

5/16-02

сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

P4-81-835

Д.Д.Бакалов, В.С.Мележик

ЭФФЕКТЫ ЭЛЕКТРОННОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ  
В  $\mu$ -МЕЗОМОЛЕКУЛАХ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА

1981

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время большой интерес вызывает явление резонансного образования мезомолекул  $dd_\mu$  и  $dt_\mu$ <sup>1,2</sup>. Его суть состоит в том, что при столкновении  $t_\mu$ - и  $d_\mu$ -атомов с ядрами молекул  $D_2$  протекают реакции



с передачей выделяющейся энергии связи мезомолекул на возбуждение колебаний молекулярных комплексов  $[(dt_\mu)d_2e]$  и  $[(dd_\mu)d_2e]$ . Такие процессы возможны благодаря существованию в спектрах мезомолекул  $dt_\mu$  и  $dd_\mu$  слабосвязанных состояний с энергиями связи  $\epsilon_{Jv} = -0,64$  эВ и  $\epsilon_{Jv} = -1,91$  эВ, которые имеют вращательное квантовое число  $J=1$  и колебательное  $v=1$ . Условие резонанса записывается следующим образом:

$$\epsilon_0 + E_{1s} + E_0 = E^*, \quad /2/$$

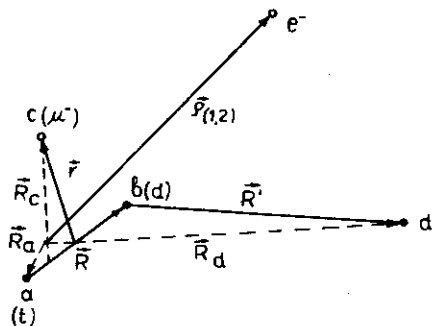
где  $\epsilon_0$  - энергия столкновения  $t_\mu(d_\mu)$  и  $D_2$ ;  $E_{1s}$  и  $E_0$  - энергии основных состояний мезоатома и молекулы, а  $E^* = E_{Jv} + E_v + \Delta E$  - энергия возбужденного молекулярного комплекса  $[(dt_\mu)d_2e]^*$  /либо  $[(dd_\mu)d_2e]^*$  /, равная сумме энергий мезомолекулы  $E_{Jv}$ , молекулы  $D_2$   $E_v$  и добавки  $\Delta E$ , обусловленной эффектами взаимной экранировки зарядов в молекулярном комплексе.

В результате реакции на возбуждение молекулярного комплекса передается энергия

$$\epsilon_0 + |\epsilon_{Jv}| = E_v + \Delta E - E_0, \quad /3/$$

где  $\epsilon_{Jv} = E_{Jv} - E_{1s} < 0$  - энергия связи мезомолекулы.

Поскольку расстояния между колебательными уровнями молекулы  $D_2$  всего  $\sim 0,2$  эВ, то скорость реакции /1/ существенно зависит от энергии столкновения  $\epsilon_0$ . Экспериментальная техника, развитая для измерения скорости образования мезомолекул  $dd_\mu$ , позволяет измерять температурную зависимость этого процесса с точностью  $\sim 10^\circ\text{C}$ , что соответствует  $\sim 10^{-3}$  эВ энергии связи. Следовательно, для количественной интерпретации планируемых экспериментов необходимо знать с такой же точностью структуру уровней мезомолекул  $dd_\mu$  и  $dt_\mu$ , а также молекулы  $D_2$ .



Система координат для молекулярного комплекса  $[(dt_\mu)d_2e]$  /либо  $[(dd_\mu)d_2e]$  /:  $\vec{R}$  и  $\vec{r}$  - координаты мезомолекулы;  $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2$  - координаты электронов;  $R \approx R_d^-$  - расстояние между ядрами в молекуле  $D_2$ .

В настоящее время известны нерелятивистские значения энергии уровней /с точностью  $\sim 0,1-0,05$  эВ/<sup>3/</sup>, их сверхтонкое расщепление<sup>4/</sup>, вычислены релятивистские поправки и поправки на электромагнитную структуру ядер<sup>5,6/</sup>, а также учтены эффекты сильного взаимодействия<sup>7/</sup>. Поправка  $\Delta E$ , однако, до сих пор вычислена не была. Как известно, в мезоатомах сдвиг энергии, обусловленный электронным экранированием, составляет величину  $\sim 2Ry \frac{(Z-1)^3}{Z^2} \left(\frac{a_\mu}{a_0}\right)^2 \sim 10^{-3}$  эВ. Но, как показывают численные расчеты<sup>8/</sup>, равновесные расстояния между ядрами мезомолекул равны  $\sim (2 \div 3)a_\mu$ , а в слабосвязанных "рыхлых" системах  $dd_\mu$  и  $dt_\mu (J=v=1)$  они достигают величин  $\sim (5 \div 6)a_\mu$ . Следовательно, можно ожидать, что эффекты экранировки в молекулярных комплексах, образующихся в реакциях /1/, по крайней мере на порядок величины превышают мезоатомные, и поэтому их необходимо учитывать при описании процесса резонансного образования этих систем.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Уровни энергии молекулярного комплекса  $[(dt_\mu)d_2e]$  находятся при решении уравнения Шредингера\*:

$$(H - E^*)\Psi^* = 0,$$

с гамильтонианом

$$H = H_\mu + H_{D_2} + \Delta H,$$

который в единицах  $m_a = \hbar = e^2 = 1$  ( $m_a^{-1} = M_a^{-1} + M_c^{-1}$ ) имеет вид

