
9	24000	-0.526458806300162	24000	-0.5260119516427957
10	24000	-0.5212837806920813	24000	-0.5208735355638968
ν	N	E(L=4)		
0	10000	-0.5945171692427256300		
1	10000	-0.584672134235802976		
2	10000	-0.57540200330847469		
3	10000	-0.56668823664171939		
4	16000	-0.558515281639920927		
5	16000	-0.55087050609878926		
6	20000	-0.5437441771166975		
7	24000	-0.5371294881293674		
8	24000	-0.53102263850938890		
9	24000	-0.5254229727658310		

Таблица 2 – HD^+ . Нерелятивистские энергии ро-вибрационных состояний с общим орбитальным моментом $L = 0 - 4$ и вибрационным квантовым числом $\nu = 0 - 10$. N – число базисных функций

ν	N	E(L=0)	N	E(L=1)
0	10000	-0.59789796861075746	12000	-0.59769812819407502
1	10000	-0.58918182956159831911	10000	-0.588991111996806790
2	10000	-0.5809037002256222635	10000	-0.58072182812830538

3	10000	-0.573050546561443788	10000	-0.57287727710390243
4	12000	-0.5656110420884317035	16000	-0.565446166289299394
5	18000	-0.558575520838957147	16000	-0.5584188632723593
6	20000	-0.55193594897172246	20000	-0.5517873679235169
7	20000	-0.545685915309083405	24000	-0.5455453034256591
8	24000	-0.539820641562965801	24000	-0.5396879270613431
9	24000	-0.534337013579132556	24000	-0.534212162118581
10	24000	-0.52923363558443106	24000	-0.529116652944043
ν	N	E(L=2)	N	E(L=3)
0	10000	-0.59729964335392085	10000	-0.59670488276444281
1	10000	-0.5886108293948123556	10000	-0.588043264168244666
2	10000	-0.58035919520749483	10000	-0.579818002035836003
3	10000	-0.57253181033588176	10000	-0.57201626924275329
4	16000	-0.565117449775665937	16000	-0.564626942074290959
5	16000	-0.558106548187500297	16000	-0.557640555706619105
6	20000	-0.55149117285516618	20000	-0.55104927852073217
7	24000	-0.54526501570594894	24000	-0.54484690562225467
8	24000	-0.539423405228383457	24000	-0.53902887247515705
9	24000	-0.53396333971274348	24000	-0.53359229017406478
10	24000	-0.52888354393351798	24000	-0.5285360046150233
ν	N	E(L=4)		
0	10000	-0.595917342215897764		
1	10000	-0.587291784380128168		
2	10000	-0.579101495573924028		
3	10000	-0.57133378605666977		
4	16000	-0.563977666880251251		
5	16000	-0.557023807071968768		
6	20000	-0.5504645097737052		
7	24000	-0.54429370778720762		
8	24000	-0.53850697953450243		
9	24000	-0.5331015870965524		
10	24000	-0.52807653878734155		

Заключение

Был проведен анализ основных подходов к построению вариационного разложения решений для молекулярных ионов водорода H_2^+ и HD^+ , как для основного состояния, так и для состояний с ненулевым орбитальным угловым моментом. Представлены расчеты нерелятивистских уровней энергий для состояний с угловыми моментами $L = 0 - 4$ и колебательными квантовыми числами $\nu = 0 - 10$. Также нами были проведены исследования сходимости, в зависимости от числа пробных функций, что позволило утверждать, что точность расчетов

достигает $10^{-15} - 10^{-21}$ а.е.м. Результаты показывают, что точность данных расчетов превышает точности предыдущих работ [20], это позволяет сказать, что последующие расчеты, в которых, будут учтены выше описанные нерелятивистские энергии, дадут более точные теоретические данные.

Благодарности

Данная статья написана при поддержке грантового финансирования Министерства образования и науки Республики Казахстан ИРН № AP05132978.

Литература

- 1 Grémaud B., Delande D., and Billy N. Highly accurate calculation of the energy levels of the H_2^+ molecular ion // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. -1998. – Vol.31, No3. – P.383.
- 2 Schiller S. and Lämmerzahl C. Molecular dynamics simulation of sympathetic crystallization of molecular ions // Phys. Rev. A – 2003. – Vol.68, Iss.5. – P.053406.
- 3 Farnham D.L., Van Dyck R.S., and Schwinberg P.B. Determination of the electron's atomic mass and the proton/electron mass ratio via Penning trap mass spectroscopy // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol.75. – P.3598-3601.
- 4 Rosenthal C.M. The reduction of the multi-dimensional schrödinger equation to a one-dimensional integral equation // Chem. Phys. Lett. -1971. –Vol.10. – P.381-386.

