

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



СЗУБ.36
П-563

26/1

P4 - 69

1126/2-73

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

ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ МЕЗОМОЛЕКУЛ
ВОДОРОДА С УЧЕТОМ АДИАБАТИЧЕСКИХ
ПОПРАВOK НА ДВИЖЕНИЕ ЯДЕР

1973

**ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

P4 - 6919

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

ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ МЕЗОМОЛЕКУЛ
ВОДОРОДА С УЧЕТОМ АДИАБАТИЧЕСКИХ
ПОПРАВOK НА ДВИЖЕНИЕ ЯДЕР

Направлено в ЖЭТФ

* Лаборатория вычислительной техники и автоматизации



Последние адиабатические расчеты энергий связи мезомолекул^{/2/} были выполнены в 1960-62 г.г., и в них адиабатические поправки на движение ядер либо вовсе не принимались во внимание, либо учитывались приближенно. За прошедшие годы необходимые поправки аккуратно вычислены в ряде работ^{/3, 4/}, что позволяет возвратиться к поставленной задаче на новом уровне.

В данной работе найдены энергии колебательных состояний мезомолекул изотопов водорода: $pp\mu$, $dd\mu$, $u\mu$, $pd\mu$, $pt\mu$, $dt\mu$ с точным учетом адиабатических поправок первого порядка. При этом в системе $dd\mu$ обнаружено новое состояние с очень малой энергией связи $\epsilon \approx 0,7 \text{ ev}$. Отмеченные результаты получены с помощью нового алгоритма решения задач на собственные значения, который изложен в предыдущей работе авторов^{/5/}.

Постановка задачи

С учетом адиабатических поправок первого порядка уровни энергии E мезомолекул находятся из системы уравнений^{/2, 6/}

$$-\frac{1}{2M} \frac{d^2 \chi_g}{dR^2} + \left[\frac{1}{R} + \frac{L(L+1)}{2MR^2} + E_g(R) + \frac{1}{2M} K_{gg}(R) \right] \chi_g +$$

$$+ \frac{1}{2M} [K_{gu}(R) - \frac{2}{R} Q_{gu}(R)] \chi_u + \frac{1}{M} Q_{gu}(R) \frac{d\chi_u}{dR} = E \chi_g,$$

$$-\frac{1}{2M} \frac{d^2 \chi_u}{dR^2} + \left[\frac{1}{R} + \frac{L(L+1)}{2MR^2} + E_u(R) + \frac{1}{2M} K_{uu}(R) \right] \chi_u +$$

$$+ \frac{1}{2M} [K_{ug}(R) - \frac{2}{R} Q_{ug}(R)] \chi_g + \frac{1}{M} Q_{ug}(R) \frac{d\chi_g}{dR} = E \chi_u.$$

Матричные элементы от операторов ядерного движения

$$K_{gu}(R) = \int d\vec{r} \phi_g(\vec{r}; R) (-\Delta_{\vec{R}}) \phi_u(\vec{r}; R)$$

$$Q_{gu}(R) = \frac{R}{R} \int d\vec{r} \phi_g(\vec{r}; R) (-\nabla_{\vec{R}}) \phi_u(\vec{r}; R) \quad /2/$$

вычислены по волновым функциям задачи двух центров, причем $\phi_g(\vec{r}; R)$ и $\phi_u(\vec{r}; R)$ - симметричное и антисимметричное решения задачи, а $E_g(R)$ и $E_u(R)$ - соответствующие этим решениям термы /7/, которые при $R \rightarrow \infty$ переходят в уровень $1s\sigma$ изолированного атома водорода. Уравнения /1/ записаны в системе $e = \hbar = m = 1$, где

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{M_3} + \frac{1}{M_1 + M_2}$$

$$\frac{1}{M} = m \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) = \frac{M_3 (M_1 + M_2)^2}{M_1 M_2 (M_1 + M_2 + M_3)} \quad /3/$$

M_3 - масса μ^- -мезона, M - приведенная масса ядер в единицах m , M_1 и M_2 - массы ядер изотопов водорода, причем без потери общности будем предполагать, что $M_1 \leq M_2$. При $R \rightarrow \infty$, когда система трех частиц распадается на мезоатом и ядро, внутреннее состояние мезоатомов с ядрами M_1 и M_2 соответственно описывают волновые функции /2/

