

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



17/7-77

P4 - 10929

B-486

4178/2-77

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов, М.П.Файфман

РЕЗОНАНСНОЕ ОБРАЗОВАНИЕ
 μ -МЕЗОМОЛЕКУЛ ВОДОРОДА

1977

P4 - 10929

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов, М.П.Файфман

РЕЗОНАНСНОЕ ОБРАЗОВАНИЕ
 μ -МЕЗОМОЛЕКУЛ ВОДОРОДА

Направлено в ЖЭТФ

Резонансное образование μ -мезомолекул водорода

В состоянии с орбитальным моментом $J=1$ и колебательным квантовым числом $v=1$ в мезомолекулах $dd\mu$ и $dt\mu$ найдены высоко-возбужденные уровни с энергией связи $\epsilon_{Jv}(dd\mu) = -2,2$ эВ и $\epsilon_{Jv}(dt\mu) = -1,1$ эВ, наличие которых приводит к резонансному образованию мезомолекул. Вычислены скорости резонансного образования мезомолекул: $\lambda_{dd\mu} = 0,8 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ и $\lambda_{dt\mu} = 0,9 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$. Полученное значение $\lambda_{dd\mu}$ хорошо совпадает с экспериментально измеренным.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Resonance Formation of Hydrogen μ -Mesomolecules

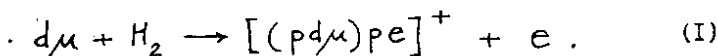
Highly excited levels with the binding energy $\epsilon_{Jv}(dd\mu) = -2.2$ eV and $\epsilon_{Jv}(dt\mu) = -1.1$ eV have been found in mesomolecules $dd\mu$ and $dt\mu$ in a state with the orbital momentum $J=1$ and rotational quantum number $v=1$, their presence being the reason for the resonance formation of mesomolecules. The rates of resonance formation of mesomolecules have been calculated: $\lambda_{dd\mu} = 0.8 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$ and $\lambda_{dt\mu} = 0.9 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. The obtained value $\lambda_{dd\mu}$ agrees well with that measured experimentally.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1977

I. Введение

Обычным механизмом образования μ -молекул является электрический дипольный E1 -переход с конверсией атомного электрона из состояния $J=0$ непрерывного спектра системы μ -мезоатом + ядро в связанное состояние μ -молекулы с орбитальным моментом $J=1$ /1,2/, например:

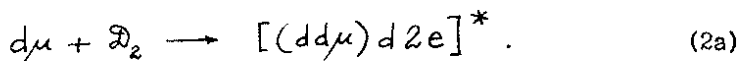


При этом образуется своеобразный молекулярный ион, одним из ядер которого становится образовавшаяся мезомолекула $pd\mu$. Энергию, выделившуюся при образовании $pd\mu$ -молекулы, уносит Оже-электрон. Вычисленные недавно^{/3/} скорости образования мезомолекул $\lambda_{pp\mu} = 2,2 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$ и $\lambda_{pd\mu} = 5,9 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$, соответствующие этому механизму, хорошо согласуются с экспериментально измеренными^{/4-7/}.

В то же время вычисленное значение^{/3,8-10/} $\lambda_{dd\mu} = 0,4 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$ близко к экспериментальному^{/11,12/} $\lambda_{dd\mu} = 0,8 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$ при температуре жидкого водорода и более чем на порядок величины отличается от значения $\lambda_{dd\mu} = 0,8 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$, измеренного при комнатной температуре^{/13-15/}. Столь резкие отличия объясняются тем, что $dd\mu$ -молекула образуется с помощью специального резонансного механизма, который был рассмотрен Весманом^{/16/}.

Суть резонансного механизма состоит в том, что энергия, освобождающаяся при образовании $dd\mu$ -молекулы, передается на возбуждение колебаний молекулы D_2 , с которой сталкива-

ется мезоатом $d\mu$ по реакции:



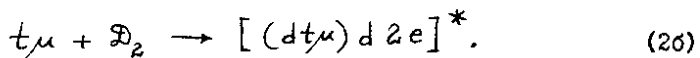
Такой механизм возможен только в том случае, если среди уровней $dd\mu$ -молекулы существует хотя бы один с энергией, меньшей, чем энергия ионизации электрона (~ 15 эВ) и энергия диссоциации молекулы ($\sim 4,5$ эВ). Долгое время теоретические расчеты не подтверждали существования такого уровня, хотя подозрения о его существовании высказывались давно^{/1,9,15/}. В последнее время, однако, разработана эффективная схема вычислений энергии связи системы трех тел с кулоновским взаимодействием в адиабатическом представлении задачи трех тел^{/17/}, которая позволила вычислить этот уровень с высокой точностью. Найденное значение энергии связи $\mathcal{E}_{J\nu}$ молекулы $dd\mu$ в состоянии с орбитальным моментом $J=1$ и колебательным квантовым числом $\nu=1$ равно

$$\mathcal{E}_{J\nu} = -1,96 \text{ эВ.} \quad (3)$$

О наличии аналогичного уровня ($J=1, \nu=1$) у молекулы $dt\mu$ до сих пор не было никаких указаний. Разработанная нами схема вычислений позволяет с определенностью установить существование этого уровня и найти его энергию связи:

$$\mathcal{E}_{J\nu} = -0,85 \text{ эВ.} \quad (4)$$

Отсюда следует, что для молекулы $dt\mu$ также возможен резонансный механизм образования, аналогичный (2a):



2. Резонансный механизм образования μ -мезомолекул

На рис. 1 изображена схема уровней $dd\mu$ -молекулы. Всего существует 5 уровней: по два уровня с колебательными квантовыми числами $\nu=0$ и $\nu=1$ в состояниях с орбитальным моментом $J=0$ и $J=1$ и один уровень ($J=2, \nu=0$). Энергии связи всех состояний молекул $dd\mu$ и $dt\mu$, вычисленные согласно алгоритму^{/17/}, представлены в табл. 1.