\* Здесь мы ограничимся рассмотрением лишь первой из реакций /1/, это, однако, не нарушает общности рассуждений.

$$H_{\mu} = -\frac{1}{2M} \left[ \left( \nabla_{\vec{R}} + \frac{\kappa}{2} \nabla_{\vec{r}} \right)^2 - \left( \frac{1+\kappa}{2} \Delta_{\vec{r}} \right) \right] -$$

$$-\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} - \frac{1}{|\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{R}|} - \frac{1}{|\vec{r} - \frac{1}{2}\vec{R}|} + \frac{1}{R} \quad /4/$$

$$M^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}, \quad \kappa = \frac{M_b - M_a}{M_b + M_a}, \quad \mathcal{M} = M_a + M_b + M_c,$$

$$H_{D'_2} = -\frac{1}{2\mathcal{M}} \Delta_{\vec{R}} - \frac{1}{2M_d} \Delta_{\vec{R}_d} - \frac{1}{2m_e} (\Delta_{\vec{\rho}_1} + \Delta_{\vec{\rho}_2}) -$$

$$-\sum_{k=1,2} \left( \frac{1}{\rho_k} + \frac{1}{|\vec{R}_d - \vec{\rho}_k|} \right) + \frac{1}{|\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2|} + \frac{1}{R_d} \quad /5/$$

$$\Delta H = \sum_{i=a,b,c} Z_i \left\{ -\sum_{k=1,2} \left( \frac{1}{|\vec{R}_i - \vec{\rho}_k|} - \frac{1}{\rho_k} \right) + \left( \frac{1}{|\vec{R}_i - \vec{R}_d|} - \frac{1}{R_d} \right) \right\} \quad /6/$$

Полный гамильтониан системы записан в координатах

$$\vec{r} = \vec{R}_c - \frac{1}{2} (\vec{R}_a + \vec{R}_b); \quad \vec{R} = \vec{R}_b - \vec{R}_a,$$

$$\vec{R} = \frac{1}{\mathcal{M}} (M_a \vec{R}_a + M_b \vec{R}_b + M_c \vec{R}_c) = 0,$$

начало координат помещено в центр масс мезомолекулы. В нем выделен гамильтониан мезомолекулы  $H_{\mu}$  и гамильтониан "эффективной" молекулы  $D'_2$ , отличающейся от молекулы  $D_2$  тем, что в ней одно из ядер  $d$  заменено на "эффективное" ядро  $dt_{\mu}$  с массой  $M_{d'} = M_d + M_t + m_{\mu}$  и зарядом  $Z_{d'} = 1$ . Оператор возмущения  $\Delta H = H - H_{\mu} - H_{D'_2}$  описывает эффекты, обусловленные неточечностью мезомолекулы  $dt_{\mu}$ , вследствие чего заряды ее частиц экранируются электронами  $D'_2$ -молекулы, а также сами искажают их пространственное распределение.

Поправку  $\Delta E$  к приближенному значению энергии  $\tilde{E}^* = E_{\nu} + E_{J\nu}$  уровня молекулярного комплекса, соответствующую  $\Delta H$ , найдем по теории возмущений. Для этого выразим решение  $\tilde{\Psi}^*$  уравнения Шредингера с гамильтонианом  $\tilde{H}$ :

$$(\tilde{H} - \tilde{E}^*) \tilde{\Psi}^* = 0,$$

где

$$\tilde{H} = H_{\mu} + H_{D'_2},$$

через известные решения  $\Psi_{J\nu m_J}$  и  $\Psi_{D'_2}$  для  $dt_{\mu}$ - и  $D'_2$ -молекул:

$$\tilde{\Psi}^* = \Psi_{J\nu m_J}(\vec{R}, \vec{r}) \Psi_{D'_2}(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{R}_d). \quad /7/$$

