объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P4-85-952

Д.Д.Бакалов, В.С.Мележик

ПОПРАВКИ НА КОНЕЧНЫЕ РАЗМЕРЫ МЕЗОМОЛЕКУЛ К УРОВНЯМ ЭНЕРГИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ $\left[(dd\mu)dee\right]$ И $\left[(dt\mu)dee\right]$

Направлено в журнал "Zeitschrift für Physik"

1985

I. Введение

Описание процессов резонансного образования мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в столкновениях атомов $d\mu$ и $t\mu$ с молекулами дейтерия D_2 [I],

$$d\mu + D_2 \to [(dd\mu)dee] , \quad t\mu + D_2 \to [(dt\mu)dee], \qquad (I)$$

является одной из центральных проблем в изучении мюонного катализа [2]. Для количественного описания зависимости скорости реакций (I) от температуры необходимо знать уровни энергии молекулярных комплексов $[(dd\mu)dee]$ и $[(dt\mu)dee]$ с точностью ~10^{-3} эВ. Поскольку характерные размеры мезомолекул намного меньше размеров молекулярных комплексов, уровни энергии комплексов можно представить в виде ряда теории возмущений, используя в качестве начального приближения энергии и волновые функции молекул, отличающихся от комплексов заменой мезомолекулы точечной частицей той же массы и заряда, и рассматривая как возмущение эффекты взаимодействия распределения зарядов в мезомолекуле с электронами и ядром молекулы:

$$E_{MD} = E_{M_oD} + \Delta E , \quad \Delta E = \Delta E_{(2)} + \Delta E_{(4)} + \dots , \quad \Delta E_{(n)} = O(\eta^n) . \qquad (2)$$

Здесь мезомолекула $dt\mu$ (либо $dd\mu$) обозначена M , молекулярный комплекс – MD , точечная частица, заменяющая мезомолекулу,– M_o ; получающаяся при этом молекула – M_oD , а соответствующие уровни энергии – E_{MD} и E_{M_oD}, и введен малый параметр разложения $\eta \ll 1$, где η – отношение размеров M к размерам M_oD . Эффекты взаимодействия распределений зарядов в мезомолекуле M и в молекуле M_oD, названные нами электронным экранированием, уже рассматривались в предыдущих работах [3,4]. В [3] дана формулировка задачи и вычислены в первом порядке по оператору возмущения поправки $\Delta E_{(2)}$ к энергии молекулярных комплексов $[(dd\mu)dee]$ и $[(dt\mu)dee]$. Далее, в работе[4], на основе красивых физических соображений, было показано, что в пределе малой энергии связи мезомолекулы $|\mathcal{E}_M| \ll |E_I|$, где E_I - потенциал ионизации молекулы $M_o D$, поправка второго порядка по оператору возмущения компенсирует поправку первого порядка, так что $\Delta E = o(\eta^2)$. Однако из-за использования асимптотических выражений для волновых функций мезомолекулы точность приведенных в[4] результатов оценить трудно, поэтому их нельзя непосредственно использовать в прецизионных вычислениях ΔE. В данной работе для достижения требуемой точности мы вычислили E_{MD} во втором порядке по оператору возмущения с использованием волновых функций мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ и состояний рассеяния $d\mu + d$, $t\mu + d$ и $d\mu + t$, найденных при численном решении задачи трех тел[6,7].

2. Постановка задачи

В последующем изложении для определенности рассмотрим мезомолекулу $M = dt\mu$. Гамильтонианы молекулярного комплекса MD, молекулы $M_o D$ и мезомолекулы M (H_{MD}, $H_{M_o D}$ и H_M) связаны соотношением

$$H_{MD} = H_{M_o D} + H_M + V,$$

где оператор возмущения V (переводящий уровни $M_o D$ в уровни MD) имеет вид

$$V = e^2 \sum_k z_k \Big(\sum_{c=d,t,\mu} z_c / |\vec{R}_c - \vec{\rho}_k| - 1/\rho_k \Big).$$