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_g - \phi_u) \quad \text{и} \quad \phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_g + \phi_u). \quad /4/$$

Преобразование /4/ порождает аналогичное преобразование функций χ_g и χ_u , описывающих относительное движение ядер, и соответствующее ему преобразование матричных элементов /2/ /6/. С учетом равенств

$$K_{gu}(R) = H_{gu}(R) + \frac{2Q_{gu}(R)}{R} + \frac{dQ_{gu}(R)}{dR}$$

$$H_{gu}(R) = H_{ug}(R) = \int d\vec{r} \nabla_{\vec{R}} \phi_g(\vec{r}; R) \nabla_{\vec{R}} \phi_u(\vec{r}; R) \quad /5/$$

$$Q_{gu}(R) = -Q_{ug}(R); \quad Q_{gg}(R) = Q_{uu}(R) \equiv 0$$

преобразование /4/ приводит к следующей системе уравнений для функций χ_1 и χ_2 :

$$\chi_i'' - 2M[\epsilon_i + V_i(R) - V_i(\infty)] \chi_i = V_{ij}(R) \chi_j + 2Q_{ij}(R) \chi_j', \quad /6/$$

где $\epsilon_i = V_i(\infty) - E$ - энергия связи мезомолекулы, отсчитанная от значения $V_i(\infty)$, а эффективные потенциалы определяются следующими соотношениями /верхний и нижний знаки соответствуют значениям $i = 1$ и $i = 2$ /:

$$V_i(R) = \frac{1}{R} + \frac{L(L+1)}{2MR^2} + \frac{1}{2} [E_g^{\approx}(R) + E_u^{\approx}(R)] \mp \frac{1}{2M} H_{gu}(R)$$

$$V_{ij}(R) = M [E_g^{\approx}(R) - E_u^{\approx}(R)] + \frac{dQ_{ij}(R)}{dR}$$

$$E_g^{\approx}(R) = E_g(R) + \frac{1}{2M} H_{gg}(R) \quad /7/$$

$$E_u^{\approx}(R) = E_u(R) + \frac{1}{2M} H_{uu}(R)$$

$$Q_{12}(R) = Q_{gu}(R) = -Q_{21}(R);$$

Структура матричных элементов имеет следующий вид:

$$H_{\alpha\beta}(R) = H_{\alpha\beta}^{(+)}(R) + \kappa H_{\alpha\beta}^{(-)}(R) + \kappa^2 H_{\alpha\beta}^{(*)}(R) \quad /8/$$

$$\kappa = \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1}$$

В симметричном случае равных зарядов ядер

$$H_{gg}^{(-)}(R) = H_{uu}^{(+)}(R) = H_{gu}^{(+)}(R) = H_{gu}^{(*)}(R) = Q_{gu}^{(+)}(R) \equiv 0, \quad /9/$$

а для остальных матричных элементов справедливы асимптотические соотношения:

$$H_{gg}^{(+)}(\infty) = H_{gg}^{(*)}(\infty) = H_{uu}^{(+)}(\infty) = H_{uu}^{(*)}(\infty) = -\frac{1}{2} E_g(\infty) = -\frac{1}{2} E_u(\infty)$$

$$H_{gu}^{(-)}(\infty) = H_{ug}^{(-)}(\infty) = E_g(\infty) = E_u(\infty) = -\frac{1}{2}. \quad /10/$$

/Последнее равенство справедливо только для основного состояния/. Величины /7/ и /8/ вычислены в работах /3,4/ и представлены на рис. 1 и 2. Значения $V_i(\infty)$ равны энергиям соответствующих мезоатомов в адиабатическом приближении. Используя результаты работ /4,6,8/, можно убедиться, что

$$V_i(\infty) = -\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(\kappa \pm 1)^2}{4M} \right] \quad /11/$$

и совпадает с истинной энергией изолированных мезоатомов с точностью до членов M_3/M_i включительно. Действительно, с учетом равенств /7-10/, переходя к мезоатомным единицам $e = \hbar = M_3 = 1$, получим

$$V_i(\infty) = -\frac{m}{2} \left[1 - \frac{m}{4M} (\kappa \pm 1)^2 \right] = -\frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{M_i} + O(M_i^{-2}) \right]. \quad /12/$$