В качестве волновой функции молекулы  $D_2'$  используем приближенную волновую функцию основного состояния молекулы  $H_2$ <sup>8,9/</sup>:

$$\Psi_{D_2'}(\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{R}_d) \approx \Psi_0(\vec{\rho}_1, \vec{R}_d) \Psi_0(\vec{\rho}_2, \vec{R}_d),$$

$$\Psi_0(\vec{\rho}, \vec{R}_d) = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{2\pi(1+\Delta)}} (e^{-Z_0\rho} + e^{-Z_0|\vec{\rho}-\vec{R}_d|}), \quad /8/$$

$$Z_0 = 1,19, \quad \Delta = 0,679, \quad R_d = 1,4 \text{ а.е.}$$

Волновая функция мезомолекулы в приближении  $\sigma$ -термов<sup>10/</sup> имеет вид

$$\Psi_{Jv m_J}(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{R} u_{Jv}(\xi, \eta; R) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} Y_{Jm_J}(\Theta, \Phi), \quad /9/$$

где  $\Theta$  и  $\Phi$  - углы вектора  $\vec{R}$ , а  $\xi$ ,  $\eta$  - сферические координаты:

$$\xi = \frac{1}{R} (|\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{R}| + |\vec{r} - \frac{1}{2}\vec{R}|), \quad \eta = \frac{1}{R} (|\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{R}| - |\vec{r} - \frac{1}{2}\vec{R}|).$$

Для функции  $u(\xi, \eta; R)$  используем адиабатическое разложение<sup>11/</sup>:

$$u(\xi, \eta; R) = \sum_j (\chi_{jg}(R) \phi_{jg}(\xi, \eta; R) + \chi_{ju}(R) \phi_{ju}(\xi, \eta; R)), \quad /10/$$

где  $\phi_{jp}$ ,  $p=g, u$ , - волновые функции задачи двух кулоновских центров<sup>10/</sup>, а  $\chi_{jp}$  - волновые функции относительного движения ядер в мезомолекуле; они находятся при решении системы уравнений, к которой сводится исходное уравнение Шредингера для мезомолекулы<sup>13/</sup>.

В первом порядке теории возмущений поправка  $\Delta E$  к энергии связи молекулярного комплекса  $[(dt_\mu)d_2e]$ , обусловленная эффектами экранировки, равна

$$\Delta E = \langle \Delta H \rangle = \int d\vec{\rho}_1 d\vec{\rho}_2 d\vec{R} d\vec{r} |\Psi_0(\vec{\rho}_1, \vec{R}_d)|^2 |\Psi_0(\vec{\rho}_2, \vec{R}_d)|^2 |\Psi_{Jv m_J}(\vec{R}, \vec{r})|^2 \Delta H. \quad /11/$$

Для вычисления этого интеграла удобно произвести мультипольное разложение оператора  $\Delta H$ :

$$\Delta H = \Delta H^{(0)} + \Delta H^{(1)} + \Delta H^{(2)} + \dots \quad /12/$$

Слагаемые  $\Delta H^{(1)}$  нечетной мультипольности вклада в интеграл /11/ не дают, а монопольный  $\Delta H^{(0)}$  и квадрупольный операторы  $\Delta H^{(2)}$  имеют вид

$$\Delta H^{(0)} = - \sum_{i=a, b, c} Z_i \left\{ \sum_{k=1, 2} \Theta(R_i - \rho_k) \left( \frac{1}{R_i} - \frac{1}{\rho_k} \right) - \Theta(R_i - R_d) \left( \frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_d} \right) \right\}, \quad /13a/$$

$$\Delta H^{(2)} = -\frac{3}{2} \sum_{i=a,b,c} Z_i \left\{ \sum_{k=1,2} \frac{Q(\vec{R}_i) \cdot Q(\vec{\rho}_k)}{[\max(R_i, \rho_k)]^5} - \frac{Q(\vec{R}_i) \cdot Q(\vec{R}_d)}{[\max(R_i, R_d)]^5} \right\}, \quad /136/$$

где

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0; \end{cases}$$

$Q(\vec{x}) \cdot Q(\vec{y}) = \sum_{ij} Q_{ij}(\vec{x}) Q_{ij}(\vec{y})$  - свертка тензоров второго ранга;

$Q_{ij}(\vec{x}) = x_i x_j - \frac{1}{3} x^2 \delta_{ij}$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ . Полный сдвиг  $\Delta E = \Delta E^{(0)} + \Delta E^{(2)}$  складывается из  $\Delta E^{(0)} = \langle \Delta H^{(0)} \rangle$  - сдвига уровня молекулярного комплекса, обусловленного монополярным взаимодействием  $\Delta H^{(0)}$ , и  $\Delta E^{(2)} = \langle \Delta H^{(2)} \rangle$  - сдвига за счет квадрупольного взаимодействия  $\Delta H^{(2)}$ .

