



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

1579 / 2-80

7/4-80

P4 - 13036

С.И.Виницкий, В.С.Мележик, Л.И.Пономарев,
И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов,
Н.Ф.Трускова

ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ
 μ -МЕЗОМОЛЕКУЛ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА
В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ
ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ

Направлено в ЖЭТФ

1980

I. Введение

Недавно в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ выполнен эксперимент^{/1/} по измерению скорости $\lambda_{dt\mu}$ образования мезомолекул $dt\mu$ и получена нижняя оценка: $\lambda_{dt\mu} > 10^8 \text{ с}^{-1}$.

Согласно теоретическим расчетам^{/2/} большая скорость этого процесса обусловлена резонансным механизмом образования мезомолекул $dt\mu$ в слабосвязанном вращательно-колебательном состоянии с квантовыми числами $J = 1$, $\nu = 1$. Энергия связи этого состояния $-E_{J\nu} \approx 1$ эВ была впервые вычислена в работе^{/2/} по теории возмущений, реализованной в адиабатическом представлении задачи трех тел^{/3-7/}.

Для детального изучения μ -мезомолекулярных процессов в смеси изотопов водорода и, в частности, для описания процесса резонансного образования мезомолекул $dt\mu$ необходимо знать их уровни энергии с точностью $\sim 0,01$ эВ, что составляет $\sim 10^{-6}$ мезоатомных единиц энергии $\epsilon_{\mu} = 2 m_{\mu} R_y = 5626,52 \text{ эВ}^{/2/}$.

В данной работе представлены результаты вычислений энергий $E_{J\nu}$ различных состояний $(J\nu)$ μ -мезомолекул изотопов водорода. Вычисления выполнены в адиабатическом представлении задачи трех тел, в котором волновая функция μ -мезомолекулы разлагается по полному набору решений задачи двух центров квантовой механики^{/3-5/}. В этом подходе исходная задача на собственные значения для нерелятивистского уравнения Шредингера в шестимерном пространстве сводится к решению задачи Штурма-Лиувилля для системы обыкновенных интегродифференциальных уравнений. Матрицы коэффициентов этой системы (эффективные потенциалы задачи трех тел в адиабатическом представлении) вычислены с необходимой точностью с помощью алгоритмов^{/10-15/}.

Соответствующая задача Штурма-Лиувилля решена численно с требуемой относительной точностью в рамках непрерывного аналога метода Ньютона^{/16,17/} с помощью алгоритмов^{/18-20/}, реализованных в виде комплекса программ на языке FORTRAN-4. Все вычисления выполнены на ЭВМ СДС-6500.

В наших предыдущих работах указанная задача Штурма-Лиувилля решена в двухуровневом приближении^{/16/}, а также по



теории возмущений^{/7/}. Результаты этих вычислений, а также результаты наилучших вариационных расчетов^{/8,9/} сравниваются со значениями $E_{J\nu}$, полученными в данной работе.

2. Постановка задачи

Волновые функции $\Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R})$ и полные энергии $E_{n\tau}$ различных состояний $|n\tau\rangle$ μ - мезомолекул изотопов водорода находятся из нерелятивистского уравнения Шредингера в шестимерном пространстве (\vec{r}, \vec{R}) ^{/4/}

$$(\hat{H} - E_{n\tau}) \Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R}) = 0, \quad (1)$$

где (в единицах $e = \hbar = 1$)

$$\hat{H} = \hat{T}_a + \hat{h}_a + \frac{1}{R}, \quad (2)$$

$$\hat{T}_a = -\frac{1}{2M_0} \left[(\nabla_R + \frac{\alpha}{2} \nabla_P)^2 - \left(\frac{1+\alpha}{2} \right)^2 \Delta_P \right],$$

$$\hat{h}_a = -\frac{1}{2m_a} \Delta_P - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b}, \quad (3)$$

Здесь R - вектор, соединяющий ядра мезомолекулы a и b с массами M_a и M_b (в дальнейшем $M_a \geq M_b$); \vec{r} - вектор, соединяющий середину отрезка R и μ^- -мезон с массой m_μ ; r_a и r_b - расстояния от ядер a и b до μ^- -мезона.

Движение μ^- -мезона в мезомолекуле характеризуется тремя параболическими квантовыми числами $n \equiv [n_1 n_2 m]$, а относительное движение ядер a и b - набором квантовых чисел $\tau = (J m_J \nu \lambda)$, где J и m_J - полный орбитальный момент системы трех тел и его проекция на ось Z лабораторной системы координат соответственно, ν - вибрационное квантовое число, а $\lambda = \pm (-)^J$ - полная четность системы трех тел.

Наибольший интерес представляют уровни энергии мезомолекул, соответствующие основному состоянию движения μ^- -мезона, т.е. состоянию с квантовыми числами $n = [000]$. Поскольку в отсутствие магнитных полей энергия μ^- -мезомолекул не зависит от

квантового числа m_J , мы в дальнейшем будем его опускать. Таким образом, для состояний с $n = [000]$ и заданной полной четностью λ волновая функция зависит лишь от квантовых чисел J и ν :

$$\Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R}) \equiv \langle \vec{r}, \vec{R} | n\tau \rangle = \langle \vec{r}, \vec{R} | J\nu \rangle = \Psi_{J\nu}(\vec{r}, \vec{R}). \quad (4)$$

Эти волновые функции удовлетворяют соотношению ортогональности:

$$\langle J\nu | J'\nu' \rangle = \int d\vec{r} d\vec{R} \Psi_{J\nu}^+(\vec{r}, \vec{R}) \Psi_{J'\nu'}(\vec{r}, \vec{R}) = \delta_{JJ'} \delta_{\nu\nu'}. \quad (5)$$

Адиабатический базис, по которому разлагается волновая функция $\langle \vec{r}, \vec{R} | J\nu \rangle$ состояния $(J\nu)$ мезомолекулы, определяется как полный набор решений задачи двух центров квантовой механики^{/5/}, т.е. задачи о движении μ^- -мезона в кулоновском поле двух фиксированных ядер, a и b , удаленных на расстоянии R друг от друга:

$$\hat{h} \phi_j(\vec{r}; R) = E_j(R) \phi_j(\vec{r}; R), \quad (6a)$$

$$\phi_j(\vec{r}; R) \equiv \langle \vec{r}; R | j \rangle = \langle \vec{r}; R | n_1 n_2 m p \rangle,$$

$$\hat{h} \phi_c(\vec{r}; R) = \frac{k^2}{2} \phi_c(\vec{r}; R), \quad (6b)$$

$$\phi_c(\vec{r}; R) \equiv \langle \vec{r}; R | c \rangle = \langle \vec{r}; R | k n_2 m p \rangle,$$

где

$$\hat{h} = -\frac{1}{2} \Delta_P - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b} = \quad (6v)$$

гамильтониан задачи двух центров, $E_j(R)$ - терм, соответствующий состоянию $|j\rangle$ дискретного спектра этой задачи, а k - импульс μ^- -мезона, соответствующий состоянию $|c\rangle$ непрерывного спектра этой задачи.