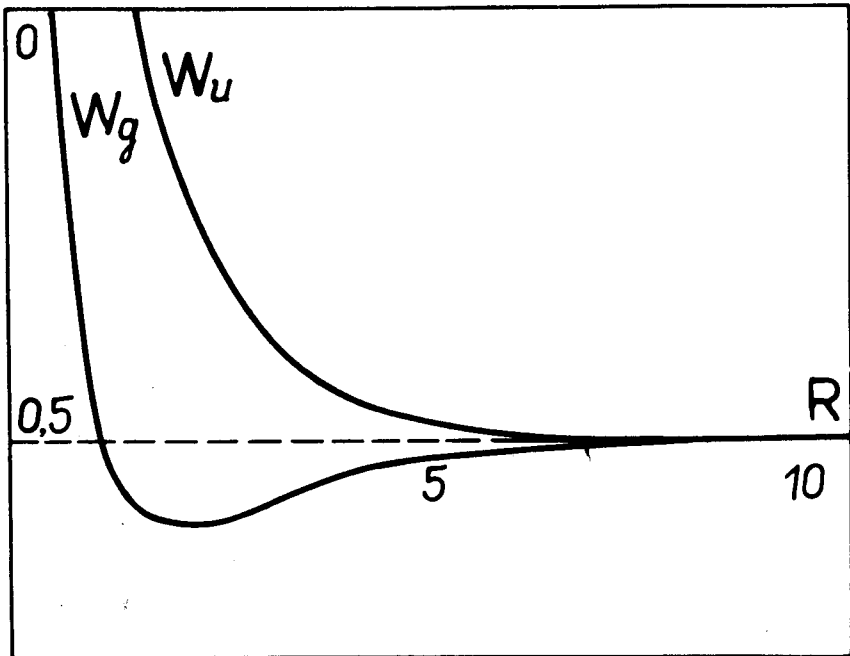


Рис. 1.

Термы задачи двух центров с учетом кулоновского отталкивания ядер: $W_g = \frac{1}{R} + E_g(R)$ - симметричный, $W_u = \frac{1}{R} + E_u(R)$ - антисимметричный.

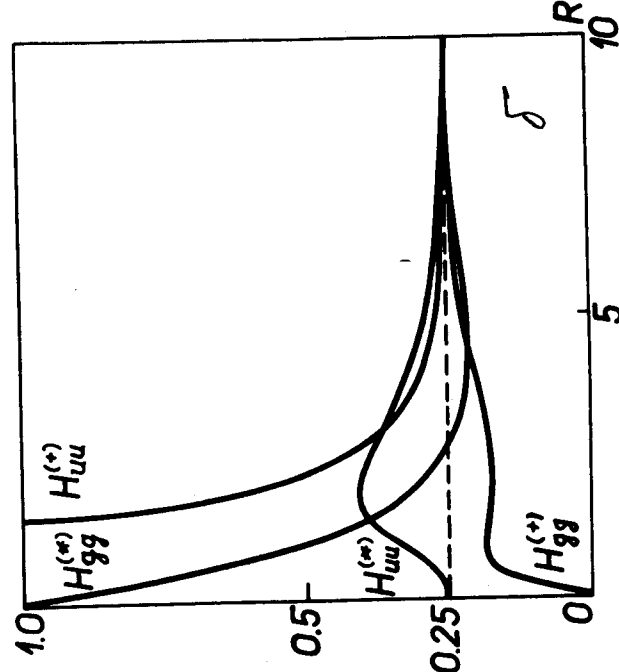
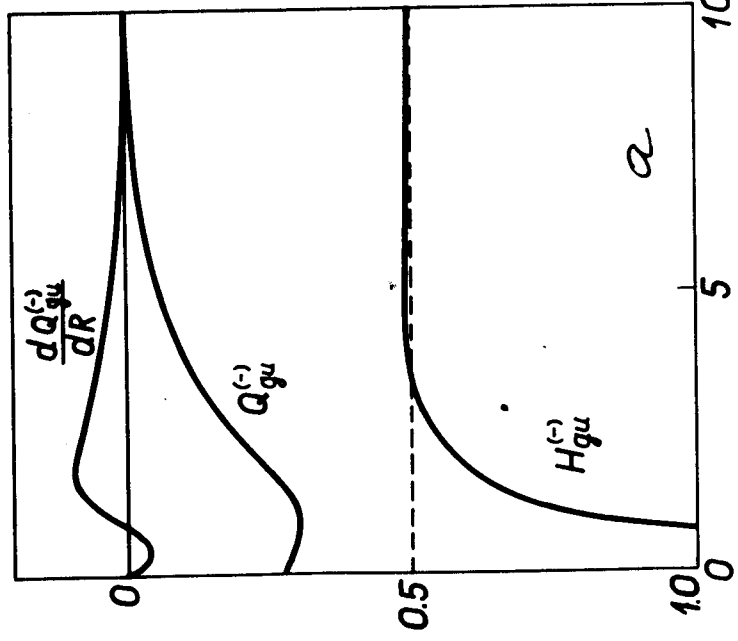