Здесь $\vec{R}_c$ и $\vec{\rho}_k$ - соответственно радиус-векторы частиц мезомолекулы M (ядер d и t и мюона μ) и частиц молекулы $M_o D$ (электронов и второго ядра), отсчитываемые от центра масс мезомолекулы, совпадающего с ядром M_o молекулы $M_o D$; z_c и z_k - заряды соответствующих частиц, а индекс k нумерует все частицы $M_o D$ за исключением ядра M_o. Оператор имеет следующее разложение по мультиполям[3]:

$$V = \sum_{\ell=0}^{\infty} V_\ell, \quad V_0 = e^2 \sum_{k,c} z_k z_c\, \theta(R_c - \rho_k)(1/R_c - 1/\rho_k);$$

$$V_1 = -\sum_k \vec{\mathcal{E}}_k \cdot \vec{d} + V_1', \quad \vec{\mathcal{E}}_k = -e z_k \vec{\rho}_k / \rho_k^3, \quad \vec{d} = e \sum_c z_c \vec{R}_c;$$

$$V_1' = e^2 \sum_{k,c} z_k z_c\, \theta(R_c - \rho_k)\Big(\frac{1}{R_c^3} - \frac{1}{\rho_k^3}\Big); \quad V_2 = -\frac{3e^2}{2} \sum_{k,c} z_k z_c \sum_{i,j=1,2,3} \Big(\rho_{ki}\rho_{kj} - \frac{\delta_{ij}}{3}\vec{\rho}_k^{\,2}\Big) \frac{\big(R_{ci}R_{cj} - \frac{\delta_{ij}}{3}\vec{R}_c^{\,2}\big)}{(\max(R_c,\rho_k))^5}.$$

С точностью до членов $O(\eta^4)$ поправку ΔE можно вычислить, используя следующие приближенные выражения для операторов возмущения V_0, V_1 и V_2:

$$\hat{V}_0 = -\frac{2\pi}{3} e^2 \sum_k z_k \delta(\vec{\rho}_k) \sum_c z_c \vec{R}_c^{\,2}, \quad \hat{V}_1 = -\sum_k \vec{\mathcal{E}}_k \cdot \vec{d},$$

$$\hat{V}_2 = -\frac{3e^2}{2} \sum_k z_k \sum_{ij} \Big(\rho_{ki}\rho_{kj} - \frac{\delta_{ij}}{3}\vec{\rho}_k^{\,2}\Big)/\rho_k^5 \sum_c \Big(R_{ci}R_{cj} - \frac{\delta_{ij}}{3}\vec{R}_c^{\,2}\Big). \tag{3}$$

Нетрудно убедиться, что операторы $\hat{V}_0$ и $\hat{V}_2$ - порядка $O(\eta^2)$, а $\hat{V}_1$ - порядка $O(\eta)$. Отсюда следует, что вклад порядка $O(\eta^2)$ в ΔE дают лишь поправки первого порядка от операторов монопольного и квадрупольного взаимодействия $\hat{V}_0$ и $\hat{V}_2$:

$$\Delta E_0^{(1)} = \langle 00 | \hat{V}_0 | 00 \rangle, \quad \Delta E_2^{(1)} = \langle 00 | \hat{V}_2 | 00 \rangle$$

и поправка второго порядка от оператора дипольного взаимодействия $\hat{V}_1$:

$$\Delta E_1^{(2)} = \sum_{\nu N} |\langle 00 | \hat{V}_1 | \nu N \rangle|^2 / (E_0 - E_\nu + \mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_N), \tag{4}$$

так что

$$\Delta E = \Delta E_0^{(1)} + \Delta E_1^{(2)} + \Delta E_2^{(1)} + O(\eta^4). \tag{5}$$

Здесь индексы ν и N нумеруют векторы из полных систем собственных состояний гамильтонианов $H_{M_o D}$ и H_M, а E_ν и $\mathcal{E}_N$ - соответствующие им уровни энергии; при этом $\nu = 0$ есть основное состояние молекулы $M_o D$, а $N = 0$ - слабосвязанное состояние $dt\mu$ с квантовыми числами $J = v = 1$[8]. Введем величину

$$\Delta E_1^{(2)*} = \sum_{\nu N} |\langle 00 | \hat{V}_1 | \nu N \rangle|^2 / (E_0 - E_\nu), \tag{6}$$