Состояния $|j\rangle \equiv |jp\rangle$ дискретного спектра нумеруются набором $j = [n_1 n_2 m]$ параболических квантовых чисел n_1, n_2, m и четностью $p = (g, u)$ по отношению к инверсии $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ относительно начала координат. В сферических координатах $\vec{r} = \{\xi, \eta, \psi\}$, $\xi = \frac{r_a + r_b}{R}$, $\eta = \frac{r_a - r_b}{R}$,

решения $\phi_j(\vec{r}; R)$, ограниченные в области $1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \zeta \leq 1$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $0 \leq R < \infty$, можно представить в виде

$$\phi_j(\vec{r}; R) = \phi_{jp}(\vec{r}; R) = \phi_{jp}(\xi, \zeta, \varphi; R) = \psi_{jp}(\xi, \zeta; R) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} (-)^m e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} \end{cases} \quad (7a)$$

Они удовлетворяют соотношению ортогональности:

$$\langle j'p' | j'p' \rangle = \int d\vec{r} \phi_{j'p'}^*(\vec{r}; R) \phi_{jp'}(\vec{r}; R) = \delta_{pp'} \delta_{mm'} \delta_{n_2 n_2'} \delta_{n_1 n_1'} \quad (7b)$$

$$d\vec{r} = \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \zeta^2) d\xi d\zeta d\varphi.$$

Состояния $|c\rangle \equiv |ksp\rangle$ непрерывного спектра задачи двух центров характеризуются импульсом k μ^- -мезона, набором $s = [n_2 m]$ параболических квантовых чисел n_2 и m и четностью p . Соответствующие решения, ограниченные в области $1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \zeta \leq 1$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $0 \leq R < \infty$,

$$\phi_c(\vec{r}; R) = \phi_{sp}(\vec{r}; k, R) = \phi_{sp}(\xi, \zeta, \varphi; k, R) = \psi_{sp}(\xi, \zeta; k, R) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} (-)^m e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} \end{cases} \quad (8a)$$

удовлетворяют соотношению ортогональности:

$$\langle c | c' \rangle = \int d\vec{r} \phi_c^*(\vec{r}; R) \phi_{c'}(\vec{r}; R) = \delta_{pp'} \delta_{mm'} \delta_{n_2 n_2'} \delta(k - k'). \quad (8b)$$

Зависимость волновой функции $\Psi_{J\nu}(\vec{r}, \vec{R})$ от угловых переменных Θ и Φ вектора $R = \{R, \Theta, \Phi\}$ в лабораторной системе координат, а также от азимутального угла φ вектора $\vec{r} = \{\xi, \zeta, \varphi\}$ в системе координат, вращающейся вместе с вектором \vec{R} , отделяется с помощью симметризованной комбинации нормированных D -функций Вигнера:

$$D_{mm_J}^J(\Phi, \Theta, \varphi) = \left(\frac{1 + \delta_{0m}}{4\pi} \right)^{1/2} \left[(-)^m e^{im\varphi} D_{mm_J}^J(\Phi, \Theta, 0) + e^{-im\varphi} D_{mm_J}^J(\Phi, \Theta, 0) \right],$$

которые соответствуют полной четности $\lambda = +(-)^J / 4$. (9)

Используя решения (7a), (8a) и функции (9), волновую функцию (4) можно представить в виде разложения:

$$\Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{m=0}^J D_{mm_J}^J(\Phi, \Theta, \varphi) R^{-1} F_m^{J\nu}(\xi, \zeta, R), \quad (10a)$$

$$F_m^{J\nu}(\xi, \zeta, R) = \sum_{p=g,u} \sum_{n_2=0}^{\infty} \left\{ \sum_{n_1=0}^{\infty} \psi_{jp}(\xi, \zeta; R) \chi_{jp}^{J\nu}(R) + \int_0^{\infty} dk \psi_{sp}(\xi, \zeta; k, R) \chi_{sp}^{J\nu}(k, R) \right\}. \quad (10b)$$

Регулярные при $R=0$ и ограниченные на полюсах $0 \leq R < \infty$ функции

$$\chi_{jp}^{J\nu}(R) \equiv \langle R; jp | J\nu \rangle = \langle R; n_1 n_2 m p | J\nu \rangle,$$

$$\chi_{sp}^{J\nu}(k, R) \equiv \langle R; ksp | J\nu \rangle = \langle R; k n_2 m p | J\nu \rangle \quad (II)$$

представляют относительное радиальное движение ядер a и b в μ^- -мезомолекуле и удовлетворяют соотношению ортогональности, которое следует из (5), (7a) и (8a):

$$\sum_{p=g,u} \sum_{m=0}^J \sum_{n_2=0}^{\infty} \left\{ \sum_{n_1=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dR \chi_{jp}^{J\nu}(R) \chi_{jp}^{J\nu'}(R) + \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dR \chi_{sp}^{J\nu}(k, R) \chi_{sp}^{J\nu'}(k, R) \right\} = \delta_{\nu\nu'} \quad (IIa)$$

При постановке граничных условий, соответствующих правильному пределу диссоциации μ^- -мезомолекулы на мезонотом и ядро /4/, для волновой функции (10a) в разложении (10b) вместо решений

$$\psi_{jg}(\xi, \zeta; R), \psi_{ju}(\xi, \zeta; R), \psi_{sg}(\xi, \zeta; k, R), \psi_{su}(\xi, \zeta; k, R)$$

обычно используют их линейные комбинации (аргументы опускаем):

$$\psi_{ja} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{jg} - \psi_{ju}),$$

$$\psi_{jc} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{jg} + \psi_{ju}) \quad (12a)$$

и аналогичные комбинации для ψ_{sa} и ψ_{sb} .

Преобразование (IIa) индуцирует преобразование для функций $X_{jg} \equiv X_{jg}^{JV}(R)$ и $X_{ju} \equiv X_{ju}^{JV}(R)$

$$X_{ja} = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_{jg} - X_{ju}), \quad (I2a)$$

$$X_{je} = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_{jg} + X_{ju}),$$

и такое же преобразование для $X_{sg}^{JV}(k, R)$ и $X_{su}^{JV}(k, R)$. Поскольку при этом выполняется соотношение

$$\varphi_{jg} X_{jg} + \varphi_{ju} X_{ju} = \varphi_{ja} X_{ja} + \varphi_{je} X_{je}, \quad (I3)$$

то разложение (IOб) сохраняет свой вид с изменением смысла индекса p :

$$p = (g, u) \longrightarrow p = (a, e).$$

Подставляя построенное таким образом разложение для волновой функции $\Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R})$ в уравнение (I) и усредняя его по переменным $\Phi, \Theta, \varphi, \xi, \zeta$, приходим к бесконечной системе обыкновенных интегродифференциальных уравнений на полуоси $0 \leq R < \infty$:

$$\begin{aligned} \hat{I} \left\{ \frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} - \frac{2M}{R} + 2ME_{JV} \right\} X_i(R) = \\ = \sum_{j=1}^{\infty} \hat{U}_{ij}(R) X_j(R) + \sum_{s=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dk \hat{U}_{is}(k, R) X_s(k, R), \\ \hat{I} \left\{ \frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} - \frac{2M}{R} + 2ME_{JV} \right\} X_s(k, R) = \\ = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{U}_{si}(k, R) X_i(R) + \sum_{s'=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dk' \hat{U}_{ss'}(k, k', R) X_{s'}(k', R), \end{aligned} \quad (I4)$$

с граничными условиями

$$X_i(k, 0) = 0, \quad \lim_{R \rightarrow \infty} X_i(R) = 0, \quad i = 1, 2, \dots,$$

$$X_s(k, 0) = 0, \quad \lim_{R \rightarrow \infty} X_s(k, R) = 0, \quad s = 1, 2, \dots, \quad 0 \leq k < \infty. \quad (I5)$$