Рис. 2. Матричные элементы от операторов ядерного движения по волновым функциям задачи двух центров, определенные соотношениями /2/ и /8/.



В таблицах I-IV приведены результаты вычислений энергий связи ϵ_{Lv} мезомолекул водорода во всех возможных для них колебательных квантовых состояниях v при заданном орбитальном моменте L . Некоторые из уровней энергии вычислены впервые в данной работе.

Значения ϵ_{Lv} приведены в эв*. Величины энергий связи мезомолекул с различными ядрами $/p\mu$, $r\mu$ и $d\mu$ / отсчитываются от уровня энергии основного состояния более тяжелого мезоатома $/d\mu$ и $t\mu$ /, т.е. от значения $V_2(\infty)$.

В соответствии с этим в уравнениях /6/ следует положить

$$\epsilon_2 = \epsilon_{Lv}; \quad \epsilon_1 = \epsilon_{Lv} + V_1(\infty) - V_2(\infty) = \epsilon_{Lv} + \frac{\kappa}{2M}$$

В соответствии с этими условиями пересчитаны и результаты других работ, приведенные в таблицах. Для пересчета использованы последние данные о фундаментальных константах и значениях масс частиц /9/.

В случае равных масс $M_1 = M_2$, $K_{gu}(R) = Q_{gu}(R) = 0$ система /1/ распадается на два независимых уравнения. Энергия связи $\epsilon_{Lv} = E_g(\infty) - E$ определяется при этом из уравнения для функции $X_g/5$. Конечно, значения ϵ_{Lv} с равным успехом могут быть найдены также из системы уравнений /6/.

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 /10/. Вычисленное значение $\epsilon_{11} = 0,7$ эв хорошо согласуется с тем, которое необходимо для объяснения экспериментов по измерению скорости образования молекул $dd\mu/11/$ при различных температурах.

Потенциалы $V_g(R) = \frac{1}{R} + \frac{L(L+1)}{2MR^2} + E_g(R)$, схема уровней энергии

для этого случая, а также графики волновых функций X_{Lv} для состояний $(L=1, v=0)$ и $(L=1, v=1)$ представлены в работе /5/. Там же приведены детали и особенности используемого метода вычисления ϵ_{Lv} и X_{Lv} .

При вычислениях ϵ_{Lv} из уравнений /6/ использованы термы $E_g(R)$ и $E_u(R)$, а также соответствующие им матричные элементы

* Коэффициент пересчета β от значения ϵ в единицах задачи $e = \hbar = m = 1$ к значению ϵ (эв) $= \beta \epsilon_{Lv}$ равен

$$\beta = \frac{m}{m_e} \cdot 2Ry = \frac{M_3(M_1+M_2)}{m_e(M_1+M_2+M_3)} \cdot 27,211652 \text{ эв.}$$

где m_e - масса электрона.

$H_{gg}(R)$, $H_{gu}(R)$ и т.д., полученные с помощью алгоритма, реализованного в работах /3,4/.