которую, следуя[4], можно представить в виде

$$\Delta E_1^{(2)*} = \langle 00 | -\frac{2\pi}{3} \sum_k z_k \delta(\vec{\rho}_k) \vec{d}^{\,2} | 00 \rangle + \frac{3e^2}{2} \sum_{i,j=1}^{3} \langle 00 | \Big(d_i d_j - \frac{1}{3}\delta_{ij}\vec{d}^{\,2}\Big) \cdot$$

$$\cdot \sum_k z_k \Big(\rho_{ki}\rho_{kj} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\vec{\rho}_k^{\,2}\Big)/\rho_k^5 | 00 \rangle.$$

Тогда из (5) получаем альтернативное представление для поправки ΔE

$$\Delta E \equiv \Delta \tilde{E},$$

где

$$\Delta\tilde{E} = \Delta\tilde{E}_0^{(1)} + \Delta\tilde{E}_2^{(1)} + \Delta\tilde{E}_1^{(2)} = (\Delta E_0^{(1)} + \Delta E_2^{(1)} + \Delta E_1^{(2)*}) + (\Delta E_1^{(2)} - \Delta E_1^{(2)*}),$$

$$\Delta\tilde{E}_0^{(1)} = \langle 00 | \frac{2\pi}{3} \sum_k z_k \delta(\vec{\rho}_k) \Big(\sum_c z_c \vec{R}_c^{\,2} - \vec{d}^{\,2}\Big) | 00 \rangle, \tag{7}$$

$$\widetilde{\Delta E}_2^{(1)} = \langle 00 | -\frac{1}{2}\sum_{i,j}\sum_k Z_k (3\rho_{ki}\rho_{kj} - \delta_{ij}\vec{\rho}_k^{\,2})/\rho_k^5 \Big\{ \sum_c Z_c (R_{ci}R_{cj} - \frac{\delta_{ij}}{3}\vec{R}_c^{\,2}) - (d_i d_j - \frac{\delta_{ij}}{3}\vec{d}^{\,2}) \Big\} | 00 \rangle ,$$

$$\Delta \widetilde{E}_1^{(2)} = \Delta E_1^{(2)} - \Delta E_1^{(2)*} = \sum_{\nu N} |\langle 00 | -\sum_k \vec{\mathcal{E}}_k \cdot \vec{d} \, | \nu N \rangle|^2 \left(1/(E_0 - E_\nu + \varepsilon_0 - \varepsilon_N) - 1/(E_0 - E_N) \right). \qquad (7)$$

В работе[4] показано, что в пределе малой энергии связи мезомолекулы M происходит компенсация поправок $\Delta E_{0,2}^{(1)}$ и $\Delta E_1^{(2)}$ в том смысле, что $\Delta \widetilde{E}_{0,2}^{(1)} = o(\eta^2)$, $\Delta \widetilde{E}_1^{(2)} = o(\eta^2)$. Поскольку в представлении (7) компенсация вкладов первого и второго порядка теории возмущений происходит еще до усреднения по волновым функциям системы, оно предпочтительнее для численных расчетов.

3. Результаты и обсуждение

Основная трудность при вычислении вклада $\hat{V}_1$ в ΔE во втором порядке теории возмущений связана с суммированием по спектру возбужденных состояний молекулы $M_0 D$, что практически неосуществимо из-за незнания волновых функций возбужденных состояний молекулы. Однако, как показано в работах[4,5], с точностью до 10% величины $\Delta E_0^{(1)}$, $\Delta E_1^{(2)}$, $\Delta \widetilde{E}_0^{(1)}$ и $\Delta \widetilde{E}_1^{(2)}$ можно получить из аналогичных поправок $\Delta E_{0A}^{(1)}$, $\Delta E_{1A}^{(2)}$, $\Delta \widetilde{E}_{0A}^{(1)}$ и $\widetilde{\Delta E}_{1A}^{(2)}$ к уровням энергии атомов $[M_0 e]$ домножением на численный коэффициент 1,45, равный отношению электронных плотностей вблизи ядра M_0 в молекуле $[M_0 Dee]$ и в атоме $[M_0 e]$. Отметим, что этим способом поправки на квадрупольное взаимодействие $\Delta E_2^{(1)}$ к уровням энергии комплекса $[M_0 Dee]$ вычислить нельзя, потому что в сферически симметричном основном состоянии атома $[M_0 e]$ среднее значение $\hat{V}_2$ (3) тождественно равно нулю: $\langle 00 | \hat{V}_2 | 00 \rangle_{[M_0 e]} \equiv 0$. Из приведенных в[3] оценок на величину $\Delta E_2^{(1)}$, однако, следует, что скомпенсированная квадрупольная поправка $\Delta \widetilde{E}_2^{(1)} \sim 10^{-4}$ эВ; поэтому в дальнейшем мы будем пренебрегать вкладом квадрупольного взаимодействия $\hat{V}_2$.