Здесь $M = M_0/m_a$, $E_{JV} = E_{n\tau} - E_{sa}$ - энергия состояния (JV) μ - мезомолекулы, отсчитанная от энергии E_{sa}

основного состояния мезоатома (m_a, M_a) , а все величины измеряются в единицах $e = \hbar = m_a = 1$. Система уравнений (I4) записана в "двухкомпонентной форме" /3,4/:

$$X_i(R) = X_i^{JV}(R) = \begin{pmatrix} X_{ia}(k, R) \\ X_{ie}(k, R) \end{pmatrix}, \quad X_s(k, R) = X_s^{JV}(k, R) = \begin{pmatrix} X_{sa}(k, R) \\ X_{se}(k, R) \end{pmatrix};$$

$$\hat{U}_{ij}(R) = \begin{pmatrix} U_{ia,ja}(R) & U_{ia,je}(R) \\ U_{ie,ja}(R) & U_{ie,je}(R) \end{pmatrix}, \quad \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (I6)$$

и аналогично - для матриц $\hat{U}_{is}(k, R)$, $\hat{U}_{si}(k, R)$ и $\hat{U}_{ss'}(k, k', R)$.

Потенциалы $U_{ip,jp'}(R)$ вычисляются по формулам, которые следуют из преобразований (I2a) и (I2б):

$$U_{ia,ja}(R) = \frac{1}{2} \left\{ (V_{ig,jg} + V_{iu,ju}) - (V_{ig,ju} + V_{iu,jg}) \right\} - 2ME_{sa} \delta_{ij},$$

$$U_{ia,je}(R) = \frac{1}{2} \left\{ (V_{ig,jg} - V_{iu,ju}) + (V_{ig,ju} - V_{iu,jg}) \right\}, \quad (I7)$$

$$U_{ie,ja}(R) = \frac{1}{2} \left\{ (V_{ig,jg} - V_{iu,ju}) - (V_{ig,ju} - V_{iu,jg}) \right\},$$

$$U_{ie,je}(R) = \frac{1}{2} \left\{ (V_{ig,jg} + V_{iu,ju}) + (V_{ig,ju} + V_{iu,jg}) \right\} - 2ME_{sa} \delta_{ij}.$$

Потенциалы $V_{ig,jg} = V_{ig,jg}(R)$ и т.д. выражаются через термы $E_j(R)$ и матричные элементы $H_{ij}^{(\pm)}(R)$, $H_{ij}^{(\infty)}(R)$, $Q_{ij}^{(\pm)}(R)$ и $B_{ij}^{(\pm)}(R)$, определенные в работах /10-12, I4, I5/ следующим образом:

$$\begin{aligned} V_{ig,jg}(R) = 2ME_{ig}(R) \delta_{ij} + H_{ig,jg}^{(\pm)}(R) - (1+2\alpha) H_{ig,jg}^{(\infty)}(R) + \\ + B_{ig,jg}^{(\pm)}(R) + \frac{1}{dR} Q_{ig,jg}^{(\pm)}(R) + 2Q_{ig,jg}^{(\pm)}(R) \frac{d}{dR}, \end{aligned} \quad (I8)$$

$$\begin{aligned} V_{ig,ju}(R) = \alpha \left\{ H_{ig,ju}^{(\pm)}(R) + B_{ig,ju}^{(\pm)}(R) + \right. \\ \left. + \frac{1}{dR} Q_{ig,ju}^{(\pm)}(R) + 2Q_{ig,ju}^{(\pm)}(R) \frac{d}{dR} \right\}. \end{aligned} \quad (I9)$$

Аналогичные соотношения справедливы для $V_{iu,ju}(R)$ и $V_{iu,jg}(R)$ с очевидными заменами $g \leftrightarrow u$ в правой части равенств (I8), (I9).

Для потенциалов $V_{ip,sp'}(k,R)$, связывающих состояния дискретного $|i\rangle$ и непрерывного $|c\rangle$ спектров задачи двух центров, соотношения (I8), (I9) по-прежнему справедливы.

Потенциалы $V_{sp,sp'}(k,k',R)$, связывающие состояния $|c\rangle$ и $|c'\rangle$ непрерывного спектра задачи двух центров, в общем случае можно представить в виде

$$V_{sp,sp'}(k,k',R) = V_{sp,sp'}(k,R)\delta(k-k') + v_{sp,sp'}(k,k',R). \quad (20)$$

Подобно (I8), потенциалы $V_{sg,s'g}(k,R)$ могут быть представлены как

$$V_{sg,s'g}(k,R) = 2M \cdot \frac{k^2}{2} \delta_{ss'} + H_{sg,s'g}^{(+)}(k,R) - (1+2\alpha)H_{sg,s'g}^{(*)}(k,R) + B_{sg,s'g}^{(+)}(k,R) + \frac{d}{dR}Q_{sg,s'g}^{(+)}(k,R) + 2Q_{sg,s'g}^{(*)}(k,R)\frac{d}{dR}. \quad (21)$$

Выражения для потенциалов $V_{su,s'u}(k,R)$, $V_{sg,s'u}(k,R)$ и $V_{su,s'g}(k,R)$ строятся аналогично (I8) и (I9).

Используя асимптотику матричных элементов $H_{ij}^{(\pm)}(R)$, $H_{ij}^{(*)}(R)$, $Q_{ij}^{(\pm)}(R)$, $B_{ij}^{(\pm)}(R)$ при $R \rightarrow \infty$ [21], найдем, что начало отсчета энергии $E_{n\tau}$ (в единицах $e = \hbar = m_a = 1$) равно $4/3$:

$$(2M)^{-1} V_{1a,1a}(\infty) = E_{1g}(\infty) = E_{1a} = -\frac{1}{2},$$

т.е. энергии основного состояния мезоатома $(m_m M_a)$. При этом $U_{1a,1a}(\infty) = 0$.

Решая сингулярную задачу Штурма-Лиувилля (I4), (I5) с потенциалами (I7)-(21), можно найти уровни энергии $E_{J\tau}$ и волновые функции $X_j(R)$ и $X_s(k,R)$ мезомолекул.

3. Решение задачи Штурма-Лиувилля для системы обыкновенных интегродифференциальных уравнений

При решении сингулярной задачи Штурма-Лиувилля (I4), (I5) для бесконечной системы обыкновенных интегродифференциальных уравнений на луче $0 \leq R < \infty$ аппроксимируем ее регулярной задачей Штурма-Лиувилля для конечной системы уравнений размерности N на конечном интервале $0 \leq R \leq R_m$ [22,23]:

$$\hat{I} \left\{ \frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} - \frac{2M}{R} + 2M E_{J\tau} \right\} X_i(R) = \sum_{j=1}^{N_i} \hat{U}_{ij}(R) X_j(R) + \sum_{s=1}^{N_s} \int_0^{k_m} dk \hat{U}_{is}(k,R) X_s(k,R); \quad (22a)$$

$$\hat{I} \left\{ \frac{d^2}{dk^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} - \frac{2M}{R} + 2M E_{J\tau} \right\} X_s(k,R) = \sum_{i=1}^{N_i} \hat{U}_{si}(k,R) X_i(R) + \sum_{s'=1}^{N_s} \int_0^{k_m} dk' \hat{U}_{ss'}(k,k',R) X_{s'}(k',R),$$

