ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 6256

Л.И. Пономарев, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина

ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ МЕЗОМОЛЕКУЛ С ПОМОЩЬЮ НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА МЕТОДА НЬЮТОНА

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ И АВТОМАТИЗАЦИИ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1972

P4 - 6256

Л.И. Пономарев, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина

ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ МЕЗОМОЛЕКУЛ С ПОМОЩЬЮ НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА МЕТОДА НЬЮТОНА

Направлено в "J. Comput. Phys."

Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. P4-6256

Вычисление уровней энергии мезомолекул с помощью непрерывного аналога метода Ньютона

На основе непрерывного аналога метода Ньютона в работе развит метод численного решения задачи Штурма-Лиувилля, обладающий рядом преимуществ по сравнению с известными. Метод использован для вычисления энергий связи мезомолекул $pp\mu$, $dd\mu$, $tt\mu$.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна, 1972

Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. P4-6256

Calculation of the Energy Levels of Mesic Molecules by the Continuous Analog of the Newton Method

The method of numerical solution of the Sturm-Liouville problem, having a number of advantages as compared with the known methods, was developed basing on the continuous analog of the Newton method. The method is used in solving the coupling energies of mesic molecules: $pp\mu$, $dd\mu$, $tt\mu$.

Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1972

Вычислению энергий связи мезомолекул посвящено довольно много работ, которые можно разделить на две группы: вариационные расчёты /1/ и адиабатические /2/. Вариационные методы расчёта, по-видимому, предпочтительнее для вычисления энергий основного состояния мезомолекул. Преимущества адиабатических расчётов состоят в их наглядности и единоообразии вычислений как в случае основного, так и в случае возбужденных состояний.

В настоящей работе вычисляются энергии всех колебательных состояний мезомолекул $pp\mu$, $dd\mu$ и $tt\mu$ с учётом адиабатических поправок на движение ядер. При этом разработан метод численного решения задач на собственные значения, обладающий рядом преимуществ по сравнению с известными до сих пор.

Постановка задачи

Задача вычисления уровней энергии мезомолекул - частный случай задачи трех тел, взаимодействующих по закону Кулона. В случае мезомолекул с равными ядрами $M_1 = M_2$ ($pp\mu$, $dd\mu$ и $tt\mu$) ее решение в адиабатическом приближении сводится к нахождению собственных значений $E_{L\nu}$ уравнения Шредингера /2/

$$\frac{d^2\chi_{L\nu}}{dR^2} + 2M\left[E_{L\nu} - (E_g(R) - E_g(\infty)) - \frac{1}{R} - \frac{L(L+1)}{2MR^2} - \right. \tag{1}$$

$$\left. - \frac{1}{2M}(K_{gg}(R) - K_{gg}(\infty))\right]\chi_{L\nu} = 0,$$

где

$$2M = \frac{2M_1 + \mu}{2\mu},$$

M_1, μ – массы ядер и μ-мезона соответственно, $E_g(R)$ – симметричный терм задачи двух центров /3,4/, $K_{gg}(R)$ – диагональный матричный элемент от оператора ядерного движения по волновым функциям симметричного состояния задачи двух центров /5/. Графики функций $W_g(R) = E_g(R) + \frac{1}{R}$ и $K_{gg}(R)$ изображены на рис. 1.

После введения обозначений

$$y(R) = \chi_{L\nu}(R),$$

$$q(R) = -2M\left[E_g(R) - E_g(\infty) + \frac{1}{R} + \frac{L(L+1)}{2MR^2} + \frac{1}{2M}(K_{gg}(R) - K_{gg}(\infty))\right], \tag{2}$$