Особый интерес представляют слабосвязанные состояния ($J=1, \nu=1$) с аномально малой энергией связи ($\sim 10^{-4}$ мезоатомных единиц энергии). На рис. 2 этот уровень $dd\mu$ -молекулы изображен в увеличенном масштабе, ϵ_0 - энергия соударений в реакции $d\mu + d \rightarrow dd\mu$.

Реакция (2) происходит из начальных состояний непрерывного спектра системы $d\mu + d$ (или $dt\mu + d$) с $J=0$ и основного состояния ($K=0, \nu=0$) молекулы D_2 в связанное состояние ($J=1, \nu=1$) мезомолекулы $dd\mu$ (или $dt\mu$) и возбужденное колебательное состояние ν с орбитальным моментом $K=1$ молекул $[(dd\mu)d 2e]$ или $[(dt\mu)d 2e]$ (см. рис. 2).

Скорость резонансного образования $dd\mu$ -молекул, приведенная к плотности N_0 жидкого водорода, равна:

$$\lambda = \sigma v N_0 \text{ с}^{-1}, \quad (5)$$

где v - относительная скорость сталкивающихся частиц, а σ - сечение резонансного образования $dd\mu$ -молекул в реакциях (2a) и (2б), которое определяется соотношением^{/16/}:

$$v \sigma = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \gamma(\epsilon, \epsilon_{\pi}) d\epsilon. \quad (6)$$

Здесь: E_f и E_i - энергии конечного и начального состояний системы, $\chi(\varepsilon, \varepsilon_T)$ - максвелловское распределение налетающих мезоатомов по энергиям ε при заданной температуре T , которой соответствует средняя энергия теплового движения $\varepsilon_T = \frac{3}{2} kT$, где

$k = 8,167 \cdot 10^{-5}$ эВ/град - постоянная Больцмана:

$$\chi(\varepsilon, \varepsilon_T) = \left(\frac{27}{2\pi} \cdot \frac{\varepsilon}{\varepsilon_T} \right)^{1/2} \varepsilon_T^{-1} e^{-\frac{3\varepsilon}{2\varepsilon_T}}. \quad (7)$$

Значения полных энергий системы в начальном и конечном состояниях равны

$$\begin{aligned} E_i &= \varepsilon + \bar{E}_0, \\ E_f &= \varepsilon_{11} + E_\nu, \end{aligned} \quad (8)$$

где ε_{11} - энергия связи молекулы $d\mu$ (или $dt\mu$), E_ν - энергия колебательного уровня ν молекулы $[(\alpha d\mu) dze]$ (или $[(dt\mu) dze]$), а \bar{E}_0 - энергия основного состояния молекулы \mathcal{D}_2 . Из равенства (6) следует, что реакции (2а) и (2б) возможны лишь при условии

$E_i = E_f$ т.е. при энергии налетающего мезоатома $\varepsilon = \varepsilon_0$ (см. рис. 2)

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{11} + E_\nu - \bar{E}_0. \quad (8)$$

Матричный элемент перехода равен:

$$|T_{fi}|^2 = \sum_{m_k} \sum_{m_f} \left| \int \alpha \vec{R} d\vec{r} \alpha \vec{p} \Psi^{(f)*}(\vec{r}, \vec{R}) \Psi^{(i)}(\vec{p}) \hat{H}_{int} \Psi^{(i)}(\vec{p}) \Psi^{(f)}(\vec{r}, \vec{R}) \right|^2, \quad (9)$$

где $\Psi^{(i,f)}(\vec{r}, \vec{R})$ и $\Psi^{(i,f)}(\vec{p})$ - волновые функции начального (i) и конечного (f) состояний мезомолекулы и обычной молекулы соответственно. Суммирование производится по

всем проекциям орбитальных моментов J и K в конечном состоянии мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ и молекул $[(dd\mu)d2e]$ и $[(dt\mu)d2e]$. Определение векторов \vec{z} , \vec{R} и $\vec{\beta}$ см. на рис. 3.

Оператор взаимодействия равен

$$\hat{H}_{int} = \frac{\vec{d}\vec{\beta}}{\rho^3}, \quad (I0)$$

где дипольный момент $\vec{d} = \vec{d}(\vec{z}, \vec{R})$ системы мезоатом + ядро молекулы \mathcal{D}_2 относительно центра инерции молекулы $dd\mu$ или $dt\mu$ равен

$$\vec{d} = -\frac{\alpha}{2} \left(1 - \frac{m_\mu}{M_{tot}}\right) \vec{R} - \left(1 + \frac{m_\mu}{M_{tot}}\right) \vec{z}. \quad (II)$$

Здесь: m_μ - масса μ -мезона, M_{tot} - полная масса μ -мезомолекулы $dd\mu$ или $dt\mu$, $\alpha=0$ и $\alpha = (M_d - M_t)/(M_d + M_t)$ для мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ соответственно.

Мезоатомы $d\mu$ и $t\mu$, движущиеся при нормальной температуре со скоростями $\sim 10^5$ см·с⁻¹, пролетают область взаимодействия с ядром молекулы $\mathcal{D}_2 \sim 10 a_\mu \approx 2 \cdot 10^{-10}$ см за время $\sim 10^{-15}$ с. Это время много меньше времени адиабатической перестройки волновой функции молекулы \mathcal{D}_2 , для которой частота нулевых колебаний равна $\sim 10^{14}$ с⁻¹. Поэтому в качестве начальной волновой функции $\psi^{(i)}(\vec{\rho})$ следует брать функцию $\bar{y}_0(\rho)$ основного состояния молекулы \mathcal{D}_2 , а для конечного состояния - волновые функции $y_\nu(\rho)$ систем $[(dd\mu)d2e]$ и $[(dt\mu)d2e]$.