При вычислении $\Delta E_{1A}^{(2)}$ во втором порядке теории возмущений учитывался вклад следующих промежуточных состояний $|\nu N\rangle\langle \nu N|$: сумма по индексу ν содержала p-волновые состояния дискретного (с главным квантовым числом $n \leq 30$) и непрерывного (с волновым числом k, $0 \leq k < \infty$) спектра атома $[M_0 e]$; сумма по N включала s-($J = 0$) и d-($J = 2$) волновые состояния непрерывного спектра систем $t\mu + d$ ($c_0 = t$) и $d\mu + t$ ($c_0 = d$) с волновым числом q, $0 \leq q < \infty$ (без учета мюонных возбуждений, вклад которых подавлен из-за большого значения энергии возбуждения мюона $|\varepsilon_N - \varepsilon_0| \sim 2{,}5$ кэВ в знаменателе выражения (4)) и дискретные уровни мезомолекулы $dt\mu$ с квантовыми числами $(J v) = (00), (01), (20)$:

$$\Delta E_{1A}^{(2)} = -\frac{1}{9}\left(\sum_{n=2}^{30} + \int_0^\infty dk \right) \sum_{c_0 = t,d} \sum_{J=0,2} \left(\sum_v + \int_0^\infty dq \right) \frac{|\langle \nu \| \vec{\mathcal{E}} \| 0 \rangle|^2 \, |\langle N \| \vec{d} \| 0 \rangle|^2}{E_0 - E_\nu + \varepsilon_0 - \varepsilon_N} . \qquad (8)$$

Для приведенных матричных элементов оператора электрического поля $\vec{\mathcal{E}}$ в атоме $[M_0 e]$ использовались выражения

$$\langle \nu \| \vec{\mathcal{E}} \| 0 \rangle = \begin{cases} 4(n-1)^{n-1/2} / \left(n^{1/2} (n+1)^{n+1/2} \right), \ \nu = (nl) \text{ — дискретный спектр, } l = 1 \\ 4\sqrt{\dfrac{k}{k^2+1}} \cdot \dfrac{e^{-(2\,\mathrm{arctg}\,k)/k}}{\sqrt{1 - e^{-2\pi/k}}}, \ \nu = (kl) \text{ — непрерывный спектр. } l = 1 \end{cases}$$

Для приведенных матричных элементов оператора дипольного момента мезомолекулы $\vec{d}$ между связанным состоянием $|0\rangle = |J = v = 1\rangle$ и состояниями рассеяния $\langle N| = \langle c_0 q J|$ или другими дискретными состояниями $\langle N| = \langle J v|$ использовались выражения

$$\langle N \| \vec{d} \| 0 \rangle = \beta_J \sum_{c=t,d} \int_0^\infty dR \, \chi_c^{c_0 q J}(R) \, D_c(R) \, \chi_c^{v=1 J=1}(R); \quad \beta_0 = 1, \ \beta = \sqrt{2}, \qquad (9)$$