$$\lambda = -2ME_{L\nu},$$

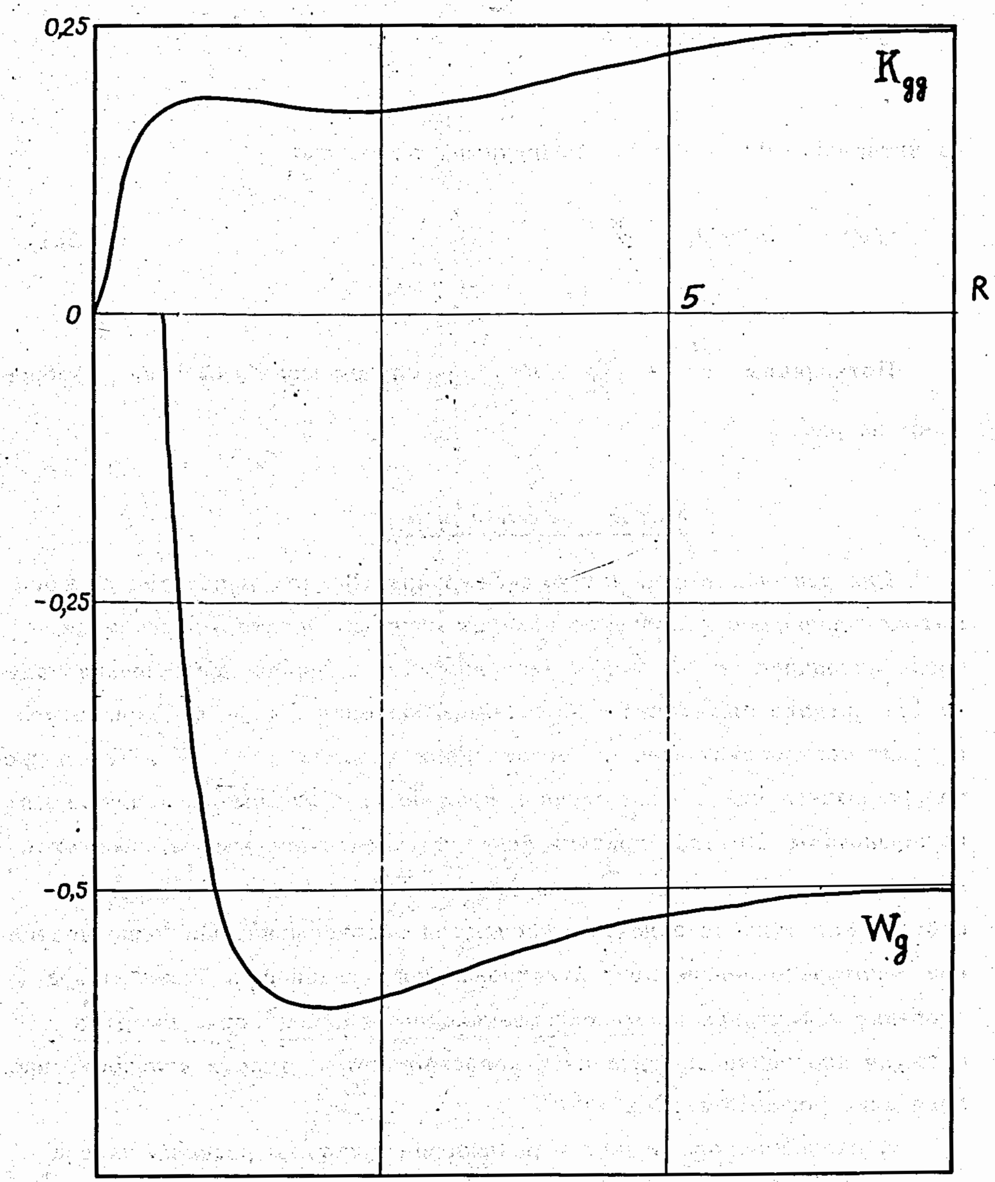

Рис. 1.

уравнение (1) принимает стандартный вид задачи Штурма–Лиувилля

$$\frac{d^2 y}{d x^2} + [q(x) - \lambda] y = 0 \tag{3а}$$

на интервале $0 \leq x < \infty$ с граничными условиями

$$y(0) = y(\infty) = 0. \tag{3в}$$

Потенциалы $V^L(R) = -\frac{1}{2M} q(R)$ для случая молекулы $dd\mu$ изображены на рис. 2.

Метод решения задачи

Для решения задачи Штурма–Лиувилля (3) не существует единого метода, одинаково пригодного во всех случаях. Задача усложняется, когда потенциал $q(x)$ задан численно. Как правило, при решении задачи (3) вначале вычисляют собственные значения λ и лишь после этого находят соответствующие им собственные функции $y(x)$ /6/. Такая процедура вычислений в ряде случаев приводит к большим вычислительным погрешностям. По этой причине более предпочтительными оказываются алгоритмы, в которых собственное значение и соответствующая ему собственная функция задачи вычисляются одновременно как одно неизвестное некоторого нелинейного функционального уравнения. Такой метод особенно эффективен во многих физических задачах, когда имеется большая априорная информация о качественном и отчасти количественном поведении решений задачи (3).

В данной работе развит и реализован алгоритм решения задачи Штурма–Лиувилля на основе непрерывного аналога метода Ньютона /7/.