(I2a)

В конечном состоянии для молекул $[(dd\mu) dze]$ и $[(dt\mu)dze]$ в колебательном состоянии ν с орбитальным моментом K соответственно имеем:

$$\psi^{(\pm)}(\vec{r}) = \frac{1}{\rho} y_\nu(\rho) Y_{K m_K}(\theta, \varphi). \quad (126)$$

Для реакции (2а) волновые функции "мезонной" части системы в начальном и конечном состояниях соответственно равны:

$$\Psi^{(i)}(\vec{z}, \vec{R}) = \frac{1}{kR} \sum_{J=0}^J i^J (2J+1) \varphi_{1u}(\vec{z}; R) \chi_{1u}^{(i)}(R) P_J(\cos \theta),$$

$$\Psi^{(f)}(\vec{z}, \vec{R}) = \frac{1}{R} \sum_j \varphi_{jj}(\vec{z}; R) \chi_{jj}^{(f)}(R) D_{mm_j}^J(\theta, \phi). \quad (13)$$

Здесь $\varphi_{jj}(\vec{z}; R)$ и $\varphi_{ju}(\vec{z}; R)$ - четное и нечетное решения задачи двух центров, соответствующие состоянию с набором квантовых чисел $j = [n_1 n_2 m]$ по классификации разъемных атомов^{/20/}. Функции $\chi_{jj}^{(f)}(R)$ являются компонентами вектор-функции $\left\{ \chi_{jj}^{(f)} \right\}$, соответствующей уровню $(J=1, \nu=1)$ молекулы $dd\mu$ при разложении ее по базису $\varphi_{jj}(\vec{z}; R)$. Решение $\chi_{1u}^{(i)}(R)$ представляет собой первую компоненту волновой функции непрерывного спектра системы $d\mu + d$ в состоянии с орбитальным моментом J , которая соответствует индексу $j=1 = [000]$ основного терма задачи двух центров.

Для реакции (2б) соотношения (13) справедливы после замен:

$$\varphi_{1u}(\vec{z}; R) \chi_{1u}^{(i)}(R) \rightarrow \varphi_{1g}(\vec{z}; R) \chi_{1g}^{(i)}(R) + \varphi_{1u}(\vec{z}; R) \chi_{1u}^{(i)}(R),$$

$$\sum_j \varphi_{jj}(\vec{z}; R) \chi_{jj}^{(f)}(R) \rightarrow \sum_j \left[\varphi_{jj}(\vec{z}; R) \chi_{jj}^{(f)}(R) + \varphi_{ju}(\vec{z}; R) \chi_{ju}^{(f)}(R) \right]. \quad (14)$$

где волновые функции $\chi_{jg}(R)$ и $\chi_{ju}(R)$ представляют относительное движение ядер в мезомолекуле $d\mu$.

Вычисление Γ_{fi} во многом аналогично приведенному в работе^{/3/}. Окончательно, после выделения размерных множителей^{x)} для скорости резонансного образования мезомолекул $dd\mu$ и $d\mu$ получим выражение

$$\lambda = \beta \frac{8\pi^2}{3} (N_0 a_0^3) \left(\frac{m_e}{m_\mu}\right)^5 \left(\frac{m_\mu}{m_a}\right)^3 I_\nu |d_{fi}|^2 \gamma(\varepsilon_0, \varepsilon_T) \frac{m_e e^4}{\hbar^3} c^{-1} \quad (I5)$$

Здесь: $\gamma(\varepsilon_0, \varepsilon_T)$ - распределение Максвелла (7),
 $m_a^{-1} = m_\mu^{-1} + M_a^{-1}$, где M_a - масса дейтона (или тритона),
 $N_0 = 4,25 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ - плотность жидкого водорода,
 β - статистический множитель, равный 1/3 для $dd\mu$ и 1 для $d\mu$ /1-3/, величины I_ν и d_{fi} вычислены в атомных и мезоатомных единицах соответственно. Матричные элементы I_ν дипольного взаимодействия определяются выражением:

$$I_\nu = \int_0^\infty \bar{y}_\nu(\rho) y_\nu(\rho) \frac{d\rho}{\rho^2}$$

x) Размерности величин в выражении (9) равны:

$$\Psi^{(i)}(\vec{z}, \vec{R}) \sim a_{m_a}^{-3/2}, \quad \Psi^{(+)}(\vec{z}, \vec{R}) \sim a_{m_a}^{-3},$$

$$\psi^{(i)}(\vec{\rho}) \sim a_0^{-3/2}, \quad \psi^{(+)}(\vec{\rho}) \sim a_0^{-3/2},$$

$$\hat{H}_{int} \sim e^2 a_{m_a} a_0^{-2}, \quad \gamma(\varepsilon_0, \varepsilon_T) \sim a_0 e^{-2},$$

$$a_0 = \hbar^2 / m_e e^2, \quad a_{m_a} = \hbar^2 / m_a e^2.$$

Матричный элемент d_{fi} определяется формулой

$$|d_{fi}|^2 = \frac{1}{4\pi} \sum_{m_J} \left| \int d\vec{R} d\vec{z} \Psi^{(+)*}(\vec{z}, \vec{R}) \vec{d}(\vec{z}, \vec{R}) \Psi^{(i)}(\vec{z}, \vec{R}) \right|^2. \quad (16)$$

Значение d_{fi} в случае мезомолекулы $d\mu$ равно (в единицах $\alpha_{ma} = \hbar^2/m_a e^2$):

$$d_{fi} = \frac{\alpha}{2} \left(1 - \frac{m_u}{M_{tot}}\right) \frac{1}{k} \int dR \cdot R \left(\chi_{1g}^{(i)} \chi_{1g}^{(+)} + \chi_{1u}^{(i)} \chi_{1u}^{(+)} \right) + \\ + \left(1 + \frac{m_u}{M_{tot}}\right) \frac{1}{k} \int dR \left(\chi_{1g}^{(i)} \chi_u^{(+)} + \chi_{1u}^{(i)} \chi_g^{(+)} \right), \quad (17)$$