с граничными условиями

$$X_i(0) = X_i(R_m) = 0, \quad 1 \leq i \leq N_i,$$

$$X_s(k,0) = X_s(k,R_m) = 0, \quad 1 \leq s \leq N_s, \quad 0 \leq k \leq k_m. \quad (22b)$$

Численное исследование сходимости разложения (I0), проведенное в данной работе, показывает, что для вычисления уровней энергии M -мезомолекул с точностью $\sim 0,1$ эВ достаточно положить $N_i = 13$, $N_s = 6$, $R_m = 60$, $k_m = 10$. При этом интервал $0 \leq k \leq k_m$ для каждого состояния $|ks\rangle$ разбивается $N_k^{(s)}$ узловыми точками k_a ($a = 1, 2, \dots, N_k^{(s)}$) с шагом Δk_a и все интегралы по k заменяются суммами вида

$$\int_0^{k_m} f(k) dk = \sum_{a=1}^{N_k^{(s)}} f(k_a) \varphi(k_a) \Delta k_a, \quad (23)$$

где $\varphi(k_a) \Delta k_a$ - вес квадратурной формулы Симпсона. При такой дискретизации непрерывного спектра общее число уравнений в системе (22) равно $N = 2(N_i + N_s)$, где $N_s = \sum_{s=1}^{N_s} N_k^{(s)}$.

В данной работе $N_c = 119$, т.е. общее число уравнений в системе (22) равно $N = 264$.

Потенциалы $V_{ij}(R)$, связывающие состояния $|c\rangle = |n_1 n_2 m\rangle$ и $|d\rangle = |n_1 n_2 m\rangle$ дискретного спектра задачи двух центров для всех наборов квантовых чисел, удовлетворяющих условию

$$n = n_1 + n_2 + m + 1 \leq 3, \quad n' = n'_1 + n'_2 + m' + 1 \leq 3,$$

а также потенциалы $V_{1j}(R)$, $V_{2j}(R)$, связывающие (g, u) -пару состояний $|1\rangle = |000\rangle$ с тремя парами состояний

$|j\rangle = |300\rangle, |210\rangle, |120\rangle$ из оболочки $n = 4$, вычислены с помощью алгоритмов^{/10,11/} на интервале изменения

$R = 0,1(0,1)20(1)100$ с относительной точностью $\sim 10^{-7}$. Общее число использованных потенциалов $V_{ij}(R)$ равно 436.

Потенциалы $V_{1s}(k, R)$, связывающие пару основных состояний задачи двух центров $|000g\rangle$ и $|000u\rangle$ с парами $|ks_g\rangle$ и $|ks_u\rangle$ состояний непрерывного спектра, вычислены с абсолютной точностью $\sim 10^{-5}$ на интервале изменения

$R = 0,1(0,1)5(0,2)11(0,5)20^{/13,14/}$. Для состояний

$s = [n_2 m] = [00]$ потенциалы рассчитаны при значениях $k = 0,2(0,1)1(1)10$ ($N_k^{(s)} = 18$), для состояний $[10], [20], [01]$ и $[11]$ - при $k = 0,2(0,1)1(0,2)2(1)10$ ($N_k^{(s)} = 22$), для состояний $[30]$ - при $k = 0,2(0,2)2(1)5$ ($N_k^{(s)} = 13$). Общее число использованных потенциалов $V_{1s}(k, R)$ и $V_{s1}(k, R)$ равно 476.

Диагональные матричные элементы $V_{sg,sg}(k, R)$, $V_{sg, su}(k, R)$ и т.д., связывающие пары состояний $|c\rangle = |k n_2 m g\rangle$ и $|c'\rangle = |k n_2 m u\rangle$ непрерывного спектра задачи двух центров, вычислены в работе^{/15/} с абсолютной точностью $\sim 10^{-5}$,

для наборов $n_2 = 0,1,2,3$ и $m = 0,1$ при значениях

$k = 0,2(0,1)1(0,2)2(1)10$ в интервале изменения

$R = 0,1(0,1)5(0,2)11(0,5)20$.

Общий вид матрицы потенциалов $\hat{U}(R)$, рассчитанной в настоящее время, представлен на рис. 1.

Для численного решения задачи Штурма-Лиувилля (22) были использованы алгоритмы^{/18-20/} построенные на основе непрерывного аналога метода Ньютона^{/16/} и его модификаций^{/17/}.

Вычисления искомых значений $\epsilon_{\gamma\gamma}, \chi_i(R), \chi_s(k, R)$ проводились с помощью программ ITER^{/19/} и ВААР^{/20/}.

При этом начальные приближения для $\epsilon_{\gamma\gamma}$ и $\chi_i(R)$ вычис-

Таблица I

Энергия связи — $\epsilon_{\gamma\gamma}$ (эВ) состояний ($\gamma\gamma$) мезомолекул $pp\mu, p\mu\mu, p\tau\mu$

PPμ	Pμμ		Pτμ		Молекула
	(00)	(10)	(00)	(10)	
247,31	215,68	91,35	207,28	92,21	Двухуровневое приближение Теория возмущений ITER ВААР Вариационный расчет
253,55	221,49	98,79	213,85	101,30	
252,89	221,52	97,36	213,96	99,06	
252,95	221,52	97,40	213,97 ⁰⁾	99,01	
253,09 ^{a)}	221,28 ^{a)}	-	213,0	-	

a) Carter B.P., Phys. Rev., **165**, p. 139, 1968.

б) Halpern A., Phys. Rev. Lett., **13**, p. 660, 1964.

в) Carter B.P., Phys. Rev., **141**, p. 863, 1966.

лялись по программе SYSTEM /18/, которая позволяет решать частичную задачу Штурма-Лиувилля для системы ~ 40 обыкновенных дифференциальных уравнений. Начальные приближения для функций $\chi_s(k, R)$ выбирались равными нулю.

Программа ITER позволяет решать частичную задачу Штурма-Лиувилля (22), (23) для системы обыкновенных дифференциальных уравнений размерности ~ 300 для матрицы потенциалов, изображенной на рис. 1.

Программа ВААР построена на основе программы ITER для решения задачи (22), (23) с матрицей потенциалов специального вида: в ней присутствуют только потенциалы

$U_{jj}(R), U_{j_1}(R), U_{s_1}(k, R), U_{s_1}(k, R), U_{jj}(R)$ и $U_{ss}(k, R)$ (на рис. 1 эта матрица выделена пунктиром). Это позволяет сократить время вычислений на порядок по сравнению с временем вычислений по программе ITER.

При выбранном способе разбиения интервала $0 \leq R \leq R_m$ узловыми точками R_n , в которых заданы потенциалы $\hat{U}_{ij}(R)$, $\hat{U}_{s_1}(k, R)$ и $\hat{U}_{ss}(k, R)$, а также при выбранных значениях $N_i, N_s, N_k^{(s)}, R_m$ относительная точность решения задачи Штурма-Лиувилля (22) с помощью алгоритмов ITER и ВААР составляет $10^{-4}-10^{-5}$.