где $D_c(R)$ — матричный элемент дипольного момента $\vec{d}$ в адиабатическом представлении[9], $\chi_c^{vJ}(R)$ и $\chi_c^{c_0 q J}(R)$ — волновые функции мезомолекулы $dt\mu$ и системы $t\mu + d$ либо $d\mu + t$ в адиабатическом представлении, причем состояния рассеяния нормированы условием (δ — фаза рассеяния): $\chi_{c=c_0}^{c_0 q J}(R) \underset{qR \gg 1}{\approx} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(qR + \delta)$. При вычислении $\Delta E, \Delta \widetilde{E}$ использовались волновые функции мезомолекул $dd\mu$, $dt\mu$, найденные в работе[6] при численном решении задачи трех тел в адиабатическом представлении, и волновые функции систем $t\mu + d$, $d\mu + t$ и $d\mu + d$, полученные решением задачи рассеяния в двухуровневом приближении адиабатического представления[7,8]. Численные результаты представлены в табл.1.

Как уже отмечалось в п.2, из двух выражений для поправки ΔE (5) и $\Delta \widetilde{E}$ (7) более подходящим для численного расчета является (7). Ошибка в значениях $\Delta \widetilde{E}_{0A}^{(1)}$ и $\Delta \widetilde{E}_{1A}^{(2)}$ обусловлена погрешностями при вычислении $\chi_c^{Jv}(R)$ при больших $R > 40$[6] и использованием двухуровневого приближения при решении задачи рассеяния[7] и в общей сложности не превосходит I0% для $dd\mu$ и 20% для $dt\mu$, поэтому погрешность в значении $\widetilde{\Delta E}_A$ не превышает 0,2 мэВ. Относительные погрешности в значениях $\Delta E_{0A}^{(1)}$ и $\Delta E_{1A}^{(2)}$ также не превышают I0% и 20% соответственно: это приводит, однако, к погрешности ~ 4 мэВ в значении ΔE_A для $dt\mu$ (5). Сравнение обоих значений ΔE_A и $\widetilde{\Delta E}_A$ подтверждает, что погрешность $\widetilde{\Delta E}_A \lesssim$ I0^{-3} эВ.

Т а б л и ц а I. Эффекты электронного экранирования в $[(dt\mu)e]$ и $[(dd\mu)e]$ в мэВ

$[(dt\mu)e]$		$[(dd\mu)e]$	
$\Delta E_{0A}^{(1)} = +20,07$	$\widetilde{\Delta E}_{0A}^{(1)} = -I,97$	$\Delta E_{0A}^{(1)} = +II,38$	$\widetilde{\Delta E}_{0A}^{(1)} = -I,98$
$\Delta E_{1A}^{(2)} = -I8,26$	$\widetilde{\Delta E}_{1A}^{(2)} = +2,78$	$\Delta E_{1A}^{(2)} = -I0,73$	$\widetilde{\Delta E}_{1A}^{(2)} = +2,67$
$\Delta E_A = +I,8I$	$\widetilde{\Delta E}_A = +0,8I$	$\Delta E_A = +0,65$	$\widetilde{\Delta E}_A = +0,69$

Домножая величины $\widetilde{\Delta E}_A$ из табл.I на отношение электронных плотностей вблизи ядра в молекуле и атоме водорода I,45 /4,5/, окончательно получаем для поправок к уровням энергии молекулярных комплексов $[(dd\mu)dee]$ и $[(dt\mu)dee]$, обусловленных конечными размерами мезомолекул, следующие значения:

$$\Delta E\,[(dt\mu)dee] = I,2 \text{ мэВ} \pm 0,6 \text{ мэВ}; \quad \Delta E\,[(dd\mu)dee] = I,0 \text{ мэВ} \pm 0,3 \text{ мэВ}.$$

Полученные в данной работе значения $\Delta E[(dt\mu)dee]$ и $[\Delta E[(dd\mu)dee]$ подтверждают предсказанный в /4/ эффект аномально слабого электронного экранирования в слабосвязанных состояниях мезомолекул $dt\mu$ и $dd\mu$. Компенсация поправок первого и второго порядка теории возмущений оказалась даже более полной, чем ожидалось; это обусловлено главным образом тем, что в области резонансных энергий (см. табл.2 Приложения) волновые функции рассеяния /7/ заметно отличаются от использованных в /4/ плоских волн фазовым сдвигом $\delta \sim 0,25$.

Результаты данной работы можно использовать при описании резонансного образования мезомолекул.