где введены обозначения:

$$\chi_g^{(+)} = \sum_j \left\{ \chi_{j\sigma_g}^{(+)} \langle j\sigma_g | z_z | 1u \rangle + \chi_{j\pi_g}^{(+)} \langle j\pi_g | z_x + i z_y | 1u \rangle \right\}, \\ \chi_u^{(+)} = \sum_j \left\{ \chi_{j\sigma_u}^{(+)} \langle j\sigma_u | z_z | 1g \rangle + \chi_{j\pi_u}^{(+)} \langle j\pi_u | z_x + i z_y | 1g \rangle \right\}, \quad (18)$$

$$\langle i | z_k | j \rangle = \int d\vec{z} \varphi_i^*(\vec{z}, R) z_k \varphi_j(\vec{z}, R), \quad (19) \\ j\sigma_{g,u} = [n_1 n_2 0]_{j,u}; \quad j\pi_{g,u} = [n_1 n_2 1]_{j,u}.$$

Для мезомолекулы $d\mu$ величина d_{fi} равна:

$$d_{fi} = \left(1 + \frac{m_u}{M_{tot}}\right) \frac{1}{k} \int dR \chi_{1u}^{(i)} \chi_g^{(+)} \quad (20)$$

3. Вычисление волновых функций

Волновые функции $\bar{y}_0(\rho)$ и $y_\nu(\rho)$ молекулы D_2 и систем $[(dd\mu)d2e]$ и $[(dt\mu)d2e]$ вычислялись нами как решения уравнения Шредингера

$$y_\nu''(\rho) + 2M \left[E_\nu - \frac{K(K+1)}{2M\rho^2} - U(\rho) \right] y_\nu = 0$$

с приведенной массой $M = M_d/2m_e$ для $\bar{y}_0(\rho)$ и $M = M_{(d,t)}/m_e$ для $y_\nu(\rho)$, где

$$M_{(d)}^{-1} = M_d^{-1} + (2M_d + m_\mu)^{-1},$$

$$M_{(t)}^{-1} = M_d^{-1} + (M_d + M_t + m_\mu)^{-1}.$$

Эффективный потенциал $U(\rho)$ взят из работы^{/21/}, при вычислениях использована программа SLIP^{/22/}. Результаты вычислений энергии \bar{E}_0 , E_ν и интегралов I_ν приведены в таблице II^{x)}.

Волновые функции $\Psi_{jg}(\vec{z}; R)$ и $\Psi_{ju}(\vec{z}; R)$ задачи двух центров вычислялись в соответствии с алгоритмами^{/23/},^{/24/}. Они нумеруются набором параболических квантовых чисел $j = [n_1 n_2 m]_{g,u}$ и значением четности $P_{g,u} = (-)^{\ell}$, где орбитальный момент равен $\ell = 2n_2 + m$ или $\ell = 2n_2 + m + 1$ в зависимости от симметрии функций при инверсии $\ell \rightarrow -\ell$ ^{/20/}.

x) Аналогичные вычисления уровней энергии молекулы H_2 , выполненные нами этим же методом, дают значения E_ν , которые отличаются от экспериментально измеренных не более чем на 10^{-3} эВ вплоть до состояний $\nu = 10$. Такая точность вполне достаточна для наших целей.

Матричные элементы (19) вычислены в соответствии с алгоритмами /25-28/ с точностью $\sim 10^{-7}$ или выше.

Волновые функции $\chi_{jg}^{(+)}(R)$ и $\chi_{ju}^{(+)}(R)$ находятся как решения системы уравнений

$$\sum_{j=1}^N \left\{ \left(\frac{d^2}{dR^2} - 2M \varepsilon_{Jv} \right) \delta_{ij} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} V_{ig,jg} & V_{ig,ju} \\ V_{iu,jg} & V_{iu,ju} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \chi_{jg} \\ \chi_{ju} \end{pmatrix} = 0 \quad (21)$$

с граничными условиями

$$\chi_{jg}(0) = \chi_{ju}(0) = \chi_{jg}(R_m) = \chi_{ju}(R_m) = 0 \quad (22)$$

при $R_m \gg 1$; $M = M_0/m_a$, $M_0^{-1} = M_a^{-1} + M_g^{-1}$.

Вид эффективных потенциалов $V_{ij} \equiv V_{ij}(R)$ приведен в работах /17,29/. При решении системы (21) использован алгоритм /30/, основанный на непрерывном аналоге метода Ньютона.

Результаты вычисления энергий связи ε_{J1} уровней ($J=1$, $v=1$) мезомолекул $d\mu$ и $d_t\mu$ представлены в таблице III. При вычислениях использован алгоритм, развитый в работе /17/, который позволяет вычислить энергию связи молекул с точностью $\sim 10^{-5}$ (т.е. $\sim 0,1$ эВ).

Волновые функции $\chi_{jg}^{(i)}(R)$ и $\chi_{ju}^{(i)}(R)$, представляющие системы $d\mu + d$ и $t\mu + d$ в начальном состоянии рассеяния, находятся из системы уравнений (21) при $N=1$ с граничными условиями при $R \rightarrow \infty$;

для реакции $d\mu + d$

$$\chi_{ju}^{(i)}(R) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} \sin \left(kR - \frac{\pi J}{2} + \delta_J \right), \quad (23)$$

$$k = (2M\varepsilon)^{1/2};$$

для реакции $t\mu + d$

$$\chi_{1a}^{(i)}(R) = \frac{\chi_{1g}^{(i)}(R) - \chi_{1u}^{(i)}(R)}{\sqrt{2}} \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} \sin\left(kR - \frac{\pi J}{2} + \delta_J\right),$$

$$\chi_{1b}^{(i)}(R) = \frac{\chi_{1g}^{(i)}(R) + \chi_{1u}^{(i)}(R)}{\sqrt{2}} \underset{R \rightarrow \infty}{\rightarrow} 0. \quad (23')$$

При вычислениях использован метод фазовых функций и алгоритм, развитый на его основе в работе /31/.