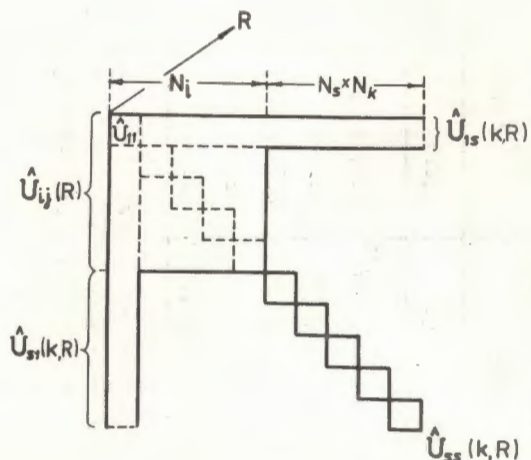


Рис. 1

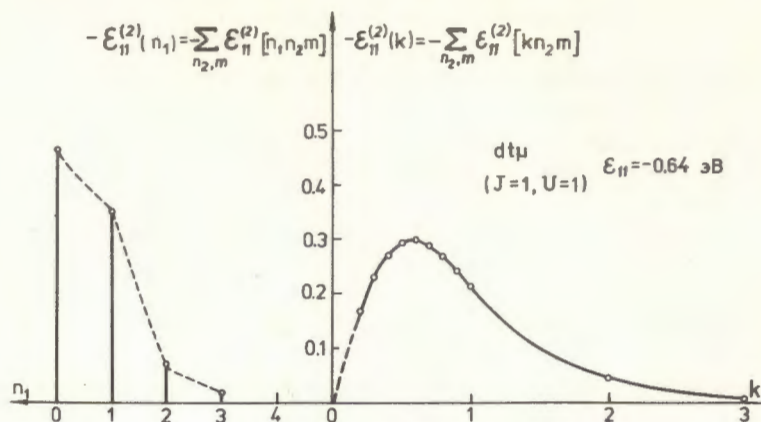


Рис. 2

4. Обсуждение результатов

Результаты вычислений представлены в таблицах I-9. В первой строке таблиц I-3 приведены значения $\epsilon_{Jv} = \epsilon_{Jv}^{(0)}$, вычисленные в двухуровневом приближении ($N_i=1, N_s=0$) адиабатического метода /4-7/ с помощью алгоритма SYSTEM. В этом приближении матрица потенциалов $\hat{U}(R)$ состоит только из одного блока $\hat{U}_{11}(R)$ (см. рис. 1), точность вычисления энергии ϵ_{Jv} для глубоких уровней составляет I-5 эВ, а значение $\epsilon_{11}^{(0)}(dt\mu) = -0,64$ эВ. Стационарное состояние ($J=1, v=1$) мезомолекулы $dt\mu$ в этом приближении отсутствует, а вместо него появляется квазистационарное состояние с энергией $\epsilon_{11}^{(0)}(dt\mu) = +0,47$ эВ и шириной $\sim 0,2$ эВ. При расширении системы уравнений (22) этот квазистационарный уровень движется к границе континуума, и при $N_i=4, N_s=0$ квазистационарное состояние становится стационарным. В вариационных расчетах /8,9/ стационарное состояние ($J=1, v=1$) молекулы $dt\mu$ не обнаружено.

Во второй строке таблиц I-3 приведены значения $\epsilon_{Jv} = \epsilon_{Jv}^{(0)} + \epsilon_{cont}^{(2)}$, вычисленные по теории возмущений согласно алгоритму работы /3/, причем вклад дискретного спектра $\bar{\epsilon}_{Jv} = \epsilon_{Jv}^{(0)} + \epsilon_{discr}^{(2)}$ вычислялся по программе SYSTEM при $N_i=13, N_s=0$, а функции χ_{sa} и χ_{se} , найденные при решении этой системы, использованы для вычисления вклада $\epsilon_{cont}^{(2)}$ (см. (25)).

Таблица 2

Энергия связи — $\epsilon_{j\nu}$ (эВ) состояний ($j\nu$) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$

($j\nu$)	(00)	(01)	(10)	(11)	(20)	Метод
$dd\mu$	322,69	33,14	224,08	0,64	83,56	Двухуровневое приближение
	324,99	35,66	226,74	1,83	85,34	Теория возмущений
	325,05	35,81	226,61	1,39	86,31	ITER x)
	325,04	35,80	226,61	1,91 ^{xx)}	86,32	ВААР
	324,27 ^{a)}	32,76 ^{a)}	226,55 ^{b)}	-	-	Вариационный расчет
$dt\mu$	317,04	32,21	230,10	-0,47	99,90	Двухуровневое приближение
	319,09	34,70	232,61	0,63	103,16	Теория возмущений
	319,15	34,87	232,43	0,17	102,52	ITER x)
	319,15	34,87	232,44	0,64 ^{xx)}	102,54	ВААР
	318,07 ^{a)}	32,95 ^{a)}	-	-	-	Вариационный расчет

x) Вычисления по программе ITER выполнены при $R_m = 20$.

xx) Значения, полученные по программе ВААР при $R_m = 60$. При $R_m = 20 - \epsilon_{11}(dd\mu) = 1,39$ эВ и $-\epsilon_{11}(dt\mu) = 0,17$ эВ, т.е. полностью совпадают с результатами, полученными по программе ITER.

a) Carter B.P., Phys. Rev., 165, 139, 1968.

b) Halpern A., Phys. Rev. Lett., 13, p. 660, 1964.

Третья строка содержит результаты вычислений $\epsilon_{j\nu}$ по программе ITER с целиком заполненной матрицей потенциалов $\hat{U}(R)$, вид которой представлен на рис. 1.

Четвертая строка содержит результаты вычислений по программе ВААР.

Во всех перечисленных случаях использованы лишь диагональные матричные элементы (20), связывающие состояния $|ks\rangle$ непрерывного спектра, т.е. потенциалы в уравнениях (22) имеют вид $\hat{U}_{ss'}(k, k', R) = \hat{U}_{ss}(k, R) \delta_{ss'} \delta(k - k')$, причем в потенциалах $\hat{U}_{ss}(k, R)$ учтен только ведущий член:

$$\hat{U}_{ss}(k, R) = \hat{I} M k^2.$$

В пятой строке приведены результаты невлучших вариационных расчетов^{8,9/}.

В проведенных вычислениях использованы следующие значения масс частиц (в единицах массы электрона m_e) и значение Ry /24/:

$$m_\mu = 206,769, \quad M_p = 1836,152, \quad M_d = 3670,481, \\ M_t = 5496,918, \quad Ry = 13,6058 \text{ эВ.}$$

Из таблиц 1-3 легко видеть, что значения $\epsilon_{j\nu}$, вычисленные по теории возмущений, весьма близки к значениям, вычисленным по программам ITER и ВААР. Значения $\epsilon_{j\nu}$, рассчитанные по программам ITER и ВААР, с большой точностью ($\sim 10^{-2}$ эВ) совпадают между собой. Это означает, что при вычислениях с этой точностью вкладом потенциалов $\hat{U}_{ij}(R)$ при $i \neq j \neq 1$ можно пренебречь. Как правило, результаты расчетов $\epsilon_{j\nu}$ с граничными условиями (22б) при $R_m = 60$ и $R_m = 20$ не различаются между собой с точностью $\sim 10^{-2}$ эВ, поэтому вычисления по программе ITER выполнены при $R_m = 20$. Исключения составляют слабосвязанные состояния ($j=1, \nu=1$) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$, для которых значения $\epsilon_{j\nu}$, полученные при $R_m = 20$ и $R_m = 60$, заметно различаются (см. таблицу 2).