- 5 Griffin J.J. and Wheeler J.A. Collective Motions in Nuclei by the Method of Generator Coordinates // *Phys. Rev.* -1957. – Vol.108. – P.311.
- 6 Thakkar A.J. and Smith V.H. Compact and accurate integral-transform wave functions. I. The 11S state of the helium-like ions from H⁻ through Mg10⁺ // *Phys. Rev. A* – 1977. – Vol.15. – P.1.
- 7 Rebane T.K., Yusupov O.N. Complex exponential basis wave functions in the Coulomb three-body problem // *JETP.* – 1990. – Vol. 71, No. 6. – P.1050.
- 8 Korobov V.I., Bakalov D. and Monkhorst H.J. Variational expansion for the antiprotonic helium atoms // *Phys. Rev. A.* – 1999. – Vol.59. – P.R919.
- 9 Frolov A.M. and Smith V.H. Jr. Universal variational expansion for three-body systems // *J. Phys. B.* – 1995. – Vol.28. – P.L449.
- 10 Korobov V.I. Coulomb three-body bound-state problem: Variational calculations of nonrelativistic energies // *Phys. Rev. A.* -2000. – Vol.61. – P.064503.
- 11 Korobov V. Nonrelativistic ionization energy for the helium ground state // *Phys. Rev. A.* -2 002. – Vol.66. – P.024501.
- 12 Bailey D.H. Algorithm 719: Multiprecision translation and execution of FORTRAN programs // *ACM Trans. Math. Software.* – 1993. – Vol.19. – P.288.
- 13 Schiller S. and Korobov V. Tests of time independence of the electron and nuclear masses with ultracold molecules // *Phys. Rev. A* – 2005. – Vol.71. – P.032505.
- 14 Korobov V.I. Bethe logarithm for the hydrogen molecular ion HD⁺ // *Phys. Rev. A* – 2004. – Vol.70. – P.012505.
- 15 Korobov V.I. Bethe logarithm for the hydrogen molecular ion H₂⁺ // *Phys. Rev. A* – 2006. – Vol.73. – P.024502.
- 16 Cassar M.M. and Drake G.W.F. High precision variational calculations for H₂⁺ // *J. Phys. B.* – 2004. – Vol.37. – P.2485.
- 17 Korobov V.I. Coulomb three-body bound-state problem: Variational calculations of nonrelativistic energies // *Phys. Rev. A.* – 2000. – Vol.61. – P. 064503.
- 18 Frolov A.M. and Smith V. H. Jr. Universal variational expansion for three-body systems // *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* – 1995. – Vol.28. – P. L449.
- 19 Korobov V.I., Bakalov D., and Monkhorst H.J. Variational expansion for antiprotonic helium atoms // *Phys. Rev. A.* – 1999. – Vol.59.-P.R919.
- 20 Korobov V.I. Leading-order relativistic and radiative corrections to the rovibrational spectrum of H₂⁺ and HD⁺ molecular ions // *Phys. Rev. A.* – 2006. – Vol.74. – P.052506.

References

- 1 B. Grémaud, D. Delande, and N. Billy, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 31, 383 (1998).
- 2 S. Schiller and C. Lämmerzahl, *Phys. Rev. A* 68, 053406 (2003).
- 3 D.L. Farnham, R.S. Van Dyck, and P. B. Schwinberg, *Phys. Rev. Lett.* 75, 3598-3601 (1995).
- 4 C.M. Rosenthal, *Chem. Phys. Lett.* 10, 381-386 (1971).
- 5 J.J. Griffin and J.A. Wheeler, *Phys. Rev.* 108, 311 (1957).
- 6 A.J. Thakkar and V.H. Smith, *Phys. Rev. A* 15, 1 (1977).
- 7 T.K. Rebane and O.N. Yusupov, *JETP*, 71, 1050 (1990).
- 8 V.I. Korobov, D. Bakalov and H.J. Monkhorst, *Phys. Rev. A* 59, R919 (1999).
- 9 A.M. Frolov and V.H. Smith, Jr., *J. Phys. B* 28, L449 (1995).
- 10 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 61 064503 (2000).
- 11 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 66, 024501 (2002).
- 12 D.H. Bailey, *ACM Trans. Math. Software* 19, 288 (1993).
- 13 S. Schiller and V. Korobov, *Phys. Rev. A* 71, 032505 (2005).
- 14 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 70, 012505 (2000).
- 15 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 73, 024502 (2006).
- 16 M.M. Cassar and G.W.F. Drake, *J. Phys. B* 37, 2485 (2004).
- 17 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 61, 064503 (2000).
- 18 A.M. Frolov and V. H. Smith, Jr., *J. Phys. B: At. Mol. Opt.*, 28, L449 (1995).
- 19 V.I. Korobov, D. Bakalov, and H.J. Monkhorst, *Phys. Rev. A* 59, R919 (1999).
- 20 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 74, 052506 (2006).