4. Вычисление скоростей образования мезомолекул

Величина скорости образования μ -мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ складывается из резонансной и нерезонансной частей:

$$\lambda = \lambda^{nres} + \lambda^{res}.$$

Метод вычисления нерезонансной части изложен в работе /31/. В таблице IV представлены результаты вычислений скоростей образования мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в квантовых состояниях с различными J и ν . Отметим наличие линейных по энергии зависимостей при образовании мезомолекул из состояния $J=1$ непрерывного спектра системы мезоатом + ядро. В результате λ^{nres} можно представить в виде

$$\lambda^{nres} = \lambda_1 + \lambda_2 \varepsilon (\approx \nu), \quad (24)$$

где значения λ_1 и λ_2 приведены в таблице IV.

В таблице V представлены величины, определяющие скорости λ^{res} резонансного образования мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$,

вычисленные по формуле (15). При $\varepsilon_0 = \varepsilon_T$ величина λ^{res} достигает максимального значения

$$\lambda^{res}(\varepsilon_0 = \varepsilon_T) = \beta \left(\frac{m_\mu}{m_a} \right)^3 I_\nu^2 |d_{fi}|^2 \frac{8,61}{\varepsilon_T (\text{эВ})} \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}. \quad (25)$$

Отметим некоторые особенности наших расчетов. Как мы уже отмечали, точность вычислений энергий связи ε_{11} мезомолекул $\sim 0,1$ эВ. В то же время резонансная энергия столкновения ε_0 равна сотым долям электронвольта и, следовательно, не может быть вычислена из соотношения (8) с необходимой точностью. Поэтому при вычислении $\lambda_{dd\mu}^{res}(\varepsilon_0 = \varepsilon_T)$ резонансное значение энергии $\varepsilon_0 = 0,053$ эВ было взято нами из эксперимента^{/15/}. Величина

$$\lambda^{max} = (\lambda^{res} + \lambda^{res})_{\varepsilon_0 = \varepsilon_T} = 0,80 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}, \quad (26)$$

вычисленная нами по формулам (24)–(25), при этом значении ε_0 очень хорошо совпадает с экспериментальным значением

$$\lambda_{dd\mu}^{max} = (0,807 \pm 0,056) \cdot 10^6 \text{ с}^{-1} \quad (27)$$

лишь в том случае, если при резонансном переходе возбуждается колебательный уровень $\nu = 8$ в молекуле $[(dd\mu)d2e]$ во вращательном состоянии $K=1$ ^{x)}. Используя экспериментальное значение резонансной энергии ε_0 , из соотношения (8)

x) Для справедливости этого рассуждения существенно, чтобы дипольный момент d_{fi} не зависел ни от ε_0 , ни от ε_{11} , что в действительности и имеет место, как показывает дополнительное исследование.

при $\nu = 8$ легко вычислить правильную энергию $\tilde{\epsilon}_{11}$ уровня ($J=1, \nu=1$) молекулы $dd\mu$, которая оказывается равной

$$\tilde{\epsilon}_{11} = -2,196 \text{ эВ.} \quad (28)$$

Разность $\delta\epsilon = \tilde{\epsilon}_{11} - \epsilon_{11} = 0,24$ эВ между правильным и вычисленным значениями включает в себя как вычислительные погрешности, так и вклад многочисленных поправок, которые пока не найдены: релятивистские поправки, поправки на поляризацию вакуума в мезомолекулах, поправки на конечные размеры и поляризацию ядер, на электронное экранирование и т.д. Хотя относительный вклад их в величину $\delta\epsilon$ пока неизвестен, очевидно, что для обеих мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ они с большой точностью одинаковы.

Тесная аналогия систем $dd\mu$ и $dt\mu$ проявляется на всех этапах расчетов, например при вычислении энергии связи ϵ_{11} . Как видно из таблицы III, в двухуровневом приближении ($N=1$) системы уравнений (2I) значение $\epsilon_{11}^{(0)}(dd\mu) = -0,67$ эВ, а в системе $dt\mu$ вместо связанного состояния имеется квазистационарный уровень с энергией $\epsilon_{11}^{(0)}(dt\mu) = 0,47$ эВ и шириной $\Gamma \approx 0,15$ эВ. При учете дискретного спектра задачи двух центров, т.е. при расширении системы (2I) до $N=II$, а также учете непрерывного спектра задачи двух центров, уровни $\epsilon_{11}^{(0)}$ опускаются соответственно до значений (3) и (4) (см. также таблицу III). Легко проверить, что разности $\epsilon_{11} - \epsilon_{11}^{(0)}$ с большой точностью равны между собой:

$$\begin{aligned} \epsilon_{11}(dd\mu) - \epsilon_{11}^{(0)}(dd\mu) &= -1,29 \text{ эВ,} \\ \epsilon_{11}(dt\mu) - \epsilon_{11}^{(0)}(dt\mu) &= -1,32 \text{ эВ.} \end{aligned} \quad (29)$$

Используя отмеченную аналогию систем $dd\mu$ и $dt\mu$ (см., например, рис. 4, где изображены волновые функции этих систем) и найденное значение δE для молекулы $dd\mu$, мы можем вычислить правильное значение энергии связи молекулы $dt\mu$:

$$\tilde{E}_{11}(dt\mu) = -1,09 \text{ эВ} . \quad (30)$$

Из таблицы II легко установить, что ближайшая разность $\bar{E}_0 - E_\nu = 1,161 \text{ эВ}$, превышающая значение $|\tilde{E}_{11}(dt\mu)|$, соответствует переходу на уровень ($K=1, \nu=4$) системы $[(dt\mu)d2e]$. Из соотношения (8) легко находим теперь значение энергии $E_0 = 0,07 \text{ эВ}$, при которой происходит резонансное образование мезомолекул $dt\mu$.

На рис. 5 вместе с экспериментальными точками работы^{/15/} представлена зависимость $\lambda_{dd\mu}(\epsilon_T)$, вычисленная по формуле

$$\lambda_{dd\mu}(\epsilon_T) = \lambda_1 + \lambda_2 \epsilon + \lambda_3 \epsilon_0^{1/2} \epsilon_T^{-3/2} e^{-3\epsilon_0/2\epsilon_T} \quad (31)$$

при значении $\epsilon_0 = 0,053 \text{ эВ}$.