Вычислив функции $X_j(R)$ и $X_s(k, R)$, например по программе ВААР, можно найти вклад, который вносит в $\epsilon_{j\nu}$ каждое из состояний $|j\rangle = |n_2 n_2 m\rangle$ и $|s\rangle = |k n_2 m\rangle$ задачи двух центров. Это, в свою очередь, позволяет численно исследовать скорость сходимости разложения (10б) и определить минимальное число членов в этом разложении, необходимое для вычисления $\epsilon_{j\nu}$ с заданной точностью.

Таблица 3

Энергия связи — ϵ_{TV} (эВ) состояний (TV) мезомолекулы t^*tm

(00)	(01)	(10)	(11)	(20)	(30)	(TV)
361,56	81,61	287,65	43,23	170,95	46,81	Двухуровневое приближение
362,89	83,68	289,19	45,15	172,79	48,90	Теория возмущений
362,95	83,87	289,15	45,24	172,64	48,69	ITER
362,95	83,88	289,15	45,24	172,65	48,70	ВААР
361,4 ^{a)}	75,2 ^{b)}	288,72	-	-	-	Вариационный расчет

a) Carter B.P., Phys. Rev., **141**, 863, 1966.б) Halpern A., Phys. Rev. Lett., **13**, p. 660, 1964.

С этой целью представим энергию ϵ_{TV} состояния (TV) в виде суммы, аналогичной ряду теории возмущений^{/3/}

$$\epsilon_{TV} = \epsilon_{TV}^{(0)} + \epsilon_{TV}^{(2)}, \quad (24)$$

Где

$$\epsilon_{TV}^{(0)} = (2M)^{-1} \int_0^{R_m} dR \chi_1(R) \left\{ -\hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} - \frac{2M}{R} \right) + \hat{U}_{1s}(R) \right\} \chi_1(R),$$

$$\epsilon_{TV}^{(2)} = \epsilon_{discr}^{(2)} + \epsilon_{cont}^{(2)},$$

$$\epsilon_{discr}^{(2)} = \sum_{n_1=0} \sum_{n_2=0} \sum_{m=0} \epsilon_{TV}^{(2)} [n_1 n_2 m] = \sum_{j=1}^{N_i} \epsilon_{TV}^{(2)} [j], \quad (25)$$

$$\epsilon_{cont}^{(2)} = \sum_{n_2=0} \sum_{m=0} \int_0^{k_m} dk \epsilon_{TV}^{(2)} [k n_2 m] = \sum_{s=1}^{N_s} \int_0^{k_m} dk \epsilon_{TV}^{(2)} [ks],$$

$$\epsilon_{TV}^{(2)} [js] = (2M)^{-1} \int_0^{R_m} dR \chi_1(R) \hat{U}_{1s}(R) \chi_j(R), \quad (25a)$$

$$\epsilon_{TV}^{(2)} [ks] = (2M)^{-1} \int_0^{R_m} dR \chi_1(R) \hat{U}_{1s}(k, R) \chi_s(k, R).$$

При этом функции $\chi_j(R)$, $\chi_s(k, R)$ нормированы условием

$$\sum_{p=(a,b)} \left\{ \sum_{j=1}^{N_i} \int_0^{R_m} dR \chi_{jp}^2(R) + \sum_{s=1}^{N_s} \int_0^{k_m} dk \int_0^{R_m} dR \chi_{sp}^2(k, R) \right\} = 1, \quad (26)$$

которое аппроксимирует условие нормировки (IIa) в том же смысле, в каком система уравнений (22) аппроксимирует систему (I4). Суммы в правых частях равенств (25a) следует понимать в соответствии с определениями (I6), например,

$$\chi_1 \hat{U}_{1s} \chi_j = \chi_{1a} U_{1a,ja} \chi_{ja} + \chi_{1a} U_{1a,je} \chi_{je} + \chi_{1e} U_{1e,ja} \chi_{ja} + \chi_{1e} U_{1e,je} \chi_{je} \quad (27)$$

и т.д.

Отметим, что величины $\epsilon_{TV}^{(0)}$ и $\epsilon_{TV}^{(2)}$, вычисленные по формулам (24), (25a), лишь приблизительно совпадают с аналогичными величинами, вычисленными по теории возмущений^{/3,7/}, поскольку

Таблица 4

Вклад различных состояний $|j\rangle = |n_1 n_2 m\rangle$ дискретного спектра задачи двух центров в энергию связи $-\varepsilon_{TV}$ (эВ) мезомолекул

n	$[n_1 n_2 m]$	ppμ		pdμ		ddμ	dtμ
		(00)	(10)	(00)	(10)	(11)	(11)(TV)
1	[000]	246,947	101,236	215,401	91,141	0,558	-0,645
2	[100]	1,591	1,114	1,213	0,946	0,310	0,282
	[010]	1,779	1,639	1,725	1,797	0,409	0,395
	[001]	-	0,465	-	0,321	0,104	0,067
3	[200]	0,332	0,229	0,232	0,181	0,059	0,053
	[110]	0,221	0,138	0,284	0,245	0,048	0,051
	[020]	0,001	0,003	0,000	0,001	0,008	0,003
	[101]	-	0,130	-	0,099	0,021	0,015
	[011]	-	0,000	-	0,000	0,001	0,001
4	[300]	0,128	0,088	0,088	0,069	0,022	0,019
	[210]	0,075	0,041	0,106	0,087	0,017	0,018
	[120]	0,001	0,002	0,000	0,001	0,003	0,002
$\sum_{n_2}^{\infty}$	$\varepsilon_{discr}^{(2)}$	4,128	3,849	3,648	3,747	1,002	0,906
	ε_{discr}	251,075	105,085	219,049	94,888	1,560	0,261

Таблица 5

Вклад $-\varepsilon_{discr}^{(2)} [n_2 m] = -\sum_{n_2} \varepsilon_{TV}^{(2)} [n_1 n_2 m]$ от состояний $|j\rangle = |n_1 n_2 m\rangle$

$[n_2 m]$	ppμ		pdμ		ddμ	dtμ
	(00)	(10)	(00)	(10)	(11)	(11)
[00]	2,051	1,431	1,533	1,196	0,391	0,354
[10]	2,075	1,818	2,115	2,129	0,474	0,464
[01]	-	0,595	-	0,420	0,125	0,082
[20]	0,001	0,005	0,001	0,002	0,011	0,005
[11]	-	0,000	-	0,000	0,001	0,001
$\varepsilon_{discr}^{(2)}$	4,127	3,849	3,648	3,747	1,002	0,906

ку используемые функции $\chi_j(R)$ и $\chi_s(k,R)$ отличаются от функций, построенных по теории возмущений, уже во втором порядке по $(2M)^{-1}$.

В таблице 4 приведены вклады $-\varepsilon_{TV}^{(2)} [n_1 n_2 m]$ различных состояний $|j\rangle = |n_1 n_2 m\rangle$ дискретного спектра задачи двух центров в энергию связи $-\varepsilon_{TV}$. Из них видно, что приведенные значения с точностью $\sim 0,1$ эВ исчерпывают вклад состояний $|j\rangle$ дискретного спектра.

В таблицах 5 и 6 приведены величины

$$-\varepsilon_{discr}^{(2)} [n_2 m] = -\sum_{n_1} \varepsilon_{TV}^{(2)} [n_1 n_2 m],$$

$$-\varepsilon_{cont}^{(2)} [n_2 m] = -\int_0^{10} dk \varepsilon_{TV}^{(2)} [k n_2 m], \quad (28)$$

которые представляют собой вклад состояний $|j\rangle = |n_1 n_2 m\rangle$ и $|c\rangle = |k n_2 m\rangle$ дискретного и непрерывного спектров задачи двух центров при фиксированных наборах квантовых чисел $[n_2 m]$.