4. Приложение

Для сравнения с полуаналитическими результатами работы /4/ приведем часть промежуточных численных результатов, полученных нами.

Численные значения приведенных матричных элементов $\langle c_0 q J \| d \| 0 \rangle$ (9) как функции импульса относительного движения $d\mu + d$ (соответственно $t\mu + d$, $d\mu + d$) в мезоатомных единицах /8/ приведены в таблице 2.

Т а б л и ц а 2. Приведенные матричные элементы $\langle c_0 q J \| d \| 0 \rangle$ как функция q

q	$d\mu+d$, J=0	$d\mu+d$, J=2	Ниже порога $d_\mu+t$, $t\mu+d$, J=0	$t\mu+d$, J=2	Выше порога $d_\mu+t$ q	$d\mu+t$, J=0	$d\mu+t$, J=2
0,005	2,3	0,0	6,0	0,I	.4464	0,0	0,0
0,0I	4,6	0,I	II,4	0,5	.4465	0,I	0,0
0,02	8,5	0,6	I9,I	3,I	.4468	0,2	0,0
0,03	II,4	I,7	22,3	7,8	.4474	0,3	0,0
0,05	I4,0	5,5	20,7	I7,I	.449	0,5	0,0
0,07	I3,7	9,6	I6,5	2I,7	.452	0,6	0,I
0,09	I2,3	I2,6	I3,I	22,6	.455	0,7	0,I
0,II	I0,8	I4,2	I0,7	2I,7	.460	0,9	0,2
0,I5	8,2	I4,8	7,6	I8,8	.47I	I,I	0,6
0,I9	6,5	I3,6	5,8	I5,8	.485	I,3	I,I
0,23	5,4	I2,0	4,7	I3,2	.502	I,4	I,8
0,27	4,6	I0,3	3,9	I0,9	.522	I,5	2,5
0,3I	4,0	9,0	3,4	9,I	.543	I,5	3,2
0,35	3,5	7,9	2,9	7,4	.567	I,6	3,5
0,43	2,8	6,I	2,3	3,9	.620	I,5	3,3
0,67	I,5	3,2	–	–	–	–	–

Для интегралов $\int dq\,|\langle N \| d \| 0 \rangle|^2$ (9) (в мезоатомных единицах) и для вкладов в $\Delta E_{1A}^{(2)*}$ от суммы по дискретному и интеграла по непрерывному спектру атома $[M_0 e]$ получены следующие значения:

	$d\mu + d$, J=0	$d\mu + d$, J=2	$t\mu + d$, J=0	$t\mu + d$, J=2	$d\mu + t$, J=0	$d\mu + t$, J=2
Интегралы $\int dq\,|\langle N \| d \| 0 \rangle|^2$	27,88	58,24	42,03	89,99	I,56	6,78
Вклад в $\Delta E^{(2)*}$ н.сп.	–4,0	–8,5	–5,9	–I2,6	–0,2	–0,7
– " – дискр.сп.(в мэВ)	–0,3	–0,6	–0,4	–0,9	–0,0	–0,0

Наконец, для иллюстрации сходимости интегралов и сумм в выражении (8) для поправки $\Delta E_{1A}^{(2)}$ во втором порядке теории возмущений, приведем частичные суммы ряда (8) по главному квантовому числу атома n при суммировании вплоть до разных n_{max} и значения интегралов по волновому числу k (8), обрезанных при разных верхних пределах интегрирования.

Т а б л и ц а 3. Сходимость суммы по дискретному и непрерывному спектру атома $[M_o e]$ в выражении (8) для поправки второго порядка теории возмущений $\Delta E^{(2)}_{1A}$ (Волновое число k – в атомных единицах, соответствующая $k_{max}(n_{max})$ энергия E_{max} –в эВ, а вклад в $\Delta E^{(2)}_{1A}$ – в мэВ).