В таблице У приведены величины, определяющие скорости λ^{res} резонансного образования мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$.

Совпадение вычисленной и измеренной зависимостей $\lambda_{dd\mu}(\epsilon_T)$ служит хорошей гарантией корректности наших расчетов и, в частности, правильности вычисленного значения

$$\lambda_{dt\mu}^{max} = 0,9 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}. \quad (32)$$

Было бы крайне желательно иметь прямое экспериментальное подтверждение этого результата.

5. Заключение

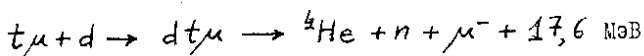
Разработанный нами метод вычислений позволяет рассчитывать свойства системы трех тел с очень малой энергией связи ($\sim 10^{-4}$ от энергии основного состояния). Сравнение с экспериментом доказывает высокую точность и эффективность разработанного алгоритма вычислений.

Данный расчет представляет самостоятельный интерес как редкий пример вычисления энергии связи в системе трех заряженных частиц, для которого возможно уверенное сравнение с экспериментом.

Проведенные расчеты открывают возможность для измерения поляризации вакуума в μ -мезомолекулах. Экспериментальная техника, использованная при измерении температурной зависимости $\lambda_{dd\mu}(\epsilon_T)$, позволяет найти абсолютную величину поляризационного сдвига уровня мезомолекулы $dd\mu$ с точностью, лучшей чем 10^{-3} эВ.

Качественно новым результатом данной работы является обнаружение слабосвязанного состояния молекулы $dt\mu$. Существование этого уровня приводит к весьма большой скорости образования мезомолекул $dt\mu$, которая на два порядка величины превышает скорость распада свободного μ^- -мезона

$\lambda_0 = 0,455 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$. Это означает, что в смеси дейтерия и третица один μ^- -мезон может осуществить катализ $\sim 10^2$ реакций синтеза ядер по схеме



и освободить при этом ~ 2 ГэВ энергии, что в 15 раз превышает

энергию покоя μ -мезона и примерно равно энергии, затраченной на его рождение.

В заключение нам приятно поблагодарить С.С.Герштейна за многочисленные обсуждения на всех этапах работы, а также К.Н.Данилову, В.С.Мележика и А.В.Сидорова за помощь в работе.

Таблица I

Энергии связи $\epsilon_{J\nu}$ состояний (J, ν) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ x)

J	ν	$-\epsilon_{J\nu}$ (эВ)	
		$dd\mu$	$dt\mu$
0	0	324,97	319,07
0	I	35,62	34,67
I	0	226,25	232,23
I	I	1,96	0,85
2	0	85,62	102,26

x) Таблица составлена по данным работы^{/18/}. При вычислениях использованы значения масс частиц^{/19/}: $m_\mu = 206,769$, $M_d = 3670,481$, $M_t = 5496,918$ и значение $R_y = 13,60535$ эВ. Мезоатомная единица энергии $\epsilon_\mu = 5626,33$ эВ. Частицы предполагаются бесспиновыми и бесструктурными. Энергия связи $\epsilon_{J\nu}$ отсчитывается от значений $E_{d\mu}$ и $E_{t\mu}$ энергий изолированных атомов $d\mu$ и $t\mu$ соответственно.

Таблица II

Уровни энергии E_ν (эВ) и интегралы I_ν
 для молекул $[(dd\mu)d2e]$ и $[(dt\mu)d2e]$
 в состоянии с орбитальным моментом $K = I^x$

ν	$[(dd\mu)d2e]$		$[(dt\mu)d2e]$	
	$-E_\nu$	I_ν	$-E_\nu$	I_ν
0	4,577	0,500	4,582	0,500
1	4,255	$0,865 \cdot 10^{-1}$	4,270	$0,845 \cdot 10^{-1}$
2	3,945	$0,483 \cdot 10^{-1}$	3,968	$0,521 \cdot 10^{-1}$
3	3,645	$0,224 \cdot 10^{-1}$	3,676	$0,244 \cdot 10^{-1}$
4	3,357	$0,119 \cdot 10^{-1}$	3,395	$0,133 \cdot 10^{-1}$
5	3,079	$0,663 \cdot 10^{-2}$	3,123	$0,757 \cdot 10^{-2}$
6	2,811	$0,390 \cdot 10^{-2}$	2,862	$0,453 \cdot 10^{-2}$
7	2,554	$0,239 \cdot 10^{-2}$	2,610	$0,282 \cdot 10^{-2}$
8	2,307	$0,152 \cdot 10^{-2}$	2,368	$0,182 \cdot 10^{-2}$

x) Вычисленная нами энергия связи $\bar{E}_0 = -4,556$ эВ основного состояния ($K=0, \nu=0$) молекулы \mathcal{D}_2 хорошо совпадает с экспериментально измеренным значением энергии диссоциации.

Таблица III

Составляющие энергии связи $\varepsilon_{J\nu}$ (эВ) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в состояниях ($J = I, \nu = I$)^{x)}

Вклад	$dd\mu$	$dt\mu$	
$\varepsilon_{II}^{(0)}$	-0,67	+0,47	Двухуровневое приближение ($N = I$)
$\varepsilon_{II}^{\text{дискр.}}$	-1,62	-0,46	С учетом дискретного спектра задачи двух центров ($N = II$)
$\varepsilon_{II}^{\text{непр.}}$	-0,34	-0,39	Вклад непрерывного спектра задачи двух центров
ε_{II}	-1,96	-0,85	Вычисленная энергия связи
$\tilde{\varepsilon}_{II}$	-2,196	-1,09	Правильная энергия связи

x) Значение $\varepsilon_{II} = \varepsilon_{II}^{\text{дискр.}} + \varepsilon_{II}^{\text{непр.}}$.

Величина $\varepsilon_{II}^{\text{дискр.}}$ вычислена из системы уравнений (21)

при $N = II$ с шагом $h = 0,1$ на базе $R_m = 60$. Значения $\varepsilon_{II}^{\text{непр.}}$ найдены по теории возмущений в соответствии с алгоритмом работы /17/. Способ нахождения правильных значений энергии связи $\tilde{\varepsilon}_{II}$ изложен в тексте.

