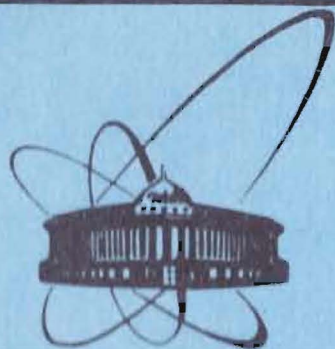


85-555



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

P4-85-555

Л.И.Меньшиков\*, Л.И.Пономарев\*, И.В.Пузынин,  
Т.П.Пузынина, Т.А.Стриж, М.П.Файфман\*

**УРОВНИ ЭНЕРГИИ  
МЕЗОМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ  
ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА**

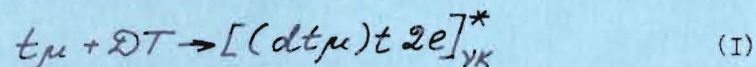
Направлено в журнал "Z. für Physik"

\* Институт атомной энергии им.И.В.Курчатова, Москва

**1985**

### I. Введение

Столкновения  $d\mu$  и  $t\mu$  - атомов с молекулами изотопов водорода  $H_2$ ,  $D_2$  и  $DT$  в реакциях типа



приводят к образованию мезомолекулярных комплексов  $[(dd\mu)p2e]$ ,  $[(dd\mu)d2e]$ ,  $[(dd\mu)t2e]$ ,  $[(dt\mu)p2e]$ ,  $[(dt\mu)d2e]$ ,  $[(dt\mu)t2e]$

в возбужденных колебательно-вращательных состояниях ( $\nu k$ ). Такие комплексы являются изотопными аналогами молекулы водорода, в которой одним из ядер является мезомолекула  $(dd\mu)^+$  или  $(dt\mu)^+$ , а другим - ядро изотопа водорода. Энергия связи, освобождающаяся при образовании мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ , передается на возбуждение вращательно-колебательных состояний ( $\nu k$ ) мезомолекулярных комплексов, и скорости таких резонансных процессов весьма велики (см., например, обзор <sup>1,2/</sup>).

Расчет скоростей резонансного образования мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ , а также определение оптимальных условий протекания процессов мюонного катализа синтеза ядер в мезомолекуле требуют знания уровней энергии молекул изотопов водорода и мезомолекулярных комплексов с точностью  $\sim 0,001$  эВ <sup>2,3,4/</sup>.

Вращательно-колебательные уровни энергии молекулы водорода  $H_2$  в основном электронном состоянии вычислены несколькими методами, из которых наиболее широко используются различные модификации вариационного метода <sup>5,6/</sup> и метода молекулярных орбиталей <sup>7/</sup> (см. также список литературы, приведенный в этих работах). Однако вычисления, выполненные с помощью этих методов, весьма громоздки, тогда как большое количество систем, аналогичных  $H_2$  и являющихся предметом исследования в

данной работе, требуют простого и достаточно эффективного метода расчета, обеспечивающего необходимую точность.

В данной работе уровни энергии молекул изотопов водорода и мезомолекулярных комплексов вычислены в адиабатическом приближении с учетом поправок на движение ядер, рассчитанных по теории возмущений с точностью  $\sim (m_e/M)^{3/2}$ , где  $m_e$  и  $M$  - масса электрона и приведенная масса ядер соответственно. При расчете использованы кривая потенциальной энергии, соответствующая терму основного электронного состояния молекулы  $H_2$ , и диагональные адиабатические поправки на движение ядер, вычисленные в работах <sup>5,8,9/</sup>. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными и прежними расчетами. Представлены таблицы вычисленных значений вращательно-колебательных уровней энергии молекулярных систем, необходимых для расчета скоростей резонансного образования мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ .

### 2. Изотопические эффекты в молекулах изотопов водорода и мезомолекулярных комплексах

Нерелятивистский гамильтониан системы, состоящей из двух ядер с массами  $M_a$  и  $M_b$ , зарядами  $Z_a = Z_b = 1$  и двух электронов с массой  $m_e$ , после отделения движения центра инерции имеет вид <sup>5/</sup>:

$$\mathcal{H} = H_e + H + h,$$

где введены обозначения (в единицах  $e = \hbar = m_e = 1$ ):

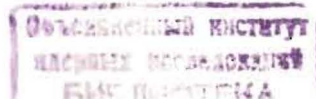
$$H_e = -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}); \quad (2)$$

$\nabla_i \equiv \nabla_{\vec{r}_i}$ ,  $\nabla_2 \equiv \nabla_{\vec{r}_2}$  - гамильтониан молекулы с фиксированными ядрами,  $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R})$  - потенциальная энергия молекулы,  $\vec{R}$  - радиус-вектор, соединяющий ядра молекулы,  $\vec{r}_i$  - радиус-вектор  $i$ -го электрона ( $i=1,2$ ) с началом в геометрическом центре отрезка  $R$ ,

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2M} \nabla^2 - \frac{1}{8M} (\nabla_1 + \nabla_2)^2, \\ h &= -\frac{\mathcal{X}}{2M} (\nabla_1 + \nabla_2) \nabla_1, \\ \nabla &\equiv \nabla_{\vec{R}}, \quad M^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}, \\ \mathcal{X} &= (M_b - M_a) / (M_b + M_a). \end{aligned} \quad (3)$$

Решение уравнения Шредингера

$$(\mathcal{H} - E)\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}) = 0, \quad (4)$$



где  $E$  - полная энергия, а  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R})$  - волновая функция молекулы, ищем в виде разложения по адиабатическому базису

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}) = \sum \Psi_n(\vec{R}) \Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R), \quad (5)$$

где волновые функции  $\Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R)$  являются действительными решениями уравнения Шредингера для молекулы водорода с неподвижными ядрами

$$H_e \Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R) = \epsilon_n(R) \Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R), \quad (6)$$

которым соответствуют термы  $\epsilon_n(R)$ . Подстановка разложения (5) в уравнение (4) и усреднение по координатам электронов приводит к следующей системе дифференциальных уравнений<sup>/5/</sup>:

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{1}{2M} \nabla^2 + \epsilon_n(R) + \frac{1}{2M} H_{nn} - E \right] \Psi_n(\vec{R}) = \\ = -\frac{1}{2M} \sum_{m \neq n} (H_{nm} + h_{nm} + \vec{B}_{nm} \nabla) \Psi_m(\vec{R}), \end{aligned} \quad (7)$$

где введены обозначения

$$H_{nm} \equiv H_{nm}(R) = -\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi_n [\nabla^2 + \frac{1}{4} (\nabla_1 + \nabla_2)^2] \Phi_m,$$

$$h_{nm} \equiv h_{nm}(R) = -\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi_n (\nabla_1 + \nabla_2) \nabla \Phi_m,$$

$$\vec{B}_{nm} \equiv \vec{B}_{nm}(R) = -\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi_n [2\nabla + \mathcal{X}(\nabla_1 + \nabla_2)] \Phi_m. \quad (8)$$

Для описания процессов резонансного образования мезомолекул достаточно знать решения системы уравнений (7) вблизи положения равновесия  $R = R_0 \approx 1,4$  а.е. молекулы водорода в основном состоянии  $n=0$ . В этом случае  $\epsilon_n(R) \approx \epsilon_n(R_0) \equiv \epsilon_n$ , полная энергия системы  $E \approx \epsilon_0$ , а колебательной энергией ядер  $\langle 0 | -\nabla^2 / 4 | 0 \rangle \sim 0,3$  эВ можно пренебречь по сравнению с электронной энергией  $\epsilon_n - \epsilon_0 \sim 10$  эВ. Кроме того, при  $m \neq n$  справедливы соотношения<sup>/10/</sup>

$$(2M)^{-1} |\Lambda_{mn}| \ll \epsilon_n - \epsilon_0,$$

где  $\Lambda_{mn} = \{ H_{mn}, h_{nm}, B_{nm} \}$ .

С учетом этих приближений систему уравнений (7) с точностью  $\mathcal{O}(M^{-2})$  можно представить в виде

$$\left[ -\frac{1}{2M} \nabla^2 + \epsilon_0(R) + \frac{1}{2M} H_{00}(R) - E \right] \Psi_0(\vec{R}) = -\frac{1}{2M} \sum_n \vec{B}_{0n} \nabla \Psi_n, \quad (9)$$

$$\Psi_n(\vec{R}) = -[2M(\epsilon_n - \epsilon_0)]^{-1} \vec{B}_{n0} \nabla \Psi_0(\vec{R}), \quad (10)$$

причем

$$\frac{1}{2M} \sum_n \vec{B}_{0n} \nabla \Psi_n \approx (F_{ik} + P_{ik} + Q_{ik}) \nabla_i \nabla_k \Psi_0, \quad (11)$$