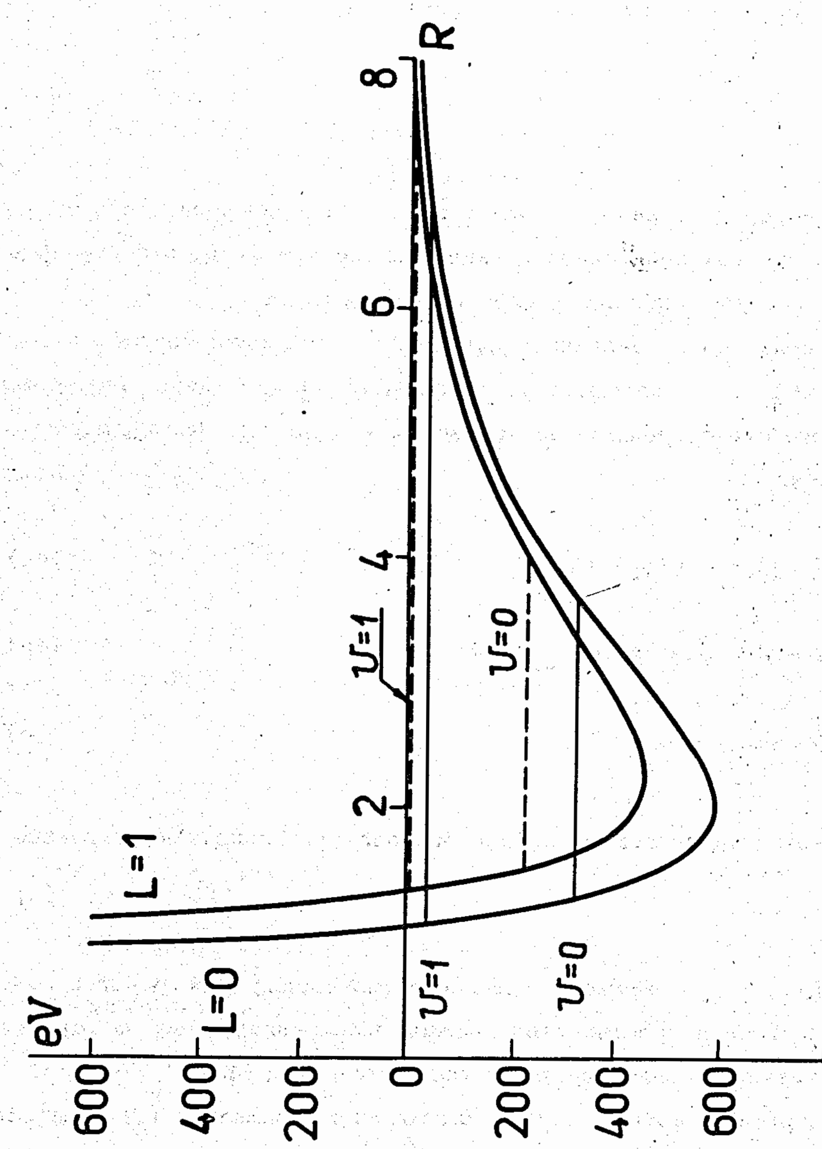

Рис. 2.

В излагаемом подходе краевая задача (3) согласно работам [8] доопределяется добавлением условия нормировки

$$I(y) = \int_0^\infty y^2(x)\,dx - 1 = 0\,, \tag{3c}$$

с учетом которого уравнение (3а) с краевыми условиями (3в) можно рассматривать как нелинейное функциональное уравнение относительно пары: собственное значение - собственная функция.

При конкретной реализации алгоритма вычислений полубесконечный интервал $0 \le x < \infty$ заменяется отрезком $[0, l]$, после чего уравнение (3а) вместе с граничными условиями и условием нормировки приобретает вид

$$y'' + [q(x) - \lambda]\,y = 0, \tag{4а}$$

$$y(0) = 0, \quad \phi(y, y', \lambda)\big|_{x=l} = 0, \tag{4в}$$

$$\int_0^l y^2(x)\,dx - 1 = 0. \tag{4с}$$

В этом виде решаемая задача эквивалентна нелинейному уравнению

$$\Phi(z) = 0, \tag{5}$$

где $z = [\lambda, y(x)]$ - элемент прямого произведения пространства действительных чисел и пространства дважды дифференцируемых на отрезке $[0, l]$ функций, удовлетворяющих условиям (4в) и (4с).

Непрерывный аналог метода Ньютона для уравнения (5) предполагает существование решения уравнения [9,10]

$$\frac{dz}{dt} = -[\Phi'(z)]^{-1}\,\Phi(z), \tag{6}$$

$$z(0) = z_0, \quad 0 \le t < \infty,$$

где z_0 - начальное приближение задачи, взятое из близкой окрестности $z^* = [\lambda^*, y^*(x)]$ решения задачи (3) в предположении, что оно существует, а t - некий параметр, от которого зависят искомые величины задачи, и обладающий тем свойством, что при $t \to \infty$ $z \to z^*$.

Считая данные утверждения для рассматриваемой задачи предметом отдельного исследования, остановимся только на описании вычислительной схемы, реализующей изложенный принцип.