### 3. МОНОПОЛЯРНЫЕ СДВИГИ УРОВНЕЙ МОЛЕКУЛ $[(dt_\mu)d2e]$ . И $[(dd_\mu)d2e]$

Вычисление монополярной поправки  $\Delta E^{(0)}$  к уровню энергии  $\bar{E}^*$  молекулярного комплекса  $[(dt_\mu)d2e]$  проведем в два этапа: сначала вычислим потенциалы  $\Delta V^{(0)}(R_i)$  путем усреднения оператора  $\Delta H^{(0)}$  по координатам электронов  $\vec{\rho}_1$  и  $\vec{\rho}_2$ , а затем проведем усреднение по координатам мезомолекулы:

$$\Delta E_{J\nu}^{(0)} = -\sum_i Z_i \int d\vec{R} d\vec{r} |\Psi_{J\nu m_J}(\vec{R}, \vec{r})|^2 \Delta V^{(0)}(R_i), \quad /14/$$

где

$$\Delta V^{(0)}(R_i) = \int d\vec{\rho}_1 d\vec{\rho}_2 |\Psi_0(\vec{\rho}_1, \vec{R}_d)|^2 |\Psi_0(\vec{\rho}_2, \vec{R}_d)|^2 \times \\ \times \left\{ \sum_{k=1,2} \Theta(R_i - \rho_k) \left( \frac{1}{R_i} - \frac{1}{\rho_k} \right) - \Theta(R_i - R_d) \left( \frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_d} \right) \right\}, \quad /14a/$$

а векторы  $\vec{R}_a$ ,  $\vec{R}_b$  и  $\vec{R}_c$  связаны с  $\vec{r}$  и  $\vec{R}$  следующим образом:

$$\vec{R}_{a,b} = \mp \frac{1}{2} [1 \pm \kappa (1 - \mu)] \vec{R} - \mu \vec{r}, \\ R_c = -\frac{\kappa}{2} (1 - \mu) \vec{R} + (1 - \mu) \vec{r}, \quad \mu = \frac{M_c}{M}$$

в сфероидальных координатах

$$|\vec{R}_{a,b}| = \frac{R}{2} \left\{ [1 \pm \kappa (1 - \mu)]^2 \pm 2\mu [1 \pm \kappa (1 - \mu)] \xi \eta + \mu^2 (\xi^2 + \eta^2 - 1) \right\}^{1/2}$$

$$|\vec{R}_c| = \frac{R}{2} (1 - \mu) \left\{ \kappa^2 - 2\kappa \xi \eta + (\xi^2 + \eta^2 - 1) \right\}^{1/2}$$

Простой вид функции  $\Psi_0(\vec{\rho}, \vec{R}_d)$  /8/ позволяет вычислить  $\Delta V^{(0)}(R_i)$  в явном виде. В области  $R_i \leq R_d$  имеем

$$\Delta V^{(0)}(R_i) = \frac{Z_0}{1+\Delta} \left\{ \frac{1}{x} [1 - x - e^{-2x}(1+x)] - \right. \\ \left. - \frac{e^{-y}}{xy} [2+y - (3+2y)x + 2(1+y)x^2 - \frac{2}{3}x^3 - e^{-2x}(2+x+y)] + \right. \\ \left. + \frac{e^{-2y}}{8xy} [e^{-2x}(3+2x+2y) - e^{2x}(3-2x+2y) + 8(1+y)x] \right\}, \quad /15/$$

где  $x = Z_0 R_i$ ;  $y = Z_0 R_d$ . Область  $R_i \geq R_d$  дает пренебрежимо малый вклад в интеграл /14/. Прямая подстановка  $\Delta V^{(0)}(R_i)$  в /14/ приводит к трехкратному интегралу по  $\xi$ ,  $\eta$  и  $R$ , который может быть вычислен только с помощью численного интегрирования. Для упрощения вычислений аппроксимируем функцию  $\Delta V^{(0)}(R_i)$  полиномом от  $R_i^2$ :

$$\Delta \tilde{V}^{(0)}(R_i) = -\frac{2}{3} \frac{Z_0^3}{1+\Delta} (0,98(1+e^{-y})^2 R_i^2 - 6,5 R_i^4 + 40 R_i^6), \quad /16/$$

который отличается от  $\Delta V^{(0)}(R_i)$  не более чем на 2% во всей области  $0 \leq R_i \leq 0,35$  а.е., дающей основной вклад /~98%/ в интеграл /14/. Такая замена приводит к тому, что трехкратный интеграл /14/ сводится к последовательному интегрированию по  $\xi$ ,  $\eta$  и  $R$  произведений кулоновских сфероидальных функций на полиномы от  $\xi$  и  $\eta$ :  $\int_1^\infty d\xi \cdot \xi^n \Pi_j^2(\xi; R)$ ,  $\int_1^\infty d\eta \cdot \eta^n \Xi_j^2(\eta; R)$ , для которых известны рекуррентные соотношения  $^{-1/12}$ . Интегрирование по  $R$  функции  $\Delta V^{(0)}(R) = \int d\xi d\eta (\xi^2 - \eta^2) \phi_j^2(\xi, \eta; R) \Delta \tilde{V}^{(0)}(\xi, \eta; R)$  проводилось численно, при этом использовались волновые функции мезомолекул  $dt_\mu$  и  $dd_\mu$ , вычисленные в работе /3/.