где

$$F_{ik} = -\frac{\mathcal{X}}{2M^2} \sum_n (\epsilon_n - \epsilon_0)^{-1} [(\nabla_i)_{0n} (\nabla_k + \nabla_{2k})_{n0} + (\nabla_k + \nabla_{2k})_{0n} (\nabla_i)_{n0}], \quad (12)$$

$$P_{ik} = -\frac{1}{M^2} \sum_n (\epsilon_n - \epsilon_0)^{-1} (\nabla_i)_{0n} (\nabla_k)_{n0},$$

$$Q_{ik} = -\frac{\mathcal{X}^2}{4M^2} \sum_n (\epsilon_n - \epsilon_0)^{-1} (\nabla_k + \nabla_{2k})_{0n} (\nabla_i)_{n0},$$

$$\nabla_{nm} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi_n \nabla \Phi_m, \quad (i, k) = (x, y, z).$$

Учитывая симметрию электронной волновой функции  $\Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R)$  по отношению к инверсии координат электронов

$$\Phi_n(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2; R) = \lambda_n \Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R), \quad \lambda_n = \pm 1, \quad (13)$$

легко убедиться, что  $F_{ik} = 0$ , поскольку матричные элементы  $\nabla_{0n}$  и  $(\nabla_1 + \nabla_2)_{n0}$  не могут быть одновременно отличны от нуля в силу свойства (13). Используя соотношения

$$[\vec{r}_1 + \vec{r}_2, H_e] = \nabla_1 + \nabla_2, \quad (14)$$

$$[\vec{r}_1 + \vec{r}_2, H_e]_{nm} = (\epsilon_m - \epsilon_n) (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)_{nm}$$

и правило сумм, найдем, что

$$Q_{ik} \nabla_i \nabla_k \Psi_0 = \frac{\mathcal{X}^2}{4M^2} \nabla^2 \Psi_0. \quad (15)$$

Принимая также во внимание равенство

$$(\nabla_i)_{0n} = -(\nabla_i)_{n0} \quad (16)$$

и пренебрегая производными от угловой части  $\Psi_0(\vec{R})$ , меняющейся

более медленно по сравнению с радиальной, получим окончательно

$$\frac{1}{2M} \sum_n \vec{B}_{0n} \nabla \psi_n = \frac{1}{M^2} (\gamma + \frac{\alpha^2}{4}) R^{-2} \frac{\partial}{\partial R} (R^{-2} \frac{\partial}{\partial R}) \psi_0, \quad (17)$$

где

$$\gamma = \sum_n (\epsilon_n - \epsilon_0)^{-1} \left| \left( \frac{\partial}{\partial R} \right)_{n0} \right|^2. \quad (18)$$

После отделения угловых переменных  $(\theta, \phi)$  вектора  $\vec{R}$  в уравнении (9) радиальная часть  $\chi_{\nu k}(R)$  волновой функции

$$\psi_0(\vec{R}) = R^{-1} \chi_{\nu k}(R) Y_{k m k}(\theta, \phi), \quad (19)$$

соответствующей состоянию комплекса в колебательном состоянии  $\nu$  с орбитальным моментом  $k$ , удовлетворяет уравнению

$$\left[ -\frac{1}{2M} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{k(k+1)}{2MR^2} + \tilde{E}_0(R) + \frac{1}{2M} V(R) - \tilde{E}_{\nu k} \right] \tilde{\chi}_{\nu k} = 0, \quad (20)$$

где

$$\frac{1}{\tilde{M}} = \frac{1}{M} - \frac{2}{M^2} \left( \gamma + \frac{\alpha^2}{4} \right),$$

$$\tilde{E}_0(R) = E_0(R) + 1,$$

$$V(R) = H_{00}(R) - H_{00}(\infty) = -1 - \langle \nabla^2 \rangle - \frac{1}{2} \langle \nabla_1^2 \rangle - \frac{1}{2} \langle \nabla_2^2 \rangle, \quad (21)$$

$H_{00}(R)$  определено формулой (8), а угловые скобки обозначают усреднение по основному электронному состоянию.