Определим параметр t и функции $\lambda(t)$, $y(x,t)$, $\mu(t)$, $v(x,t)$ соотношениями:

$$v'' + [q(x) - \lambda]\,v = -[y'' + (q(x) - \mu)\,y], \tag{7а}$$

$$v(0) = 0, \quad \frac{d}{dt}\,\phi(y, y', \lambda)\big|_{x=l} = -\phi(y, y', \lambda)\big|_{x=l}\,, \tag{7в}$$

$$\int_0^l y(x,t)\,v(x,t)\,dx = -\frac{1}{2}\Big[\int_0^l y^2(x,t)\,dx - 1\Big]; \tag{7с}$$

$$v(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}\,y(x,t), \tag{7д}$$

$$\mu(t) = \lambda(t) + \frac{d}{dt}\lambda(t)$$

с начальным условием из близкой окрестности решения z^*:

$$y(x, 0) = y_0(x), \quad \lambda(0) = \lambda_0. \tag{8}$$

Алгоритм Эйлера решения задачи (7) позволяет осуществить дискретизацию переменной t_k с шагом τ. Полагая $\gamma_k(x) = \gamma(x, t_k)$ и $\lambda_k = \lambda(t_k)$, выражения (7д) можно заменить их разностными аналогами

$$t_{k+1} = t_k + \tau_k ,$$

$$\gamma_{k+1}(x) = \gamma_k(x) + \tau_k v_k(x), \tag{9}$$

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + \tau_k(\mu_k - \lambda_k).$$

В предположении, что функции $\gamma_k(x)$ и λ_k известны, решение задачи (7) сводится к решению краевой задачи относительно функции $v_k(x)$ на отрезке $[0, l]$

$$v_k'' + [q(x) - \lambda_k]v_k = -[\gamma_k'' + (q(x) - \mu_k)\gamma_k] , \tag{10а}$$

$$v_k(0) = 0, \quad \frac{\partial\phi_k}{\partial\gamma} v_k + \frac{\partial\phi_k}{\partial\gamma'} v_k' = -\phi_k + (\lambda_k - \mu_k)\frac{\partial\phi_k}{\partial\lambda}\Big|_{x=l} . \tag{10в}$$

Решение задачи (10) является однопараметрическим (по параметру μ_k) семейством функций, которое может быть представлено в виде:

$$v_k(x,\mu) = v_{1k}(x) + v_{2k}(x)\mu_k , \tag{11}$$

где функции $v_{ak}(x)$ (a =1, 2; k = 0, 1, 2, . . .) являются решениями задачи

$$v_{ak}'' + [q(x) - \lambda_k] v_{ak} = P_{ak}(x) , \tag{12а}$$

$$v_{ak}(0) = 0, \quad \frac{\partial\phi_k}{\partial\gamma} v_{ak} + \frac{\partial\phi_k}{\partial\gamma'} v_{ak}' = a_{ak} \Big|_{x=l} , \tag{12в}$$

$$P_{1k}(x) = -[\gamma_k''(x) + q(x)\gamma_k(x)] ,$$

$$P_{2k}(x) = \gamma_k(x) ,$$

(13)

$$a_{1k} = -\phi(\lambda_k, \gamma_k, \gamma_k') - \lambda_k a_{2k}\Big|_{x=l}$$

$$a_{2k} = -\frac{\partial}{\partial\lambda}\phi(\lambda_k, \gamma_k, \gamma_k')\Big|_{x=l} .$$

Вычислив функции $v_{ak}(x)$ (например, с помощью алгоритмов прогонки /11/), значение параметра μ_k определяем из условия:

$$\int_0^l \gamma_k(x) v_k(x, \mu_k) dx = -\frac{1}{2}\Big[\int_0^l \gamma_k^2(x) dx - 1\Big] , \tag{14}$$

откуда

$$\mu_k = \Big(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\int_0^l \gamma_k^2 dx - \int_0^l \gamma_k v_{1k} dx\Big)\Big(\int_0^l \gamma_k v_{2k} dx\Big)^{-1} . \tag{15}$$

Значения $t = t_{k+1}$, λ_{k+1} и $\chi_{k+1}(x)$ определяются из соотношений (9), и тем самым процесс вычисления λ_k и $y_k(x)$ для $k = 1, 2, \ldots$ полностью определен. На практике /10/ наилучшая сходимость метода достигнута при выборе величин r_k пропорциональными отношению δ_k / δ_{k-1} невязок уравнений (4) при подстановке в него приближений $z_k = [\lambda_k, y_k(x)]$ и $z_{k-1} = [\lambda_{k-1}, y_{k-1}(x)]$. Признаком окончания процесса вычисления λ и $y(x)$ является малость величины невязки уравнения (4а) при подстановке в него найденных значений λ_k и $y_k(x)$. По величине этой невязки можно косвенно оценить точность вычисления λ. При этом следует иметь в виду оценки работы /12/.