Таблица IV

Скорости нерезонансного образования мезомолекул $d\mu$ и $d\tau\mu$ в различных состояниях (J, ν)

Тип перехода	Начальное состояние		Конечное состояние		$\lambda_{d\mu}^{mes}, 10^6 \text{ с}^{-1}$		$\lambda_{d\tau\mu}^{mes}, 10^6 \text{ с}^{-1}$	
	J	J	J	ν	$\xi = 0,004 \text{ эВ}$	$\xi = 0,04 \text{ эВ}$	$\xi = 0,004 \text{ эВ}$	$\xi = 0,04 \text{ эВ}$
ЕI	0	0	I	0	0,013	0,013	$5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$
ЕI	I	0	0	I	0,009	0,091	0,060	0,503
ЕI	I	I	2	0	0,000	0,003	0,006	0,047
ЕО	0	0	0	I	0,017	0,017	0,033	0,033
$\lambda_1, \text{ с}^{-1}$					0,40		0,033	
$\lambda_2, \text{ с}^{-1}(\text{эВ})^{-1}$					2,3		13,8	

Таблица У.

Величины, определяющие скорость резонансного образования
 мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$

Величина	$dd\mu$	$dt\mu$
β	1/3	1
γ	8	4
I_γ , а.е.	$1,52 \cdot 10^{-3}$	$1,33 \cdot 10^{-2}$
\bar{E}_0 , (эВ)	-4,556	-4,556
E_γ (эВ)	-2,307	-3,395
$\tilde{\epsilon}_{II}$ (эВ)	-2,196	-1,09
ϵ_0 (эВ)	0,053	0,07
T° К	400	500
$d_{\zeta i}$, м.а.е.	400	380
m_a	195,742	199,273
λ_3 , 10^6 (с ⁻¹ эВ)	0,15	29,4
λ_{res} , 10^6 с ⁻¹	0,63	94
λ_{nres} , 10^6 с ⁻¹	0,17	0,13
λ_{max} , 10^6 с ⁻¹	0,80	94

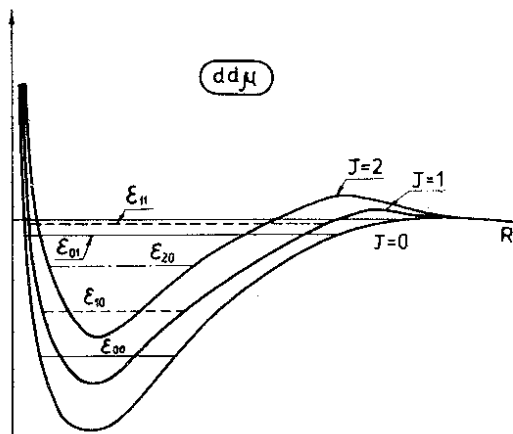


Рис. 1. Схема уровней энергии ϵ_{Jv} мезомолекулы $d\delta\mu$ в состояниях с различным орбитальным моментом J и колебательным числом v .

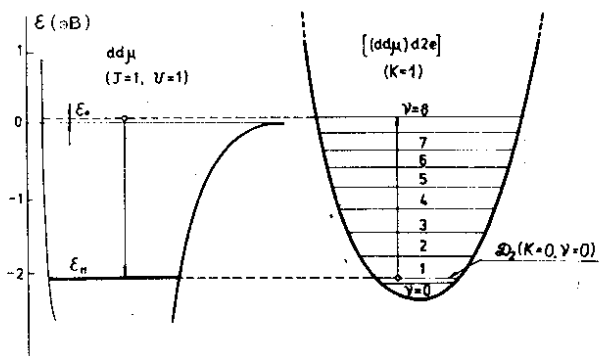


Рис. 2. Схема резонансного образования $d\delta\mu$ - молекулы с передачей энергии связи на возбуждение колебательных уровней v молекулы $[(d\delta\mu)d2e]$.

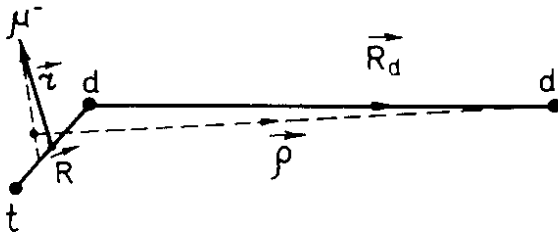


Рис. 3. Система координат для вычисления $\Pi_{fi}^{(9)}$ (9):

\vec{R} - радиус-вектор, соединяющий ядра t и d ;
 \vec{z} - радиус-вектор μ^- -мезона с началом в геометрическом центре отрезка \vec{R} ; $\vec{\rho}$ - радиус-вектор, соединяющий центр инерции системы $dt\mu$ и другое ядро молекулы \mathcal{D}_2 ; \vec{R}_d - вектор между ядрами в молекуле \mathcal{D}_2 .

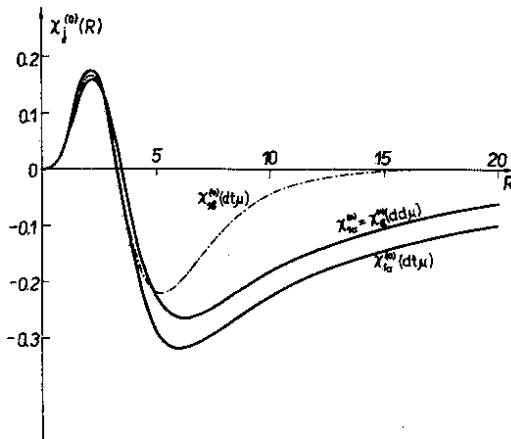


Рис. 4. Волновые функции $\chi_{1g}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{1g}^{(+)} - \chi_{1g}^{(-)})$
 и $\chi_{1g}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{1g}^{(+)} + \chi_{1g}^{(-)})$ состояния
 мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$.