В соответствии с определением потенциала в уравнении (20)  $\tilde{E}_0(R) + \frac{1}{2M} V(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0$  энергия связи  $\tilde{E}_{\nu k}$  отсчитывается от суммарной энергии  $\tilde{E}_M$  изолированных атомов водорода с ядрами  $M_a$  и  $M_b$ :

$$\tilde{E}_M = -\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1}{M_a} \right)^{-1} - \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1}{M_b} \right)^{-1} = -1 + \frac{1}{2M} + O(M^{-2}). \quad (22)$$

Уравнение (20) описывает изотопические эффекты в двухатомных молекулах с точностью  $O(M^{-2})$ . Для вычисления  $\tilde{E}_{\nu k}$  с такой же точностью необходимо решить уравнение (20) с потенциалами  $\tilde{E}_0(R)$  и  $V(R)$ , которые найдены в<sup>5,8,9/</sup>, определив предварительно параметр  $\gamma$  из экспериментальных данных, например, по молекуле  $H_2$ .

Для этого решим вначале уравнение (20) с  $\tilde{M} = M$ , которому соответствует энергия  $\tilde{E}_{\nu k}$  и волновые функции  $\tilde{\chi}_{\nu k}$ . Тогда в первом порядке теории возмущений из уравнения (20) следует соотношение

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{\nu k} &= \tilde{E}_{\nu k} - \frac{2}{M} \left( \gamma + \frac{\alpha^2}{4} \right) \langle \tilde{\chi}_{\nu k} | -\frac{1}{2M} \frac{d^2}{dR^2} | \tilde{\chi}_{\nu k} \rangle \approx \\ &\approx \tilde{E}_{\nu k} - \frac{1}{M^{3/2}} \left( \gamma + \frac{\alpha^2}{4} \right) \sqrt{\epsilon_0''(R)} \left( \nu + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь использовано гармоническое приближение для эффективного потенциала  $\epsilon_0(R)$ , справедливое при  $\nu < 5$ . (Зависимость от  $k$  проявляется только в членах  $\sim M^{-2}$ ). Согласно данным работы<sup>9/</sup>  $\epsilon_0''(R_0) = 0,33$ , поэтому из соотношения (23) следует уравнение для определения  $\gamma$ :

$$\Delta_{\nu 0} = (\tilde{E}_{\nu 0} - \tilde{E}_{00}) - (\tilde{E}_{\nu 0} - \tilde{E}_{00}) = -\frac{0,57}{M^{3/2}} \left( \gamma + \frac{\alpha^2}{4} \right) \nu. \quad (24)$$

Приравняв разности  $\tilde{E}_{\nu 0} - \tilde{E}_{00}$  экспериментально измеренным энергиям вращательно-колебательных возбуждений, из этого соотношения можно найти  $\gamma$ .

На рис. I представлена функция  $\Delta_{\nu 0}$  для значений  $\nu = 1+8$  молекул  $H_2^{11/}$ , которые при  $\nu \leq 5$  хорошо аппроксимируются прямой (24) при значении параметра

$$\gamma = 0,20 \pm 0,02. \quad (25)$$

Это значение  $\gamma$  не зависит от масс ядер молекулы с точностью  $\sim M^{-2}$ . (В работе<sup>12/</sup>, где рассмотрен случай равных ядер ( $\alpha=0$ ), получено близкое значение  $\gamma = 0,23$ ). Подставляя  $\gamma$  в уравнение (20) и решая его при заданных  $M$  и  $\alpha$ , можно найти энергии  $\tilde{E}_{\nu k}$  всех молекул изотопов водорода и соответствующих им мезомолекулярных комплексов.

При  $\tilde{M} = M$  и  $V(R) = 0$  уравнение (20) соответствует приближению Борна-Оппенгеймера. Решив его в этом приближении и вычислив энергии  $E_{\nu k}^{50}$ , аналогично (23) получим соотношение:

$$\tilde{E}_{\nu k} = E_{\nu k} + \frac{0,479}{M} - \frac{0,31 + 0,15\alpha^2}{M^{3/2}} \left( \nu + \frac{1}{2} \right),$$

которое также может быть использовано для вычисления  $\tilde{E}_{\nu k}$ . В табл. I вычисленные значения энергии диссоциации  $D_{00} = -\tilde{E}_{00}$  молекул изотопов водорода сравниваются с результатами экспериментов<sup>13/</sup> и других работ<sup>5,14/</sup>.