Изложенный подход обобщается на другие задачи, в частности, на связанную систему дифференциальных уравнений.

Учёт физических особенностей задачи

Изложенный алгоритм может быть реализован только на конечном интервале $[0, l]$ изменения независимой переменной x, в то время как исходная физическая задача определена на полубесконечном интервале $[0, \infty)$. Однако знание конкретных особенностей решаемой задачи позволяет корректно учесть это различие.

При $R \gg 1$ имеет место асимптотическое разложение /13/

$$E_g(R) - E_g(\infty) + \frac{1}{R} = -\frac{9}{4} R^{-4} - \frac{15}{2} R^{-6} - \frac{213}{4} R^{-7} - \frac{7755}{64} R^{-8} - 2Re^{-(R+1)} \left(1 + \frac{1}{2} R^{-1} - \frac{25}{8} R^{-2} - \frac{131}{48} R^{-3}\right). \tag{16}$$

При достаточно больших R можно пренебречь экспоненциально малым членом и в соответствии с этим выражения для потенциала $q(x)$ и решения $y(x)$ в асимптотической области $x \gg 1$ примут вид:

$$q(x) = 2M \sum_{s=2}^{N} b_s x^{-s}, \qquad \tilde{y}(x) = C \exp\{-\sqrt{\lambda}\, x\} \sum_{n=0}^{N} a_n x^{-n}, \tag{17}$$

$$a_0 = 1, \quad a_{n+1} = \frac{1}{2\sqrt{\lambda}} \left(\frac{\alpha_n}{n+1} - n a_n \right), \tag{18}$$

$$\alpha_n = 2M \sum_{s=0}^{n} a_s b_{n+2-s}.$$

Граничное условие (4в) и условие нормировки (4с) видоизменяются следующим образом:

$$\frac{y'}{y}\Big|_{x=l} = -\left(\sqrt{\lambda} + \frac{\sum\limits_{n=0} n a_n l^{-(n+1)}}{\sum\limits_{n=0} a_n l^{-n}}\right), \tag{19в}$$

$$\int_0^l y^2(x)\,dx + \Delta l - 1 = 0 \qquad \Delta l = \int_l^\infty \tilde{y}^2(x)\,dx. \tag{19с}$$

Поправку Δl можно найти численным интегрированием, используя аналитическое представление (17) для функции $\tilde{y}(x)$ в асимптотической области. Другие необходимые изменения в формулах (7с), (14) и (15) очевидны и легко осуществляются с учетом равенства

$$\tilde{v}_k(x,\lambda) = \frac{d\tilde{y}_k}{d\lambda}(\mu_k - \lambda_k). \qquad (20)$$

Обсуждение результатов вычислений

В таблицах $II-V$ приведены результаты вычислений энергии связи $\epsilon_{L v} = |E_{L v}|$ мезомолекул $pp\mu$, $dd\mu$ и $tt\mu$ во всех известных для них колебательных квантовых состояниях[x]. При заданном орбитальном моменте L уровни нумеруются колебательным квантовым числом v.

Для молекулы $pp\mu$ возможны два связанных состояния: $L=0$, $v=0$ и $L=1$, $v=0$. Для молекулы $dd\mu$ – четыре:два ($v=0$ и $v=1$) в состоянии с $L=0$ и два ($v=0$ и $v=1$) в состоянии с $L=1$. Для молекулы $tt\mu$ возможны шесть квантовых состояний: по два уровня ($v=0$ и $v=1$) в состояниях с орбитальными моментами $L=0$ и $L=1$ и по одному ($v=0$) в состояниях с $L=2$ и $L=3$.

Как следует из таблиц $II-V$, выполненные нами расчёты достаточно хорошо согласуются с последними вариационными вычислениями во всех случаях, где последние проведены.

Особо следует отметить вычисление энергии связи мезомолекулы $dd\mu$ в состоянии $L=1$, $v=1$. Существование этого уровня предполагалось уже в работах Беляева и др., Зельдовича и Герштейна[/2/] и недавно было доказано в работе[/14/]. Вычисленное значение $\epsilon_{11} \approx 2$ эв хорошо согласуется с тем, которое необходимо для объяснения экспериментов по измерению вероятности образования молекул $dd\mu$[/15/]. Графики волновых функций χ_{Lv} для состояний $L=1$, $v=0$ и $L=1$, $v=1$ молекулы $dd\mu$ приведены на рис. 3.