Оценка точности результатов

Точность адиабатических расчетов обычно полагается равной величине $(M_3/M_1)^2$, которая по порядку равна погрешности определения начала отсчета энергий $V_1(\infty)$ и для мезомолекул водорода составляет $10^{-2} - 10^{-3}$ от глубины $D \approx 500$ эв эффективных потенциалов $V_i(R)$. В действительности точность вычислений несколько выше, что объясняется нечувствительностью значения ϵ_i к выбору начала отсчета $V_i(\infty)$ коль скоро в области минимума $R \approx R_0$ потенциала $V_i(R)$ его форма близка к истинной. Как видно из рис. 1 и 2, для $W(R)$ это условие выполнено, поскольку $H_{gg}(R) \approx const$ при $R \approx R_0$. В этом случае учет адиабатических поправок сводится к параллельному сдвигу всей кривой $V_i(R)$, что очевидным образом не повлияет на величину ϵ_i . Очевидно также, что точность адиабатических вычислений тем выше, чем меньше отношение M_3/M_1 . Сравнение с последними вариационными расчетами /Хальперн, 1964; Картер, 1968; таблицы I и II/ подтверждает это заключение и свидетельствует о корректности адиабатических вычислений в случае возбужденных состояний мезомолекул, для которых соответствующие вариационные расчеты большей частью еще не проведены.

Оператор $H^{(*)} = \frac{1}{2}(-\frac{1}{2}\Delta_r)$ равен половине кинетической энергии

движения электрона в кулоновском поле двух неподвижных зарядов /12/. Поэтому он с самого начала может быть включен в гамильтониан задачи двух центров, что, с одной стороны, приведет к переопределению единицы массы m исходной задачи /1/:

$$\frac{1}{m} \rightarrow \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{\kappa^2}{4} \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right), \quad /3a/$$

а, с другой стороны, изменит эффективные потенциалы /8/, поскольку в данном случае они не будут содержать членов $\kappa^2 H_a^{(*)} \beta(R)$. Соответственно этому изменится и коэффициент пересчета $\beta' = \frac{\mu}{m} \beta$ /см. примечание на стр. 6/. С учетом указанных изменений вычисления энергий связи были повторены и их результаты приведены в таблице II.

Изложенная процедура соответствует частичному учету поправок $\approx (M_3/M_i)^2$ к значениям $V_2(\infty)$, даваемым формулой /11/. Из таблицы II следует, что такой частичный учет поправок не приводит к существенным изменениям значений ϵ_{L_v} , найденных из системы уравнений /6/.

Более полное сравнение с расчетами других авторов /1,2/ для молекул с различными ядрами представлено в таблицах III и IV. Аналогичное сравнение для случая молекул с равными ядрами проведено в предыдущей работе авторов /5/.

Мы искренне признательны С.С.Герштейну и А.В.Матвеенку за многочисленные обсуждения и интерес к работе.

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.R.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.Riddell. *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. Ch.Sci.*, 48, 147 (1962).
3. G.Hunter, B.F.Gray, H.O.Prichard, *J.Chem.Phys.*, 45, 3806 (1966);
46, 2146 (1967). T.M.Peek. *J.Chem.Phys.*, 43, 3004 (1965). Sandia corporation Report, No. SC-RR-65-77 (1967).
4. Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. *Препринт ОИЯИ Р4-5040*, Дубна, 1970.
5. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. *Препринт ОИЯИ Р4-6256*, Дубна, 1972.
6. А.В.Матвееenko, Л.И.Пономарев. *ТМФ* 12, 64 /1972/.
7. D.R.Bates, R.H.G.Reid. In "Advances in Atomic and Molecular Physics", v. IV, Academic Press, New York.
8. А.В.Матвееenko, Л.И.Пономарев. *ЯФ* 16, 620 /1972/.
9. B.N.Taylor, W.H.Parker and D.N.Landenberg. *Rev.Mod.Phys.*, 41, 375 (1969).
И.П.Селинов. *Изотопы. Наука*, т. III, М., 1970.

10. А.В.Матвееenko, Л.И.Пономарев. *ЖЭТФ* 58, 1640 /1970/.
11. Е.А.Весман. *Письма ЖЭТФ* 5, 113 /1967/. *Препринты ОИЯИ Р4-3256, Р4-3384*, Дубна, 1967.
12. A.M.Halpern. *Phys.Rev.*, 186, 14 (1969).

Рукопись поступила в издательский отдел
26 января 1973 года.