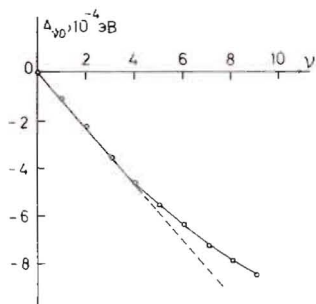


Рис.1. Разности  $\Delta\gamma_0$  между измеренными  $\tilde{E}_{\gamma 0}$  /II/ и вычисленными из уравнения (20) при  $M = M$  значениями  $\tilde{E}_{\gamma 0}$  энергий молекулы  $H_2$ . Величина  $\gamma$  определяется углом наклона прямой по формуле (24).

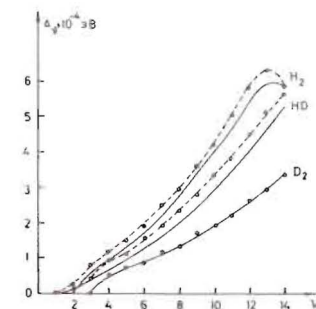


Рис.2. Разности между вычисленными значениями  $\tilde{E}_{\gamma K}$ , экспериментальными данными и другими расчетами для молекул  $H_2$ , HD и  $D_2$ . Величина  $\Delta\gamma$  равна

$$\Delta\gamma = \tilde{E}_{\gamma 0} - \tilde{E}_{00} - (\epsilon_{\gamma 0} - \epsilon_{00}),$$

где  $\tilde{E}_{\gamma 0}$  и  $\epsilon_{00}$  - значения из экспериментальных /II,15,16/ и теоретических работ /5/ (цунктир).

На рис. 2 найденные нами значения  $\tilde{E}_{\gamma 0} = \tilde{E}_{\gamma 0} - \tilde{E}_{00}$  при различных  $\gamma$  сравниваются с экспериментом /15,16/ и другими расчетами /5/ для молекул  $H_2$ , HD и  $D_2$ . Во всех случаях расхождение результатов не превышает величины  $5 \cdot 10^{-4}$  эВ, что достаточно для расчета скоростей резонансных процессов типа (I). Как и следовало ожидать, точность расчетов повышается с увеличением приведенной массы ядер  $M$ .

В таблицах 2-5 представлены результаты вычислений энергий переходов

$$E_{\gamma K} = \tilde{E}_{\gamma K} - \tilde{E}_{00} \quad (26)$$

для  $K=0(I)9$  и наиболее важных значений  $\gamma$  молекул  $H_2$ ,  $D_2$ , DT и всех мезомолекулярных систем, образующихся в резонансных реакциях типа (I).

Значение  $E_{00}$ , приведенное в таблицах, равно энергии диссоциации молекул и комплексов, отсчитанной от общего начала отсчета  $E_0 = -I$ , равного энергии двух изолированных атомов водорода с бесконечными массами ядер. Согласно этому определению и соотношению (22)

$$E_{00} = \tilde{E}_{00} + \frac{1}{2M} + O(M^{-2}). \quad (27)$$

(Такое определение  $E_{00}$  упрощает нахождение условий резонанса для реакций типа (I)).

Таблица I  
Энергии  $D_{00}$  (эВ) =  $-\tilde{E}_{00}$  диссоциации основного состояния молекул изотопов водорода

	Herzberg (1970)	Wolniewicz (1983)	Hunt et al (1984)	Данная работа
$H_2$	$4,47813 \pm 0,00005$	4,47810	4,47804	4,47815
HD	$4,51383 \pm 0,00005$	4,51377	4,51373	4,51382
$D_2$	$4,55632 \pm 0,00005$	4,55625	4,55623	4,55630
HT	-	-	4,52689	4,52702
DT	-	-	4,57267	4,57278
$T_2$	-	-	4,59093	4,59103

Приведенные значения  $D_{00}$  вычислены в работах /5/ и /13/ с учетом и без учета неадиабатических поправок соответственно.