Таблица 6

Вклад $-\varepsilon_{cont}^{(2)} [n_2 m] = -\int_0^{10} dk \varepsilon_{TV}^{(2)} [k n_2 m]$ от состояний $|c\rangle = |k n_2 m\rangle$

$[n_2 m]$	ppμ		pdμ		ddμ	dtμ
	(00)	(10)	(00)	(10)	(11)	(11)
[00]	0,892	0,519	0,831	0,598	0,120	0,117
[10]	0,407	0,229	1,085	0,834	0,092	0,122
[01]	-	0,694	-	0,500	0,057	0,046
[20]	0,172	0,191	0,261	0,301	0,043	0,061
[11]	-	0,065	-	0,043	0,025	0,014
[30]	0,017	0,025	0,032	0,045	0,012	0,014
$\varepsilon_{cont}^{(2)}$	1,488	1,723	2,209	2,321	0,349	0,374

Составляющие $-\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(0)}$ и $-\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n_1 n_2 m]$ энергии связи $-\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}$ от различных состояний $|j\rangle = |n_1 n_2 m\rangle$ дискретного спектра^{x)}

$[n_2 m]$	$d \mu / \mu \quad (\mathcal{J}=1, \nu=1)$				$d t \mu \quad (\mathcal{J}=1, \nu=1)$			
	[0]	[1]	[2]	[3]	[0]	[1]	[2]	[3]
$[00]$	0,558	0,310	0,059	0,022	0,391	0,282	0,053	0,019
$[10]$	0,409	0,048	0,017		0,474	0,051	0,018	
$[01]$	0,104	0,021			0,125	0,015		
$[20]$	0,008	0,003			0,011	0,002		
$[11]$	0,001				0,001			
$\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [M_2]$	0,522	0,382	0,076	0,022	1,002	0,350	0,071	0,019
					$\varepsilon_{disc}^{(2)}$			$\varepsilon_{disc}^{(2)}$

x) Значение $\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(0)} = \varepsilon_{\mathcal{J}\nu} [000]$,

$$\varepsilon_{disc}^{(2)} [n_2 m] = \sum_{n_1} \varepsilon_{disc}^{(2)} [n_1 n_2 m],$$

$$\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [M_2] = \sum_{n_2, m} \varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n_2 n_2 m],$$

$$\varepsilon_{disc}^{(2)} = \sum_{n_2} \varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n_2] = \sum_{n_2, m} \varepsilon_{disc}^{(2)} [n_2 m].$$

На рис. 2 представлены также функции $\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [k n_2 m]$, соответствующие уровню ($\mathcal{J}=1, \nu=1$) мезомолекулы $d t \mu$. Легко видеть, что существенный вклад в $\varepsilon_{cont}^{(2)}$ вносит лишь область значений $0 \leq k \leq 3$.

В таблице 7 для состояний ($\mathcal{J}=1, \nu=1$) мезомолекул $d \mu$ и $d t \mu$ кроме величин $-\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n_1 n_2 m]$, $-\varepsilon_{disc}^{(2)} [n_2 m]$ представлены также величины

$$\begin{aligned} -\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n_1] &= -\sum_{n_2, m} \varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n_1 n_2 m], \\ -\varepsilon_{disc}^{(2)} &= -\sum_{n_2} \varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n_2]. \end{aligned} \quad (29)$$

На рис. 3 для состояния ($\mathcal{J}=1, \nu=1$) мезомолекулы представлены величины $-\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n_1]$, а также функции

$$-\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} (k) = -\sum_{n_2, m} \varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [k n_2 m], \quad (30)$$

показывающие вклад состояний $|j\rangle$ и $|ks\rangle$ в энергию связи $-\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}(d t \mu)$.

В таблице 8 приведены вклады $-\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n]$ от замкнутых оболочек $n = n_1 + n_2 + m + 1$ дискретного спектра задачи двух центров:

$$\begin{aligned} -\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n] &= -\sum_{n_1, n_2, m} \varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [n_1 n_2 m], \\ n_1 + n_2 + m + 1 &= n, \quad n \geq 2, \\ -\varepsilon_{\mathcal{J}\nu} [1] &= -\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(0)}. \end{aligned} \quad (31)$$

В таблице 9 представлены относительные вклады дискретного и непрерывного спектров задачи двух центров в $\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}$. Легко видеть, что для глубоких уровней определяющий вклад в $\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}$ вносит пара состояний $|j\rangle = |000g\rangle, |000u\rangle$, в то время как для слабосвязанных состояний необходимо учитывать вклады $\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [j]$ и $\varepsilon_{\mathcal{J}\nu}^{(2)} [ks]$ от возбужденных состояний $|j\rangle$ и $|ks\rangle$.

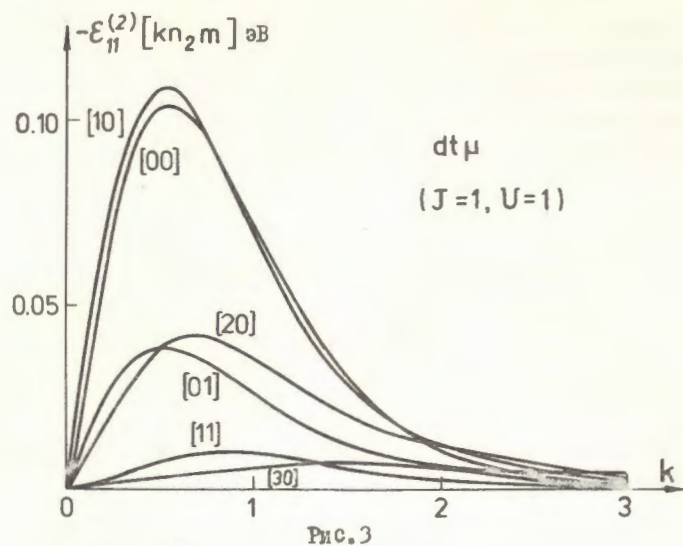


Таблица 8

$$\text{Вклад } -E_{discr}[n] = - \sum_{m=0}^n \sum_{n_2=0}^m \sum_{n_3=0}^{m-n_2} E_{J\nu} [n_2 n_3 m]$$

$$n_2 + n_3 + m + 1 = n$$

от различных оболочек n дискретного спектра в энергию связи мезомолекул

n	ppμ		pμμ		ddμ	dtμ
	(00)	(10)	(00)	(10)	(II)	(II)
1	246,947	101,236	215,401	91,141	0,558	-0,645
2	3,370	3,218	2,938	3,064	0,823	0,744
3	0,554	0,500	0,516	0,526	0,137	0,123
4	0,203	0,131	0,194	0,157	0,042	0,039
$E_{discr}^{(0)}$	4,127	3,849	3,648	3,747	1,002	0,906
E_{discr}	251,074	105,085	219,049	94,888	1,560	0,261

Таблица 9

Вклад состояний дискретного и непрерывного спектров задачи двух центров в энергию связи $-E_{J\nu}$ (эВ) мезомолекул