В табл.1 приведены монополярные поправки  $\Delta E_{jv}^{(0)}$  к уровням молекул  $[(dt_\mu)d2e]$  и  $[(dd_\mu)d2e]$ , обусловленные эффектами экранирования в этих системах, вычисленные для различных состояний мезомолекул  $dt_\mu$  и  $dd_\mu$ . Здесь же приведены среднеквадратичные радиусы  $\bar{r}$ ,  $\bar{R}$ ,  $\bar{R}_i$ , которые определены формулами  $\bar{R}_i^2 = \int d\vec{R} d\vec{r} |\Psi_{jvm_j}(\vec{R}, \vec{r})|^2 R_i^2$  и т.д.

#### 4. КВАДРУПОЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ УРОВНЕЙ МОЛЕКУЛ $[(dt_\mu)d2e]$ и $[(dd_\mu)d2e]$ .

При рассмотрении эффектов экранирования, обусловленных квадрупольным взаимодействием  $\Delta H^{(2)}$  /136/, необходимо принимать во внимание спиновую структуру различных состояний мезомолекул /поскольку  $\Delta H^{(2)}$  - свертка двух тензоров/. Учет

Таблица 1

Монопольные поправки  $\Delta E^{(0)}$  к уровням молекул  
 $[(dt_\mu)d2e]$  и  $[(dd_\mu)d2e]$

Мезомолекула	Jv	$\Delta E^{(0)}$ /мэВ/	$\bar{R}$	$\bar{r}$	$\bar{R}_a$	$\bar{R}_b$	$\bar{R}_c$
	00	0,5	2,8	1,8	1,1	1,7	1,8
	10	0,7	3,1	2,0	1,2	1,8	1,9
$dt_\mu$	20	1,4	3,6	2,2	1,5	2,2	2,1
	01	4,5	5,4	3,0	2,1	3,2	2,8
	11	25	10,8	5,6	4,3	6,6	4,6
$dd_\mu$	11	16	10,1	5,3	5,0	5,0	5,1

спиновых взаимодействий в мезомолекулах /при построении гамильтониана  $H_\mu$  /4/ все частицы предполагались бесспиновыми/ приводит к сверхтонкому расщеплению состояния  $|Jv\rangle$  на компоненты мультиплета, каждая из которых классифицируется набором квантовых чисел  $g, N, J, v, g_z^{1/4}$ , где  $g$  и  $g_z$  - полный момент мезомолекулы и его проекция, а индекс  $N$  принимает значения  $1 \leq N \leq N_{MAX} / N_{MAX}$  - кратность вырождения уровня с данными  $g, g_z, J, v$  в нерелятивистском пределе/. В приближении "больших компонент" /4/, ограничившись разложением лишь по  $\sigma$ -термам /3/, волновую функцию состояния  $|gg_z NJ v\rangle$  запишем в виде

$$\Psi_{gg_z J v N}(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{R} u_{Jv}(\xi, \eta; R) \sum_{sI} \beta_{sI}^{gNJv} y_{0JsI}^{gg_z}(\Phi, \Theta, 0), \quad /17/$$

где  $\vec{r} = \vec{s}_a + \vec{s}_b$ ,  $\vec{s} = \vec{r} + \vec{s}_c$ ;  $y_{0JsI}^{gg_z}$  - шаровые спиноры:

$$y_{0JsI}^{gg_z}(\Phi, \Theta, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{\zeta, M} \langle s \zeta, JM | gg_z \rangle Y_{JM}(\Theta, \Phi) e_\zeta^{sI}; \quad /18/$$

$e_\zeta^{sI}$  - постоянные спиноры, удовлетворяющие соотношениям

$$(\vec{s}^2 - s(s+1))e_\zeta^{sI} = (\vec{r}^2 - I(I+1))e_\zeta^{sI} = (s_z - \zeta)e_\zeta^{sI} = 0,$$

$$\vec{e}_\zeta^{sI} \cdot \vec{e}_{\zeta'}^{s'I'} = \delta_{ss'} \delta_{II'} \delta_{\zeta\zeta'};$$



амплитуды  $\beta_{sI}^{JNJV}$  были вычислены в работе /4/, функции  $u_{JV}(\xi, \eta; R)$  те же, что и в /10/. Вместо  $|\Psi_{JvMj}(\vec{R}, \vec{r})|^2$  в формулу /14/ подставим

$$|\Psi_{JvN}(\vec{R}, \vec{r})|^2 = \left(\frac{1}{R} u_{JV}(\xi, \eta; R)\right)^2 \sum_M \frac{1}{2\pi} |Y_{JM}(\Theta, \Phi)|^2 \times \\ \times \sum_s \left(\sum_I (\beta_{sI}^{JNJV})^2 \langle s j_z - M, JM | j_z \rangle^2\right). \quad /19/$$