[x] Энергии связи мезомолекул приведены в эв. Коэффициент перехода β от значения λ в единицах задачи к значению $\epsilon_{L v}$ (эв) равен:

$$\beta = 4M_1\left(\frac{\mu}{2M_1+\mu}\right)^2 \cdot 27{,}21165; \quad \epsilon_{L v}\,(\text{эв}) = \beta\lambda$$

Значения масс M_1 и μ приведены в таблице I.

Оценка точности полученных результатов

Адиабатические расчёты содержат погрешность, связанную с приближенным определением потенциала $V(R)$. В данной работе учтены адиабатические поправки первого порядка $\frac{1}{2M}K_{gg}(R)$ к потенциалу $W_g(R)$, которые учитывают относительное движение ядер в мезомолекулах[x]. Как следует из сравнения с последними вариационными расчётами, относительная точность проведенных вычислений $\approx 10^{-3}$.

Для оценки вычислительных погрешностей исследована зависимость величины λ от шага Δx разностной схемы, от длины интервала l задачи Штурма–Лиувилля и от вида граничных условий (19в). Оптимальный результат, обеспечивающий относительную точность $\epsilon \approx 10^{-3}$, достигается при значениях Δx =0,0125, l =20, и N =6 в разложениях (17).

Как показывает опыт вычислений, величина невязки δ уравнения (3) при подстановке в него вычисленных значений λ и $y(x)$ по порядку величины равна абсолютной погрешности вычисления собственных значений λ.

Для контроля точности метода задача Штурма–Лиувилля (3) была решена для случая потенциала Морзе[/17/]

$$q(x) = -2MD\left[e^{-2a(x-x_0)} - 2e^{-a(x-x_0)}\right], \qquad (21)$$

[x] Поправки $\approx (2M)^{-2}$ к потенциалу $W_g(R)$ можно учесть, например, методом, предложенным в[/16/].