Таблица 2

Уровни энергии  $E_{0K}$  (эВ) молекул изотопов водорода в состоянии с колебательным числом  $\nu = 0$ , отсчитанные от значения  $E_{00}$

	HD	$D_2$	DT
$M$ (ат. ед.)	1223,899	1835,240	2200,879
$E_{00}$	-4,5027	-4,5489	-4,5666
$K$			
0	0	0	0
1	0,0111	0,0074	0,0062
2	0,0331	0,0222	0,0185
3	0,0660	0,0443	0,0370
4	0,1095	0,0736	0,0615
5	0,1633	0,1100	0,0920
6	0,2271	0,1533	0,1284
7	0,3004	0,2033	0,1704
8	0,3829	0,2599	0,2180
9	0,4741	0,3227	0,2710

Таблица 3

Уровни энергии  $E_{\nu k}$  (эВ) мезомолекулярных комплексов  
 $[(dt\mu)_p 2e]$  и  $[(dd\mu)_p 2e]$

		$[(dt\mu)_p 2e]$				$[(dd\mu)_p 2e]$			
M (ат.ед.)		1535,406				1476,871			
$E_{00}$		-4,5298				-4,5254			
K \ \nu		1	2	3	4	5	6	7	8
0		0,4042	0,7908	1,1602	1,5126	1,8792	2,2021	2,5075	2,7953
1		0,4127	0,7990	1,1680	1,5201	1,8866	2,2092	2,5143	2,8017
2		0,4297	0,8153	1,1837	1,5350	1,9014	2,2233	2,5277	2,8144
3		0,4550	0,8396	1,2070	1,5574	1,9235	2,2444	2,5477	2,8334
4		0,4885	0,8718	1,2379	1,5870	1,9528	2,2723	2,5743	2,8586
5		0,5301	0,9117	1,2762	1,6237	1,9891	2,3069	2,6071	2,8897
6		0,5794	0,9591	1,3217	1,6672	2,0321	2,3479	2,6461	2,9266
7		0,6364	1,0158	1,3741	1,7174	2,0816	2,3951	2,6909	2,9690
8		0,7006	1,0754	1,4332	1,7740	2,1374	2,4482	2,7414	3,0167
9		0,7718	1,1438	1,4987	1,8367	2,1992	2,5070	2,7971	3,0694

Таблица 4

Уровни энергии  $E_{\nu k}$  (эВ) мезомолекулярных комплексов  
 $[(dt\mu)_d 2e]$  и  $[(dd\mu)_d 2e]$

		$[(dt\mu)_d 2e]$				$[(dd\mu)_d 2e]$			
M (ат.ед.)		2637,687				2469,538			
$E_{00}$		-4,5826				-4,5770			
K \ \nu		1	2	3	4	5	6	7	8
0		0,3117	0,6131	0,9043	1,1855	1,5003	1,7684	2,0261	2,2734
1		0,3167	0,6179	0,9090	1,1900	1,5050	1,7730	2,0305	2,2776
2		0,3267	0,6276	0,9184	1,1992	1,5144	1,7820	2,0393	2,2860
3		0,3417	0,6422	0,9325	1,2128	1,5284	1,7956	2,0523	2,2986
4		0,3617	0,6615	0,9513	1,2310	1,5471	1,8136	2,0697	2,3154
5		0,3864	0,6856	0,9746	1,2536	1,5703	1,8360	2,0913	2,3362
6		0,4160	0,7142	1,0024	1,2805	1,5979	1,8627	2,1171	2,3610
7		0,4503	0,7475	1,0346	1,3117	1,6299	1,8936	2,1469	2,3897
8		0,4891	0,7851	1,0711	1,3471	1,6662	1,9286	2,1807	2,4222
9		0,5324	0,8272	1,1118	1,3865	1,7066	1,9676	2,2183	2,4584

Таблица 5

Уровни энергии  $E_{\nu k}$  (эВ) мезомолекулярных комплексов  
 $[(dt\mu)_t 2e]$  и  $[(dd\mu)_t 2e]$

		$[(dt\mu)_t 2e]$				$[(dd\mu)_t 2e]$			
M (ат.ед.)		3465,048				3180,558			
$E_{00}$		-4,6041				-4,5977			
K \ \nu		1	2	3	4	5	6	7	8
0		0,2731	0,5384	0,7958	1,0456	1,3389	1,5818	1,8165	2,0432
1		0,2770	0,5421	0,7995	1,0492	1,3427	1,5854	1,8200	2,0466
2		0,2847	0,5496	0,8068	1,0562	1,3501	1,5927	1,8271	2,0534
3		0,2962	0,5608	0,8177	1,0669	1,3613	1,6035	1,8376	2,0635
4		0,3114	0,5757	0,8321	1,0810	1,3761	1,6179	1,8515	2,0871
5		0,3305	0,5942	0,8502	1,0985	1,3946	1,6356	1,8689	2,0939
6		0,3532	0,6164	0,8718	1,1195	1,4166	1,6572	1,8897	2,1140
7		0,3796	0,6421	0,8968	1,1439	1,4422	1,6820	1,9137	2,1373
8		0,4096	0,6713	0,9252	1,1715	1,4712	1,7102	1,9411	2,1638
9		0,4431	0,7039	0,9570	1,2024	1,5036	1,7417	1,9715	2,1933