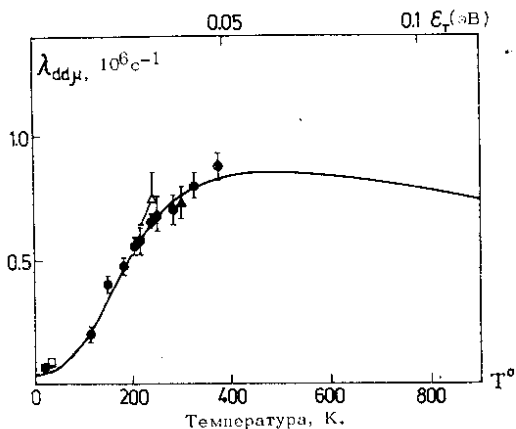


Рис. 5. Теоретическая зависимость скорости $\lambda_{dd\mu}(T)$ образования мезомолекулы $dd\mu$ от температуры T среды. Экспериментальные точки взяты из работ:

- - Феткович и др./11/, □ - Дод/12/,
 ▲ - Желепов и др./13/, ▽ - Быстрицкий и др./14/,
 ● - Быстрицкий и др./15/.

Л и т е р а т у р а

1. Я.Б.Зельдович, С.С.Герштейн. УФН, 71, 581, 1960.
2. S.S.Gerstein, L.I.Ponomarev. "Mesomolecular processes induced by μ^- and π^- mesons" in "Muon Physics". Eds. V.Hughes and C.S.Wu, v. III, 141, Academic Press, New York, 1975.
3. Л.И.Пономарев, М.П.Файнман. ЖЭТФ, 71, 1689, 1976.

4. E.Bleser, L.Lederman, J.Rosen, J.Rothberg, E.Zavattini.
Phys. Rev. 132, 2679, 1963.
5. G.Conforto, C.Rubbia, E.Zavattini, S.Focardi.
Nuovo Cimento, 33, 1001, 1964.
6. Ю.Г.Будяшов, П.Ф.Брмоллов, В.Г.Зинов, А.Д.Ковин, А.И.Мухин,
К.О.Оганесян. Препринт ОИЯИ Р15-3964, Дубна, 1968.
7. В.М.Быстрицкий, В.П.Джеллов, В.И.Петрухин, А.И.Руденко,
В.М.Суворов, В.В.Фильченков, Г.Хемниц, Н.Н.Хованский,
Б.А.Хоменко. ЖЭТФ, 70, 1167, 1976.
8. Я.Б.Зельдович. ДАН СССР, 95, 493, 1954.
9. В.Б.Беляев, С.С.Герштейн, Б.Н.Захарьев, С.П.Ломнев.
ЖЭТФ, 37, 1652, 1959.
10. S.Cohen, D.L.Judd, R.J., Riddel. Phys. Rev. 119, 384,
1960.
11. J.Petkovich, T.Fields, G.Yodh, M.Derrick.
Phys. Rev. Lett. 4, 570, 1960.
12. J.Doede. Phys. Rev. 132, 1782, 1963.
13. В.П.Джеллов, П.Ф.Брмоллов, В.И.Москалев, В.В.Фильченков.
ЖЭТФ, 50, 1235, 1966.
14. В.И.Быстрицкий, В.П.Джеллов, К.О.Оганесян, М.Н.Омельяненко,
С.Ю.Пороховой, А.И.Руденко, В.В.Фильченков. ЖЭТФ, 66,
61, 1974.
15. В.М.Быстрицкий, В.П.Джеллов, В.И.Петрухин, А.И.Руденко,
М.Н.Сомов, В.М.Суворов, В.В.Фильченков, Г.Хемниц, Н.Н.Хо-
ванский, Б.А.Хоменко, Д.Хорват. "Мезоны в веществе",
сборник трудов Международного симпозиума по проблемам ме-
зонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе.
Д1-10908, Дубна, 1977 .

16. Э.А.Весман. ЖЭТФ, Письма. 5, 113, 1967.
 Toimet. Eesti NSV Teaduste Acad. 18, 429, 1969.
17. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев. ЖЭТФ, 72, 1670, 1977.
18. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, И.В.Пузынина, Т.П.Пузынина,
 Л.Н.Сомов. Препринт ОИЯИ Р4-10336, Дубна, 1976.
19. E.R.Cohen, B.N.Taylor, J. Phys. and Chem. Ref. Data,
2, 663 (1973).
20. D.R.Bates, R.H.Reid, in "Advances in Atomic and Molecular
 Physics", v. IV, Academic Press, New York, London, 1968,
 J.D.Power, Phil. Trans. Roy. Soc. London, A272, 663, 1973.
 И.В.Комаров, Л.И.Пономарев, С.Ю.Славянов. "Сфероидальные
 и кулоновские сфероидальные функции", Наука, 1976.
21. T.E.Sharp, Atomic Data, 2, 119, 1971.
22. И.В.Пузынина, Т.П.Пузынина. "Algoritms and Programs for
 Solution of Some Problems in Physics" КФКИ-74-34, Budapest,
 1974.
23. Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. ЖЭТФ 52, 1273, 1967.
 ЖВММФ 8, 1256, 1968.
24. Н.Ф.Трускова. Сообщения ОИЯИ Р11-10207, Дубна, 1976.
25. Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. Препринт ОИЯИ Р4-5040,
 Дубна, 1970.
26. Н.Ф.Трускова. Сообщения ОИЯИ Р11-10937, Дубна, 1977.
27. Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина, Н.Ф.Трускова. Препринт ОИЯИ
 Р4-10938, Дубна, 1977.
28. L.I.Ponomarev, T.P.Puzynina, L.N.Somov. J.Phys. B10,
 1335, 1977.
29. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев. ЯФ, 20, 576, 1974.

30. L.I. Ponomarev, I.V. Puzynin, T.P. Puzynina.

J. Comp. Phys. 13, 1, 1973.

31. М.П. Файнман. ЯФ, 26, 434, 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 августа 1977 года.