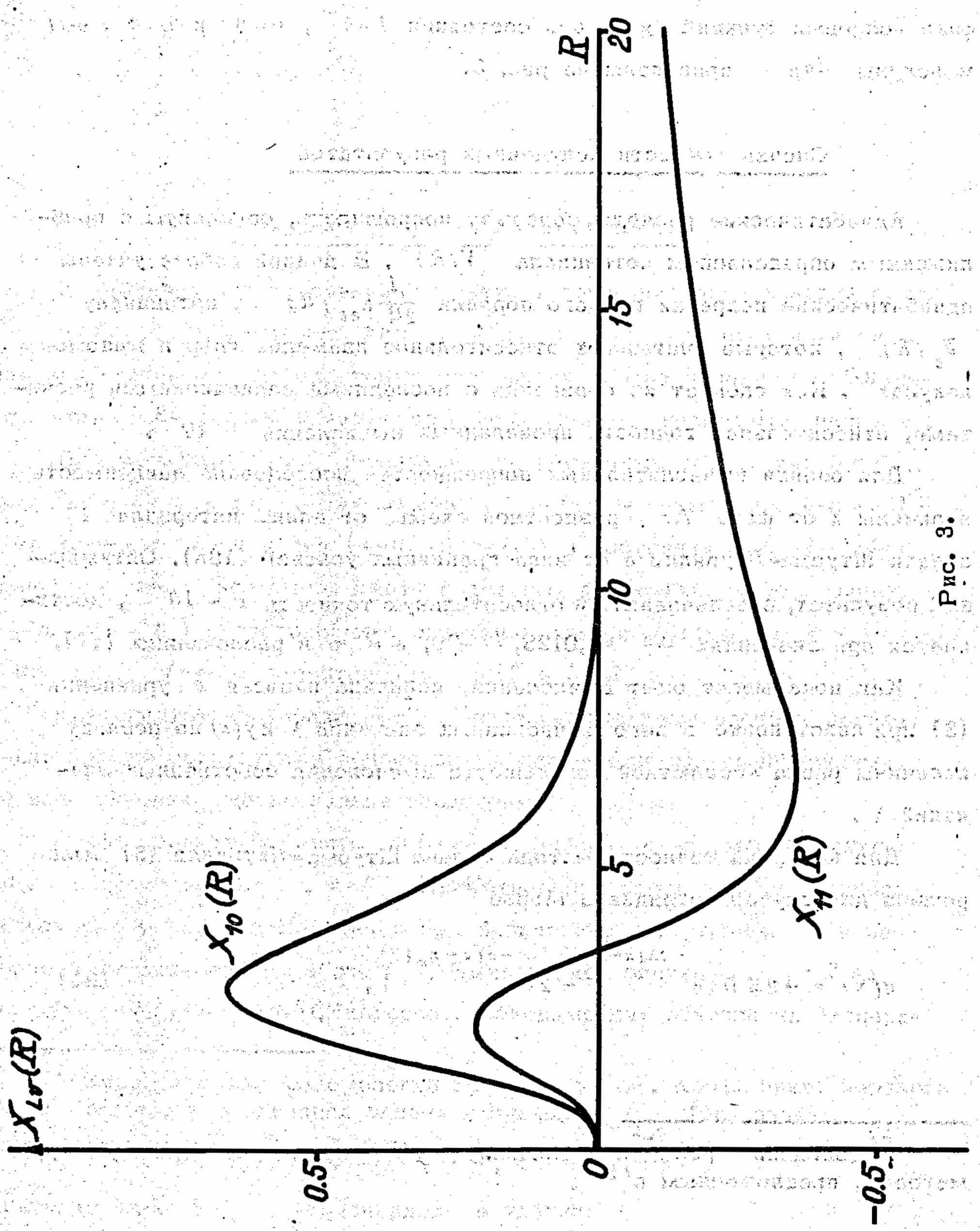

Рис. 3.

для которого известно аналитическое решение задачи (3):

$$\lambda = 2MD\left[1 - \frac{a}{\sqrt{2MD}}\left(v + \frac{1}{2}\right)\right]^2 . \tag{22}$$

При значениях параметров a =0,67; x_0 =2,15; D =0,106 форма потенциала (21) весьма близка к форме потенциала $q(x)$ для случая молекулы $pp\mu$ в состоянии с орбитальным моментом L =0. Значение λ =0,4353, найденное по формуле (22) для основного состояния $(v = 0)$, оказалось в хорошем согласии с вычисленным λ =0,4348 из уравнений (4) при величине невязки δ =5·10^{-4}.

Литература

1. W.Kolos, C.C.J.Roothaan and R.A.Sack, Rev.Mod.Phys. 32, 178 (1960).
S.Flugge and V.Schröder, Z.Phys. 162, 28 (1961).
A.Fröman and J.L.Kinsey, Phys.Rev. 123, 2077 (1961).
U.Schröder, Z.Phys. 173, 432 (1963).
A.Halpern, Phys.Rev. 135A, 34 (1964).
W.R.Wessel and P.Phillipson, Phys.Rev.Lett.13,23 (1964).
S.W.Scherr and M.Machacek, Phys.Rev. 138A,371 (1965).
P.K.Kabir, Phys.Lett. 14,257 (1965).
B.P.Carter. Phys.Rev. 141,863 (1966), Erartum Phys.Rev. 153,1358 (1967); Phys.Rev. 165, 139 (1968); 173, 55 (1968). L.M.Delves and T.Kolotas, Austral. J.Phys. 21, 1 (1968).

2. R.C.Cohen,D.L.Judd and R.J.Riddel,Phys.Rev. 110,1471, (1958),Phys.Rev.119,384 (1960).
H.Marshall and T.Schmidt, Z.Phys. 150, 293 (1957).
В.Б. Беляев, С.С. Герштейн, Б.Н. Захарьев, С.П. Ломнев. ЖЭТФ, 37, 1652 (1959). Я.Б. Зельдович, С.С. Герштейн. УФН, 71, 581 (1960).
Y.Mizuno, J.Phys.Soc.Japan, 16, 1043 (1961).
H.Narumi and S.Matsuo, Progr.Theor.Phys. 25, 290 (1961).
C.Joachain and N.Wantiez, Bull.Acad.Roy.Belgique, Cl.Sci. 48, 147 (1962).

3. D.R.Bates, R.H.G.Reid. in "Advances in Atomic and molecular Physics", v.IV, Academic Press, New York and London 1969.

4. T.M.Peek, J.Chem.Phys. 43, 3004 (1965), Sandia Corporation Report, No. Sc-RR-65-77 (1965).

5. G.Hunter, B.F.Gray, H.O.Prichard, J.Chem.Phys. 45, 3806 (1966); 46, 2146 (1967). Л.И. Пономарев, Т.П. Пузынина. Препринт ОИЯИ Р4-5040, Дубна, 1970.

6. Г.И. Марчук, В.Е. Колесов. Применение численных методов для расчёта нейтронных сечений, Атомиздат, Москва, 1970.

7. М.К. Гавурин, Известия высших учебных заведений, Математика, 5, 18 (1958).

8. Л.В. Канторович. УМН, 11, 99 (1956). Н.Н. Калиткин, ЖВМ и МФ, 5, 1107 (1965).

9. Е.П. Жидков, И.В. Пузынин, ЖВМ и МФ, 7, 1086 (1967).

10. И.В. Пузынин. Автореферат диссертации, 11-4735, Дубна, 1969.

11. С.К. Годунов, В.С. Рябенький. Введение в теорию разностных схем, Физматгиз, Москва, 1962.