Таблица I

Энергия связи $E_{L\nu}$ (эВ) мезомолекул водорода с
разными ядрами

Мезомолекула	L = 0		L = 1		L = 2	L = 3	Метод расчета
	$\nu = 0$	$\nu = 1$	$\nu = 0$	$\nu = 1$	$\nu = 0$	$\nu = 0$	
pp μ	253 ^{*)}	—	107,23 ^{**)}	—	—	—	Вариационный
	248,0	—	101,5	—	—	—	Денная работа
dd μ	324,2 ^{*)}	32,7 ^{*)}	226,55 ^{**)}	—	—	—	Вариационный
	322,8	32,9	224,1	0,7	83,6	—	Денная работа
tt μ	361,2 ^{*)}	75 ^{*)}	280,72 ^{**)}	—	—	—	Вариационный
	361,5	81,4	287,6	43,1	170,9	46,7	Денная работа

*) В.Р.Саттер. Phys. Rev. **102**, 139 (1936).

) А.Халперн. Phys. Rev., **128A, 34 (1954).

Таблица II

Энергия связи $E_{L\nu}$ (эВ) мезомолекул водорода с разными
ядрами

Мезомолекула	L = 0		L = 1	L = 2	Метод расчета
	$\nu = 0$	$\nu = 1$	$\nu = 0$	$\nu = 0$	
pd μ	221,2 ^{*)}	—	—	—	Вариационный
	214,1	—	89,7	—	Адиабатический с массой (3)
	214,4	—	90,1	—	Адиабатический с массой (3a)
pt μ	212,8 ^{*)}	—	—	—	Вариационный
	206,2	—	91,1	—	Адиабатический с массой (3)
	207,3	—	92,2	—	Адиабатический с массой (3a)
dt μ	318,1 ^{*)}	32,9 ^{*)}	—	—	Вариационный
	316,6	31,7	229,6	99,3	Адиабатический с массой (3)
	316,6	31,7	229,7	99,4	Адиабатический с массой (3a)

*) В.Р.Саттер. Phys. Rev. **102**, 139 (1936).

Энергия связи $E_{L\nu}$ приведены в электрон-вольтах и отсчитываются от уровня энергии основного состояния более тяжелого изотоба водорода, т.е. от уровня $E_p = 2663,23$ эВ для молекулы pd μ , и от уровня $E_t = 2711,27$ эВ для молекул pt μ и dt μ . Значения масс M_i в электронных массах m_e приняты равными 1/): $M_3 = 206,769$; $M_p = 1863,109$; $M_d = 3670,398$; $M_t = 5496,753$.

Энергия связи $E_{L\nu}$ (эВ) мезомезонных $p\bar{t}\mu$

Таблица III.

Источник	$E_{L\nu}$ (эВ)		Метод вычисления
	$L=0, \nu=0$	$L=1, \nu=0$	
Витте (1967)	264	-	опени
Korshak and Schmidt (1967)	250	-	адиабатический
Белен и др. (1959)	220	90	-
Colen et al. (1960)	214	90	-
Зельдович и Герштейн (1961)	223	95	-
Fryman and Kinney (1961)	193	-	вариационный
Marud and Mateu (1961)	223	-	адиабатический
Schröder (1963)	206	-	вариационный
Prost et al. (1964)	211	-	-
Carter (1966, 1968)	221,2	-	-
Колов (1968)	220,0	-	-
Данная работа (1972)	214	89,7	адиабатический

Энергия связи $E_{L\nu}$ отсчитывается от основного состояния мезомезона $p\bar{t}\mu$.

Таблица IV.

Энергия связи $E_{L\nu}$ (эВ) мезомезонных $p\bar{t}\mu$ и $d\bar{t}\mu$

Источник	$p\bar{t}\mu$		$d\bar{t}\mu$			Метод вычисления	
	$L=0, \nu=0$	$L=1, \nu=0$	$L=0, \nu=0$	$L=0, \nu=1$	$L=1, \nu=0$		
Белен и др. (1959)	213	98	319	32	232	102	адиабатический
Зельдович и Герштейн (1960)	211	90	323	36	234	103	-
Schröder (1963)	195	-	303	-	-	-	вариационный
Carter (1966)	212,8	-	317	30,4	-	-	-
Carter (1968)	-	-	318,1	32,9	-	-	-
Данная работа (1972)	206	91,1	317	31,7	230	99,3	адиабатический

Энергия связи $E_{L\nu}$ отсчитывается от основного состояния мезомезона $p\bar{t}\mu$.