Оператор  $\Delta H^{(2)}$  /13б/ выразим через сферические компоненты  $\tilde{Q}_q$  тензоров  $Q$ :

$$\tilde{Q}_0 = \sqrt{\frac{3}{2}} Q_{33}, \quad \tilde{Q}_{\pm 1} = \mp Q_{13} - i Q_{23}, \quad \tilde{Q}_{\pm 2} = \frac{1}{2} (Q_{11} - Q_{22} \pm 2i Q_{12}).$$

Имеем

$$\Delta H^{(2)} = -\sum_i Z_i \sum_{q=-2}^2 (-1)^q \tilde{Q}_q(\vec{R}_i) \left\{ \frac{3}{2} \sum_{k=1,2} \frac{\tilde{Q}_{-q}(\vec{\rho}_k)}{[\max(R_i, \rho_k)]^5} - \frac{3}{2} \frac{\tilde{Q}_{-q}(\vec{R}_d)}{[\max(R_i, R_d)]^5} \right\}. \quad /20/$$

При усреднении  $\Delta H^{(2)}$  по углам с функцией  $|Y_{JM}(\Theta, \Phi)|^2$  отличный от нуля вклад в  $\Delta E^{(2)}$  дает лишь  $\tilde{Q}_0(\vec{R}_i)$  с  $q=0$ . С учетом этого обстоятельства выражение для квадрупольной поправки  $\Delta E^{(2)} = \langle \Delta H^{(2)} \rangle$  принимает вид

$$\Delta E^{(2)} = -\sum_i Z_i \sum_M \sum_s \left( \langle s j_z - M, JM | j_z \rangle^2 \sum_I (\beta_{sI}^{JNJV})^2 \right) \times \\ \times \int dR \left(\frac{R}{2}\right)^3 \int d\xi d\eta (\xi^2 - \eta^2) u_{JV}(\xi, \eta; R)^2 \int d\Theta \sin\Theta d\Phi d\phi \times \\ \times \frac{1}{2\pi} |Y_{JM}(\Theta, \Phi)|^2 \tilde{Q}_0(\vec{R}_i) \Delta V^{(2)}(R_i), \quad /21/$$

где в интересующей нас области  $R_i \leq R_d$

$$\Delta V^{(2)}(R_i) = \int d\vec{\rho}_1 d\vec{\rho}_2 |\Psi_0(\vec{\rho}_1, \vec{R}_d) \Psi_0(\vec{\rho}_2, \vec{R}_d)|^2 \left\{ \frac{3}{2} \sum_{k=1,2} \frac{\tilde{Q}_0(\vec{\rho}_k)}{[\max(R_i, \rho_k)]^5} - \frac{3}{2} \frac{\tilde{Q}_0(\vec{R}_d)}{[\max(R_i, R_d)]^5} \right\} = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{Z_0^3}{1+\Delta} \frac{1}{y^3} \left\{ 2e^{-y} \left[ \frac{3}{x^5} \frac{a(y)}{2} E_4(2x) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{b(y)}{4} E_3(2x) + \frac{c(y)}{2} (E_2(2x) + E_1(2x)) \right] + \frac{2}{5} a(y) - \frac{5b(y)}{2x} + \frac{5c(y)}{x^2} \left(1 - \frac{1}{x}\right) \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + e^{-2x} \left( \frac{2a(y)}{x} + \frac{c(y)}{x^2} \left( 1 + \frac{2}{x} \right) - 2a(y) \left( \ln x + \int_{2x}^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{t} \right) \right) + \\
& + 4 \left[ a(y) e^{-y} \ln y + a(-y) e^y \int_{2y}^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{t} \right] + 4 e^{-y} (y^2 + 5y + 11) + \\
& + \frac{3e^{-2y}}{8x^5} \left[ \frac{a(2y)}{2} (E_4(2x) - E_4(-2x)) + \frac{b(2y)}{8} (E_3(2x) - E_3(-2x)) \right] + \\
& + \frac{c(2y)}{16} (2(E_2(2x) - E_2(-2x)) + E_1(2x) - E_1(-2x)) + \frac{e^{-2(x+y)}}{8} \left[ \frac{a(2y)}{x} + \right. \\
& \left. + \frac{c(2y)}{4x^2} \left( 2 + \frac{1}{x} \right) \right] - \frac{e^{-2(y-x)}}{8} \left[ \frac{a(2y)}{x} - \frac{c(2y)}{4x^2} \left( 2 - \frac{1}{x} \right) \right] - 1 \Big\} - \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{R_d^3}.
\end{aligned}$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$E_n(z) = 1 - e^{-z} \sum_{k=0}^n \frac{z^k}{k!}, \quad a(z) = z^2 + 3z + 3,$$

$$b(z) = z^3 + 7z^2 + 18z + 18, \quad c(z) = b(z) - a(z), \quad x = Z_0 R_i, \quad y = Z_0 R_d.$$