		E_{max}	$d\mu+d(J=0)$	$d\mu+d(J=2)$	$t\mu+d(J=0)$	$t\mu+d(J=2)$
Дискретный спектр $(2 \le n \le n_{max})$						
n_{max}:	2	-3,4	-0,I	-0,I	-0,2	-0,3
	I0	-0,I	-0,2	-0,2	-0,3	-0,6
	30	-0,0	-0,2	-0,2	-0,3	-0,6
Непрерывный спектр $(0 < k < k_{max})$						
k_{max}	I,5	30	-0,6	-I,0	-I,I	-2,I
	3,I	I3I	-I,4	-2,4	-2,4	-4,6
	I4,3	278I	-2,8	-5,I	-4,6	-9,3
	35,I	I6755	-3,2	-5,9	-5,2	-I0,5
	I66,3	376000	-3,4	-6,4	-5,5	-II,2

В заключение авторы выражают благодарность Л.И. Меньшикову и Л.И. Пономареву за разностороннюю помощь и многочисленные обсуждения.

Л и т е р а т у р а

1. С.И. Виницкий и др. ЖЭТФ, т. 74 (I978),849.
2. L.I. Ponomarev. Proc. of the III Int.Conf. on Emerging Nucl. Energy Systems. Helsinki 7-9 June, 1983, Atomkernenergie. - Kerntechnik, 43 (1983),175; Contrib. Muon-Catalyzed Fusion Workshop, Jackson, 7-8 June 1984.
3. Д.А. Бакалов, В.С. Мележик. Сообщение ОИЯИ, Р4-8I-835, I98I, Дубна.
4. Л.И. Меньшиков. Препринт ИАЭ. IAE 4I24/2, I985.
5. Л.И. Меньшиков, М.П. Файфман. Препринт ИАЭ. 38I9/I2, I983.
6. A.D. Gocheva. et al. Phys.Letters, v.153B (1985) p.349.
7. В.С. Мележик. Препринт ОИЯИ, Р4-84-643, I984, Дубна.
8. С.И.Виницкий, Л.И. Пономарев. ЭЧАЯ, т.I3 (I982) стр. I336.
9. Д.Д. Бакалов. Препринт ОИЯИ, PII-83-876, I983.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 декабря I985 года.

Бакалов Д.Д., Мележик В.С. Р4-85-952

Поправки на конечные размеры мезомолекул к уровням энергии молекулярных комплексов $[(dd\mu)dee]$ и $[(dt\mu)dee]$

Во втором порядке теории возмущений вычислены поправки к уровням энергии молекулярных комплексов $[(dd\mu)dee]$ и $[(dt\mu)dee]$, , обусловленные неточечность мезомолекул. В расчетах использованы волновые функции мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ и состояний рассеяния $d\mu+d$, $t\mu+d$ и $d\mu+t$, найденные при численном решении задачи трех тел в адиабатическом представлении. Подтвержден предсказанный ранее другими авторами эффект аномально слабого электронного экранирования в слабосвязанных состояниях мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$. Вычисленные значения $\Delta E_{dd\mu}$ = 1,0±0,3 мэВ, $\Delta E_{dt\mu}$ = 1,2±0,6 мэВ следует принимать во внимание при вычислении скорости резонансного образования мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод автора

Bakalov D.D., Melezhik V.S. P4-85-952

Muonic Molecule Finite Size Contribution to Molecular Complex $[(dd\mu)dee]$ and $[(dt\mu)dee]$ Energy Levels

Molecular complex $[(dd\mu)dee]$ and $[(dt\mu)dee]$ energy levels are close to the energy levels of the corresponding hydrogen isotope molecules with point like nuclei, the small difference between them ΔE being due to muonic molecule finite size. We have calculated ΔE in second order of perturbation theory using the wave functions of $dd\mu$ and $dt\mu$ molecules and $d\mu+d$, $t\mu+d$, $d\mu+t$ scattering states, calculated in the adiabatic representation of the three-body Coulomb problem. Our numerical results have demonstrated the almost complete compensation of first- and second-order contributions to ΔE in the weakly bound states of $dd\nu$ and $dt\mu$ as predicted by other authors. The numerical values $\Delta E(dd\mu)$ = 1.0±0.3 meV, $\Delta E(dt\mu)$ = 1.2±0.6 meV have to be taken into account when calculating $dd\mu$ and $dt\mu$ resonant formation rate.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985