ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р4-88-17

Д.Д.Бакалов, В.С.Мележик, Л.И.Меньшиков *,
М.П.Файфман *

СКОРОСТИ ДЕВОЗБУЖДЕНИЯ МЕЗОМОЛЕКУЛЫ $dd\mu$ В МЕЗОМОЛЕКУЛЯРНОМ КОМПЛЕКСЕ $[(dd\mu)dee]$

Направлено в "Журнал экспериментальной
и теоретической физики"

* ИАЭ им. И.В.Курчатова, Москва

1988

I. Наблюдаемая в экспериментах[I-4] скорость образования мезомолекул $dd\mu$ зависит от скоростей различных процессов, сопровождающих μ-катализ в дейтерии[2,5], и в частности, от скоростей распада и стабилизации мезомолекулярного комплекса $[(dd\mu)dee]$, в состав которого входит $dd\mu$-молекула[5,6]. Одним из каналов стабилизации является процесс девозбуждения мезомолекулы $dd\mu$, образовавшейся во вращательно-колебательном состоянии $J = 1$, $v = 1$ и с суммарным спином ядер $I = 1$:

$$[(dd\mu)^{*}_{J=v=1}dee] \to [(dd\mu)_{J'v'}de]^{+} + e. \qquad /I/$$

Выделившаяся энергия в реакции /I/ передается электрону конверсии. В нерелятивистском приближении переход из состояния с квантовыми числами $J = 1$, $I = 1$ с учетом тождественности дейтронов может происходить только в состояния с нечетным J[7-9], т.е. единственно возможен переход $(J = 1,\ v = 1) \to (J' = 1,\ v' = 0)$.

В данной работе вычислена скорость девозбуждения мезомолекулы $dd\mu$ по теории возмущений с учетом в разложении оператора взаимодействия электронов молекулярного комплекса $[(dd\mu)dee]$ с $dd\mu$-молекулой лишь монопольного и дипольного членов, что оправдано ввиду малости отношения размеров мезомолекулы и комплекса.

Вклад от дипольного члена во втором порядке теории возмущений в скорость перехода /I/ из состояния $J = v = 1$ существенно компенсирует вклад от монопольного. Отмеченный эффект ранее был рассмотрен в работах[I0,II].

2. Скорость процесса /I/ девозбуждения мезомолекулы $dd\mu$ равна /в единицах $e = \hbar = 1$ /

$$d\lambda_{dex} = 2\pi\,|t_{fi}|^2\,\delta(E_f - E_i)\,d\Gamma_f\,. \qquad /2/$$

Здесь $E_i = \varepsilon_{11} + E_I$, $E_f = \varepsilon_{1c} + q^2/2m_e$ полные энергии комплекса $[(dd\mu)dee]$ в начальном и конечном состояниях соответственно, ε_{Jv} - энергия связи мезомолекулы $dd\mu$, E_I - энергия связи электрона в основном состоянии комплекса, $\vec{q}$ - импульс электрона конверсии, $d\Gamma_f = d\vec{q}/(2\pi)^3$ - число конечных состояний оже-электрона,

$$|t_{fi}|^2 = \frac{1}{2J+1} \sum_{M_J, M_J'} |T_{fi}|^2 . \qquad /3/$$

Матричный элемент T_{fi} в первом порядке теории возмущений равен

$$T_{fi} = V_{fi}^{(I)} = \langle f | H_{int} | i \rangle ,$$

$$V_{fi}^{(I)} = \int d\vec{R}\, d\vec{r}\, d\vec{\rho}\, \Psi_{J'v'}^{(f)*}(\vec{r},\vec{R})\, \Psi^{(f)*}(\vec{\rho})\, H_{int}\, \Psi^{(i)}(\vec{\rho})\, \Psi^{(i)}(\vec{r},\vec{R}), \qquad /4/$$

где $\Psi^{(i,f)}(\vec{\rho})$ и $\Psi^{(i,f)}(\vec{r},\vec{R})$ - волновые функции электрона конверсии и мезомолекулы в начальном и конечном состояниях, $\vec{\rho}$ - координата электрона, отсчитанная от центра масс мезомолекулы, $\vec{R}$ - радиус-вектор, соединяющий ядра мезомолекулы, $\vec{r}$ - координата μ^--мезона, отсчитанная от центра отрезка R . В формуле /3/ проведено усреднение по проекциям M_J орбитального момента J в начальном состоянии и суммирование по проекциям M_J' в конечном состоянии.

Расчет скорости /2/ и соответствующего матричного элемента перехода /3/, достаточно провести для процесса девозбуждения мезомолекулы $dd\mu$, входящей в состав атома, аналога атома водорода,

$$[(dd\mu)_{11}\, e] \longrightarrow (dd\mu)_{10} + e . \qquad /5/$$

Искомая скорость λ_{dex} процесса /I/ выражается через скорость девозбуждения $\lambda_{dex}^{(a)}$ процесса /5/ следующим образом :

$$\lambda_{dex} = \varkappa\, \lambda_{dex}^{(a)} , \qquad /6/$$

где коэффициент $\varkappa$ равен отношению электронных плотностей вблизи ядра в молекуле водорода H_2 и атоме водорода H[I2,I3] :