(Jν)	ppμ		pμμ		ddμ	dtμ
	(00)	(10)	(00)	(10)	(II)	(II)
$-E_{Ja}$	2528,52		2663,23		2711,27	
$-E_{J\nu}^{(0)}$	246,947	101,236	215,401	91,141	0,558 ^{x)}	-0,645 ^{x)}
$-E_{discr}^{(2)}$	4,127	3,849	3,604	3,747	1,002	0,906
$-E_{cont}^{(2)}$	1,488	1,723	2,199	2,321	0,349	0,374
$-E_{J\nu}^{(2)}$	5,615	5,572	5,803	6,068	1,351	1,280
$-E_{J\nu}^{(0)} - E_{J\nu}^{(2)}$	252,562	106,808	221,204	97,203	1,909	0,635
$-E_{J\nu}$	252,954	106,982	221,543	97,399	1,907	0,636

^{x)} Значения получены по формуле (24). В двухуровневом приближении системы (14) вместо приведенных значений получим

$$E_{J1}^{(0)}(dd\mu) = -0,640 \text{ эВ и } E_{J1}^{(0)}(dt\mu) = 0,474 \text{ эВ.}$$

Выводы

В данной работе показано, что разложение (10б) волновой функции $\Psi_{n\tau}(r, R)$ по адиабатическому базису сходится достаточно быстро и может быть с успехом использовано для точного вычисления уровней энергии μ -мезомолекул.

В отличие от предыдущих работ авторов^{2-3/}, в которых для решения задачи (22) используется теория возмущений, результаты данной работы не зависят от величины параметра малости $(2M)^{-1}$, естественно возникающего в адиабатическом методе^{4-7/}.

Анализ полученных результатов позволяет заключить, что достигнута в данной работе относительная точность $\Delta E/E$ вычислений уровней энергии μ -мезомолекул ($\sim 10^{-3}$ для глубоких уровней и $\sim 10^{-2}$ для слабосвязанных уровней) может быть улучше-

на при расширении системы уравнений (22), а также при более рациональном выборе значений R_m , k_m , ΔR и Δk .

Абсолютная точность вычисления энергии глубоких уровней $\sim 0,1$ эВ, достигнутая в данной работе, как следует из анализа таблиц 4-8, может быть также улучшена при расширении системы уравнений (22). Абсолютная точность вычисления энергий слабосвязанных состояний мезомолекул несколько выше и составляет $\sim 0,05$ эВ.

Слабосвязанные состояния ($J=I$, $v=I$) мезомолекул $d\mu$ и $dt\mu$ были впервые обнаружены в работах^{/16/} и ^{/12/} соответственно. Вычисленные в данной работе энергии ϵ_{Jv} этих состояний при выбранных значениях N_i , N_s , $N_k^{(s)}$, ΔR и Δk равны:

$$\epsilon_{II}(d\mu) = -1,91 \text{ эВ}, \quad \epsilon_{II}(dt\mu) = -0,64 \text{ эВ}.$$

Ввиду важности полученного результата для описания процесса μ -катализа в смеси дейтерия и трития^{/25/}, было бы весьма желательно вычислить энергии этих состояний каким-либо другим способом, например: используя различные вариационные методы^{/8, 9, 26/}, разлагая решения $\Psi_{Jv}(r, R)$ по двухцентровым функциям штурмовского типа чисто дискретного спектра^{/27/}, решая соответствующие уравнения Фаддеева в координатном пространстве^{/28/} либо же непосредственно решая задачу на собственные значения для функции $F_{Jv}^{(s)}(\xi, \zeta, R)$ в трехмерном пространстве (ξ, ζ, R) ^{/29/}.

Авторы признательны С.С.Герштейну, Ю.Н.Демкову, М.Касчиеву, И.В.Комарову, С.Ю.Славянову и М.П.Фейфману за многочисленные обсуждения на различных этапах работы.

Л и т е р а т у р а

1. Быстрицкий В.Н., Желепов В.П., Ершова Э.В., Эмнов В.Г., Капышев В.К., Мухамет-Галеева С.М., Надеждин В.С., Ривкис Л.А., Руденко А.И., Сатаров В.И., Сергеева Н.В., Сомов Л.Н., Столупин В.А., Фильченков В.В., Сообщение ОИЯИ, ДИ-12696, Дубна, 1979.

2. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Фейфман М.П., ЖЭТФ, 1978, 74, с. 849.
3. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., ЖЭТФ, 1977, 72, с. 1670.
4. Born M. *Gött.Nachricht*, 1951, 1;
Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., ЯФ, 1974, 20, с. 576;
Ponomarev L.I., Vinitsky S.I., *J. Phys.*, 1979, B12, p. 5;
ОИЯИ, Р4-12018, Дубна, 1979.
5. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., "Наука", 1976.
6. Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., ЖЭТФ, 1973, 65, с. 28;
Ponomarev L.I., Puzynin I.V. and Puzynina T.P., *J. Comput. Phys.*, 1973, 13, p. 1.
7. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. Сообщение ОИЯИ, Р4-10336, Дубна, 1976.
8. Carter V.P., *Phys. Rev.*, 1966, 141, p. 863;
Carter V.P., *Phys. Rev.*, 1968, 165, p. 139.
9. Halpern A., *Phys. Rev. Lett.*, 1964, 13, p. 660.
10. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ЖВММФ, 1968, 8, 1256,
Препринт ОИЯИ Р4-5040, Дубна, 1970.
11. Трускова Н.Ф. Сообщение ОИЯИ РII-10207, 1976;
Сообщение ОИЯИ РII-11218, 1978.
12. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F., *J. Phys.*, 1978, B11, p. 3861.
13. Ponomarev L.I. and Somov L.N., *J. Comput. Phys.*, 1976, 20, p. 183.
14. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N., *J. Phys.*, 1977, B10, p. 1335.
15. Пономарев Л.И., Славянов С.Ю., Сомов Л.Н., ОИЯИ, Р4-13028, Дубна, 1980.
16. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В., 1973, ЭЧАЯ, т. 4, с. 127.
17. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Сообщение ОИЯИ, Р5-12788, Дубна, 1979.
18. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Сообщение ОИЯИ, Р5-12787, Дубна, 1979.
19. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. Сообщение ОИЯИ, Р5-12789, Дубна, 1979.

20. Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н.
Сообщение ОИЯИ Р5-12790, Дубна, 1979.
21. Faifman M.P., Ponomarev L.I., Vinitzky S.I.,
J. Phys., 1976, В9, p. 2255 ;
Абрамов Д.И., Славянов С.Ю., Сомов Л.Н., ОИЯИ, Р4-12327,
Дубна, 1979.
22. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., Наука, 1977.
23. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего
анализа. М., Л., ГИТТИ, 1952.
24. Cohen E.R., Taylor B.N., J. Phys. and Chem. Ref. Data,
1973, 2, p. 663.
25. Gerstein S.S. and Ponomarev L.I., Phys. Lett., 72B, 80,
1977.
26. Pekiris C.L. Phys. Rev. 1956, 112, p. 1649;
Phys. Rev. 1959, 115, p. 1217.
27. Шерстюк А.И. Оптика и спектроскопия, 1975, 38, с. 1040.
28. Merkuriev S.P., Gignoux C. and Laverne A.,
Ann. Phys., 1976, 99, 30;
Меркурьев С.П., Позднеев С.А., ЯФ, 1979, 30, с. 941.
29. Bassett I.M., Lederev B.R.E. and Vorlicek G.C.
J. Comput. Phys., 1976, 22, p. 74.

Рукопись поступила в издательский отдел

27 декабря 1979 года.