#### 4. Заключение

Изложенный в данной работе простой метод учета изотопических эффектов позволяет рассчитывать уровни энергии молекул и мезомолекулярных комплексов изотопов водорода. Сравнение с экспериментальными данными и другими теоретическими расчетами демонстрирует достаточно высокую точность метода ( $\sim 10^{-4}$  эВ). Приведенные значения уровней энергии мезомолекулярных систем открывают возможность для проведения детальных расчетов скоростей резонансного образования мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ . Метод может быть использован также для расчета характеристик других асимметричных по массам молекул.

Авторы благодарны Винишкому С.И., Мележику В.С., Радцигу А.А. и Сомову Л.П. за помощь на различных этапах работы.

Приложение

Уравнение (20), которое можно представить в виде

$$\left[ \frac{d^2}{dR^2} + \lambda_{VK} - \frac{\kappa(\kappa+1)}{2MR^2} - 2MV(R) \right] \chi_{VK}(R) = 0, \quad (П1)$$

где

$$\lambda_{VK} / 2M = \{ \bar{E}_{VK}, \tilde{E}_{VK} \},$$

с различными эффективными потенциалами  $V(R)$  решалось численно. Условия регулярности и ограниченности волновых функций  $\chi_{VK}(R)$  на полуоси  $0 \leq R < \infty$  заменялись граничными условиями

$$\chi_{VK}(0) = \left( \frac{d}{dR} + \sqrt{-\lambda_{VK}} \right) \chi_{VK}(\bar{R}) = 0 \quad (П2)$$

на отрезке  $0 \leq R \leq \bar{R} = 10$ . Условие при  $R = \bar{R}$  соответствует экспоненциальному убыванию решений при  $R \rightarrow \infty$ .

Потенциал  $V(R)$  задан на отрезке  $0 \leq R \leq 10$  в виде таблицы с неравномерным шагом. Для непрерывного продолжения потенциала на интервале  $0 \leq R \leq 10$  применяются кубическая сплайн-интерполяция<sup>/17/</sup> на отрезке  $0 \leq R \leq 9$

$$\tilde{V}(R) = S_{\Delta}(V, R) \quad (П3)$$

и интерполяция на отрезке  $9 \leq R \leq 10$  с помощью функции

$$\tilde{V}(R) = 196,0311R^{-7} \exp(-0,0883825R). \quad (П4)$$

Ошибка в собственных значениях при такой замене для задач с потенциалами, имеющими асимптотику при  $R \rightarrow \infty$  вида  $R^{-m} e^{-cR}$ , согласно<sup>/18/</sup> убывает не медленнее, чем  $e^{-c(\lambda_{VK})\bar{R}}$ , где  $c(\lambda_{VK}) \gg 0$  - константа, не зависящая от  $\bar{R}$ . В первом приближении ошибку для собственного значения, обусловленную заменой  $V$  на  $\tilde{V}$ , можно оценить с помощью соотношения<sup>/19/</sup>

$$|\Delta \lambda_{VK}| \approx \left| \int_0^{\bar{R}} \Delta V(R) \chi_{VK}^2(R) dR \right| \sim h_T^3, \quad (П5)$$

где  $\Delta V = V - \tilde{V}$ ,  $h_T$  - шаг таблицы, т.е.  $\Delta \lambda_{VK} \sim 10^{-3}$ .

Задача (П1)-(П2) при  $V(R) = \tilde{V}(R)$  аппроксимировалась схемой Пумера<sup>/20/</sup>, обеспечивающей точность результата  $O(h^4)$ , где  $h$  - шаг разностной сетки.

Таким образом, при малых значениях  $h$  погрешность искомого собственного значения, обусловленная интерполяцией исходного потенциала,

определяется выражением (П5) и для величин  $E_{VK}$  не превышает  $2 \cdot 10^{-5}$  эВ. В таблице 6 приведены значения  $\tilde{E}_{0k}$  для молекулы водорода, вычисленные на последовательности вдвое сгущающихся сеток. Видно, что сходимость разностного решения уравнения (П1) имеет порядок  $h^4$ . Здесь же для сравнения приведены экспериментальные значения энергии, взятые из работы<sup>/11/</sup>. Из таблицы видно, что точность расчета уровней энергии лучше, чем  $\sim 10^{-3}$  эВ.