12. А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. ЖВМ и МФ, 1, 784 (1961).

13. R.J.Damburg, R.Kh.Propin, Proc.Phys.Soc., ser.2, 1, 681 (1968). C.A.Coulson, Proc.Roy.Soc., A61, 20 (1941).

14. А.В. Матвеенко, Л.И. Пономарев, ЖЭТФ, 58, 1640 (1970).

15. Е.А. Весман. Письма ЖЭТФ, 5, 113 (1967). Препринты ОИЯИ, Р4-3256, Р4-3384, Дубна, 1967.

16. А.В. Матвеенко, Л.И. Пономарев. Препринт ОИЯИ, Р4-5608, Дубна, 1971.

17. А. Зоммерфельд. Строение атома и спектры, ГТТИ, Москва, 1956.

18. B.N.Taylor, W.H.Parker and D.N.Langenberg, Rev.Mod.Phys. 41, 375 (1969).

19. И.П. Селинов. Изотопы, т. III, Наука, Москва, 1970.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 февраля 1972 года.

Таблица I

Основные характеристики мезоатомов водорода

μ, M_1	Масса ядра в атомных единицах	Энергия мезоатомов ($эв$)
μ	206,769	—
p	1836,109	2528,52
d	3670,398	2663,23
t	5496,753	2711,27

м.а.е. энергии $E_\mu = 5626{,}53$ эв

м.а.е. длины $a_\mu = 2{,}55927 \cdot 10^{-11}$ см

Приведенные величины вычислены на основе данных Тэйлора и др. [18], а также Селинова [19].

Таблица II

Энергия связи (эв) мезомолекулы $pp\mu$

(вариационные расчеты)

Источник	$L=0$ $v=0$	$L=1$ $v=0$
Kolos et al. (1960)	249	—
Flugge and Schröder (1961)	2II	—
Fröman and Kinsey (I96I)	230	—
Sohröder (1963)	237	—
Halpern (1964)	—	I07,23
Wessel and Phillipson (1964)	254,3	—
Scherr and Machacek (1965)	—	I06,8
Kabir (1965)	254,4	—
Carter (1966)	252,2	—
Delves and Kolotas (1967)	253,I4	—
Carter (1968)	253	—

Таблица 3

Энергия связи (эв) мезомолекулы $pp\mu$
(адиабатические расчеты)

Источник	$L=0$ $v=0$	$L=1$ $v=0$
Cohen et al. (1958,1960)	241	93
Marschall and Sohmidt (1958)	224	75
Зельдович и Герштейн (1958)	252	106
Mizuno (1961)	241	70
Narumi and Matsuo (1961)	213	43
Joachim and Wanties (1962)	244	—
Данная работа	248	104

Таблица IУ

Энергия связи (эв) мезомолекулы $dd\mu$

Литература	$L=0$		$L=1$		$L=2$	Метод вычисления
	$v=0$	$v=1$	$v=0$	$v=1$	$v=0$	
Cohen et al. (1958,1960)	322	181	223	-	82	адиабатический
Marshall and Schmidt (1958)	300	-	220	-	25	-"-
Беляев и др. (1959), Зельдович и Герштейн (1960)	330	40	226	7(?)	88	-"-
Kolos et al. (1960)	318	—	—	—	—	вариационный
Fröman and Kinsey (1961)	306	—	—	—	—	-"-
Narumi and Matsuo (1961)	281	177	190	-	43	адиабатический

Таблица IУ (продолжение)

Mizuno (1961)	338	9	207	-	59	адиабатический
Joachim and Wantiez (1962)	328	—	—	—	—	-"-
Schröder (1963)	309	—	—	—	—	вариационный
Halpern (1964)	—	—	226,55	—	—	-"-
Scherr and Machacek (1965)	—	—	226,3	—	—	-"-
Carter (1966,1968)	324,2	32,7	—	—	—	-"-
Данная работа	323	32,9	226	2,0	87,9	адиабатический

Таблица У

Энергия связи (эв) мезомолекулы $tt\mu$

Источник	$L=0$		$L=1$		$L=2$	$L=3$	Метод вычисления
	$v=0$	$v=1$	$v=0$	$v=1$	$v=0$	$v=0$	
Беляев и др. (1959), Зельдович и Герштейн (1960)	367	86	288	45	170	–	адиабатический
Schröder (1963)	348	–	–	–	–	–	вариационный
Halpern (1964)	–	–	288,72	–	–	–	-"-
Scherr and Machacek (1965)	–	–	288,8.	–	–	–	-"-
Carter (1966)	361,2	75	–	–	–	–	-"-
Данная работа	361	81,3	288	44,1	174	52,7	адиабатический