Прямая подстановка этого выражения для  $\Delta V^{(2)}(R_i)$  привела бы к тем же вычислительным проблемам, что и в случае монопольной поправки, поэтому для упрощения вычислений мы воспользовались аппроксимацией

$$\begin{aligned}
\Delta V^{(2)}(R_i) & \approx \Delta V^{(2)}(0) = \\
& = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{Z_0^3}{1+\Delta} \frac{1}{y^3} \left\{ 4 \left[ a(y) e^{-y} \ln y + a(-y) e^y \int_{2y}^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{t} + e^{-y} (a(y) (\ln 2 + C) - 22 / \right. \right. \\
& \left. \left. - y \left( \frac{1}{3} y^2 + 3y + 6 \right) \right] - E_3(2y) \right\} - \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{R_d^3}
\end{aligned}$$

(где  $C = 0,577$  - константа Эйлера/, которая справедлива с точностью ~ 10%. Для волновой функции  $D_2^+$  молекулы /8/ получаем  $\Delta V^{(2)}(0) = -0,234$ .

Окончательное выражение для  $\Delta E^{(2)}$  принимает вид

$$\Delta E^{(2)} = \begin{cases} 0, & J=0, \\ A \int_N \int_V |\psi_z| \Delta E^{(2)}, J \geq 1, \end{cases} \quad /23/$$

где

$$A \int_N \int_V |\psi_z| = \sum_M \frac{\langle JM, 20 | JM \rangle}{\langle JO, 20 | JO \rangle} \sum_s \langle s | \psi_z - M, JM | \psi_z \rangle^2 \sum_I (\beta_{sI}^{JNJ_V})^2,$$

$$\Delta \bar{E}^{(2)} = -\sqrt{\frac{3}{8}} \frac{J(J+1)}{(2J-1)(2J+3)} \Delta V^{(2)}(0) \int dR \left(\frac{R}{2}\right)^5 \int d\xi d\eta (\xi^2 - \eta^2) \times \quad /23a/$$

$$\times (u_{J_v}(\xi, \eta; R))^2 \{ (1-2\mu - \mu^2)(\xi^2 + \eta^2 - 3\xi^2 \eta^2 - 1) + 4\kappa(1-\mu)^2 \xi \eta + 4+2\kappa^2(1-\mu)^2 \}.$$

Из равенства /23/ видно, что учет квадрупольного взаимодействия  $\Delta H^{(2)}$  приводит к расщеплению уровней молекулярного комплекса, то есть снимается вырождение по квантовому числу проекции полного момента мезомолекулы  $J_z$ . Вырождение по знаку  $J_z$  остается.

Величина квадрупольного расщепления - порядка  $\Delta \bar{E}^{(2)}$  и превышает 1 мэВ лишь для слабосвязанных состояний мезомолекул  $dt_\mu$  и  $dd_\mu$  с квантовыми числами  $J=v=1$ .

Значения  $\Delta \bar{E}^{(2)}$  вычислялись тем же способом, что и  $\Delta E^{(0)}$ . Величины расщепления  $\Delta E^{(2)}$ , а также  $\Delta \bar{E}^{(2)}$  и  $A | \langle N^2 J_v | J_z | \rangle$ , приведены для этих мезомолекул в табл.2.

## 5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Расчеты, проведенные в данной работе, показывают, что эффекты экранирования зарядов в слабосвязанных состояниях мезомолекул  $dd_\mu$  и  $dt_\mu$  с квантовыми числами  $J=v=1$  приводят к сдвигу уровней молекулярных комплексов  $[(dt_\mu)d2e]^*$  и  $[(dd_\mu)d2e]^*$  на ~ 25 мэВ и ~ 16 мэВ соответственно, что эквивалентно смещению резонансной температуры на ~ 200° и 100°С. Следовательно, этот эффект необходимо учитывать в прецизионных экспериментах при изучении реакций /1/.

Во всех остальных состояниях мезомолекул, где их средне-квадратичные размеры значительно меньше /см. табл.1/, эти эффекты по порядку величины не превосходят погрешности /~нескольких мэВ/ в значениях энергии уровней молекулы за счет погрешностей при численном решении нерелятивистского уравнения Шредингера для мезомолекулы /4/ и молекулы  $D_2^+$ , а также неучтенных до сих пор релятивистских эффектов /7/.