Таблица 6

Характеристики разностной схемы решения уравнения (П1) для молекулы  $H_2^+$

$\nu$	$E_{\text{ЭКСП}}$	$E_h$	$E_{2h}$	$E_{4h}$	$\sigma$
0	0	0	0	0	
1	0,5159	0,51592216	0,51592212	0,51592153	20,0
2	1,0027	1,00268545	1,00268533	1,00268342	19,0
3	1,4608	1,46091570	1,46091543	1,46091010	17,6
4	1,8908	1,89092965	1,89092916	1,89092140	19,5
5	2,2927	2,29287257	2,29287182	2,29285978	16,1
6	2,6664	2,66658847	2,66658742	2,66657060	16,0
7	3,0113	3,01159191	3,01159056	3,01156886	16,7
8	3,3267	3,32696063	3,32695900	3,32693286	16,3
9	3,6110	3,61131862	3,61131678	3,61128721	16,4

x) Значения энергии приведены в эВ. Величина  $\sigma = (E_h - E_{2h}) / (E_{2h} - E_{4h})$ .

Литература

1. Proc. of the Third. Int. Conf. on Emerging Nucl. Energy. Syst. June 7-9, 1983, Helsinki. Atomkernenergie, 175, 1983.
2. Bracci L., Fiorentini G. Phys. Rep., 1982, 86, 171.
3. Весман Э.А. Письма в ЖЭТФ, 1967, 5, 113.
4. Винцкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1978, 74, 849.
5. Wolniewicz L. J.Chem.Phys., 1983, 78, 6173.
6. Bishop D.M., Cheung L.M. Phys. Rev., 1978, A18, 1846.
7. Roothaan C.C. Rev. Mod. Phys., 1960, p. 179, 32.
8. Kolos W., Wolniewicz L. J.Chem.Phys., 1964, 41, 3663.
9. Kolos W., Wolniewicz L. J.Chem.Phys., 1965, 43, 2429.

10. Давыдов А.С. Квантовая механика. М., "Наука", 1973.
11. Dabrowski I. Can. J. Phys., 1984, 62, 1656.
12. Bunker P.R., McLarnon C.J., Moss R.E. Mol. Phys., 1977, 33, 425.
13. Herzberg G.J. Mol. Spectrosc., 1970, 33, 147.
14. Hunt J.L., Poll J.D., Wolniewicz L. Can J. Phys., 1984, 62, 1719.
15. Dabrowski I., Herzberg G. Can. J. Phys. 1976, 54, 525.
16. Bredhol N., Herzberg G. Can. J. Phys. 1973, 51, 867.
17. Альберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложения. "Мир", М., 1972.
18. Ляшенко Е.П. В сб. "Вычислит. и прикладная матем.", вып. 23, Изд-во КГУ, Киев, 1974, с. 71-78.
19. Люстерник Л.А., Соболев В.И. Элементы функционального анализа. "Наука", М., 1965.
20. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Под ред. Холла Дж. и Уатта Дж. "Мир", М., 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел  
19 июля 1985 года.

Меньшиков Л.И. и др.

P4-85-555

Уровни энергии мезомолекулярных комплексов изотопов водорода

Развит метод расчета в адиабатическом приближении уровней энергии молекулярных систем типа молекул изотопов водорода. Вычислены уровни энергии молекул изотопов водорода и мезомолекулярных комплексов, необходимые для расчета скоростей резонансного образования мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ . Полученные результаты и экспериментальные данные согласуются с хорошей точностью  $\sim 0,5 \cdot 10^{-4}$  эВ.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С. Виноградовой

Menshikov L.I. et al.

P4-85-555

Energy Levels of Hydrogen Isotope Mesic Molecule Complexes

The method for calculating the isotope corrections to energy levels of diatomic mesic molecular systems is developed in adiabatic approximation. The energy levels of the molecules of hydrogen isotopes and mesic molecular complexes, which are necessary for calculating of the resonant formation rates of mesic molecules  $dd\mu$  and  $dt\mu$ . The obtained values and experimental data are in good agreement with an accuracy of  $\sim 0.5 \cdot 10^{-4}$  eV.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985