Квадрупольная поправка  $\Delta E^{(2)}$  не превосходит ~ 2 мэВ, даже для слабосвязанных состояний мезомолекул; тем не менее, это взаимодействие может привести к заметным эффектам. Прежде всего, вырождение уровней молекулярного комплекса по квантовому числу  $|J_z|$  снимается; наряду с тонким и сверхтонким расщеплением /4/ возникает "квадрупольное" расщепление уровней по  $|J_z|$ , и температурная зависимость скорости процесса резонансного образования мезомолекул  $dd_\mu$  и  $dt_\mu$  может несколько измениться. Особый интерес представляет также возможность "случайного" пересечения уровней энергии состояний с разными квантовыми числами  $(\langle N^2 J_v | J_z \rangle)$  и  $(\langle N^2 J_v | J_z \rangle)$ . Согласно нашим расчетам с точностью ~ 0,05 мэВ совпадают значения уровней комплекса  $[(dt_\mu)d2e]^*$

с квантовыми числами /11110/ и /12110/ /см. табл.2 и работу /4/ /. Этот факт интересен тем, что внешнее магнитное поле может вызвать осцилляции между данными состояниями с частотой  $\sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$ , сравнимой со скоростью девозбуждения состояний  $\sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$ , что может привести к некоторому увеличению эффективной скорости реакции синтеза в мезомолекуле  $dt_{\mu}$ .

Таблица 2

Квадрупольное расщепление уровней молекул  $[(dt_{\mu})d2e]$  и  $[(dd_{\mu})d2e]$

$$\Delta E_{dt_{\mu}}^{(2)} = 2,1 \text{ мэВ}, \Delta E_{dd_{\mu}}^{(2)} = 1,4 \text{ мэВ}, J = v = 1$$

Мезомолекула	$J$	$N$	$ g_{z_i} $	$A \langle NJv   J_z  $	$\Delta E^{(2)}$ /мэВ/
	0	1,2	0	0	0
	1	1	0 1	0,992 -0,496	2,1 -1,1
	1	2	0 1	-0,491 0,245	-1,0 0,5
$dt_{\mu}$	1	3	0 1	-0,500 0,250	-1,1 0,5
	1	4	0 1	0,100 -0,050	0,2 -0,1
	2	1,2,3	0 1 2	0,500 0,250 -0,500	1,1 0,5 -1,1
	3	1	0 1 2 3	0,400 0,300 0,0 -0,500	0,8 0,6 0 -1,1
	1/2	1,2	1/2	0	0
	3/2	1	1/2 3/2	1/2 -1/2	0,7 -0,7
$dd_{\mu}$	3/2	2	1/2 3/2	-2/5 2/5	-0,6 0,6
	5/2	1	1/2 3/2 5/2	2/5 1/10 -1/2	0,6 0,1 -0,7

Отметим, что вычисленные поправки к уровням молекулярных комплексов  $\Delta E^{(0)}$  и  $\Delta E^{(2)}$  нельзя интерпретировать как поправки к уровням мезомолекул, поскольку поле электронов и второго ядра молекулы  $D_2^+$  не является внешним и само искажается пространственным распределением заряда в мезомолекуле.

В расчетах мы заменили волновую функцию электронов возбужденного колебательного состояния  $D_2^+$  молекулы на электронную функцию основного состояния  $H_2$ , пренебрегая при этом как изотопическим сдвигом  $\sim 1$  мэВ/, так и зависимостью равновесного расстояния  $R' \approx R_d$  от  $\nu$ . Значения  $\Delta E^{(0)}$  зависят от  $R_d$  слабо, но в окрестности точки 1,4 величина  $\Delta E^{(2)}$  весьма чувствительна к изменениям  $R_d$ :

$$\frac{\delta(\Delta E^{(2)}(R_d))}{\delta R_d} \sim 0,6 \text{ мэВ.}$$

Вследствие этого, а также из-за отмеченных ранее приближений при вычислении  $\Delta E^{(2)}$ , погрешность в приводимых значениях  $\Delta E^{(2)}$  составляет 15-20%. Погрешность в значениях  $\Delta E^{(0)}$  не превышает  $\sim 5\%$ .

В заключение авторы выражают благодарность Л.И.Пономареву за интерес к работе и полезные обсуждения, С.И.Виницкому, Т.П.Пузыниной, Л.Н.Сомову, М.П.Файфману за помощь в работе.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Виницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1978, 74, с.849.
2. Быстрицкий В.М. и др. ЖЭТФ, 1979, 76, с.460; Быстрицкий В.М. и др. Письма в ЖЭТФ, 1980, 31, с.249.
3. Виницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1980, 79, с.658.
4. Бакалов Д.Д., Виницкий С.И., Мележик В.С. ЖЭТФ, 1980, 79, с.1629.
5. Бакалов Д.Д. ЖЭТФ, 1980, 79, с.1149.
6. Melezhik V.S., Ponomarev L.I. Phys.Lett., 1978, 77B, p.217.
7. Bogdanova L.N. et al. JINR, E4-80-819, Dubna, 1980; ЯФ, 1981, т.34, с.1191.
8. Пономарев Л.И., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1976, 71, с.1689.
9. Слэтер Дж. Электронная структура молекул. "Мир", М., 1965.
10. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
11. Ponomarev L.I., Vinitzky S.I. J.Phys., 1979, B12, p.567.
12. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ОИЯИ, Р4-5040, Дубна, 1970.

Рукопись поступила в издательский отдел  
25 декабря 1981 года.