$$\varkappa = 1,45 . \qquad /7/$$

Волновые функции электрона конверсии /5/ в начальном и конечном состояниях имеют вид[I4]

$$\Psi^{(i)}(\vec{\rho}) = \Psi_{1s}(\rho) = \sqrt{\frac{m_e^3}{\pi}}\, e^{-m_e \rho} , \qquad /8/$$

$$\Psi^{(f)}(\vec{\rho}) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\, \frac{1}{q} \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell+1) e^{-i\sigma_\ell} R_{q\ell}(\rho)\, P_\ell(\cos\theta) , \qquad /9/$$

$$R_{q\ell}(\rho) = C_{q\ell} \frac{(2q\rho)^{\ell}}{(2\ell+1)!}\, e^{-iq\rho}\, F(\ell+1+i\eta,\, 2\ell+2,\, 2iq\rho) ,$$

$$C_{q\ell} = 2[\eta(1-e^{-2\pi\eta})]^{-1/2} \prod_{s=1}^{\ell} (s^2+\eta^2), \qquad \eta = \frac{m_e}{q} ,$$

$$R_{q\ell}(\rho)_{\rho\to\infty} \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \frac{1}{\rho} \sin\left(q\rho + \eta \ln 2q\rho - \frac{\pi\ell}{2} + \sigma_\ell\right) . \qquad /10/$$

Волновые функции мезомолекулы $dd\mu$ в связанном состоянии (Jv) вычислены в одноуровневом приближении адиабатического метода задачи трех тел[I5]:

$$\Psi_{Jv}^{(i,f)}(\vec{r},\vec{R}) = \Phi_{1s\sigma_g}(\vec{r}; R)\, \varphi_{Jv}^{(i,f)}(\vec{R}) , \qquad /II/$$

где $\Phi_{1s\sigma_g}$ - четное решение задачи двух центров[I6], нормированное условием

$$\int d\vec{r}\, \Phi_{1s\sigma_g}^2(\vec{r}; R) = 1 .$$

В выражении /II/ не учтены возбужденные состояния по движению μ-мезона, вкладом от которых при расчете скоростей девозбуждения с требуемой точностью можно пренебречь[8].

Волновые функции $\varphi_{Jv}^{(i,f)}(\vec{R})$ описывают относительное движение ядер

$$\varphi_{Jv}^{(i,f)}(\vec{R}) = \frac{1}{R}\, \chi_{Jv}^{(f)}(R)\, Y_{JM_J}(\theta,\varphi) \qquad /I2/$$

и нормированы условием

$$\int dR\, [\chi_{Jv}^{(f)}(R)]^2 = 1 .$$

Переходы в мезомолекуле $dd\mu$ происходят под действием возмущения[7-9]

$$H_{int} = \sum_i \left(\frac{e_i}{\rho} - \frac{e_i}{|\vec{\rho}-\vec{R}_i|} \right) , \qquad /I3/$$

где e_i и R_i - соответственно заряд и расстояние от центра масс мезомолекулы двух дейтронов и мезона.

Возмущение /I3/ в области $R_i \leq \rho \ll$ I имеет в монопольном приближении следующий вид[7,9]:

$$H_{int} = H_{int}^{(M)} = \frac{2\pi}{3} Q^{(M)}(\vec{r}, \vec{R})\, \delta(\vec{\rho}) \,, \tag{I4}$$

$$Q^{(M)} = R_1^2 + R_2^2 - R_\mu^2 = \frac{1}{2} R^2 - \frac{2(2M_d^2 - M_\mu^2)}{(2M_d + M_\mu)^2} r^2 \,, \tag{I5}$$

где M_d и M_μ - масса ядра дейтерия и μ-мезона соответственно.

В области $\rho \gg R_i$ оператор /I3/ в дипольном приближении равен[7-9]

$$H_{int} = H_{int}^{(D)} = -\frac{\vec{d}\vec{\rho}}{\rho^3} \,, \tag{I6}$$

$$\vec{d} = -(\vec{R}_1 + \vec{R}_2 - \vec{R}_\mu) = -\left(1 + \frac{M_\mu}{2M_d + M_\mu}\right)\vec{r} \,. \tag{I7}$$

Согласно определению /4/ под воздействием возмущения /I6/ дипольных переходов между связанными состояниями мезомолекулы $dd\mu$ не происходит, так как волновые функции /II/ $\Psi_{Jv}^{(i,f)}(\vec{r}, \vec{R})$, описывающие эти состояния, в нерелятивистском приближении имеют одинаковую четность "g" по отношению к инверсии координат мезона $\vec{r} \to -\vec{r}$ ($\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \Psi(-\vec{r}, \vec{R})$)[7,8]. Таким образом, в первом порядке теории возмущений [4] отличными от нуля будут только E0-переходы, которым соответствует оператор взаимодействия /I4/.

Матричный элемент /4/ в монопольном приближении после интегрирования по координатам $\vec{\rho}$ электрона равен

$$V^{(I)} = \delta_{M_J M_J'}\, v^{(I)}(q) \,, \tag{I8}$$

где

$$v^{(I)}(q) = \frac{2\pi}{3} I(q) \langle Q^{(M)} \rangle \,, \tag{I9}$$

$$I(q) = \psi^{(f)}(0)\psi^{(i)}(0) = \left[\frac{2m_e^3 \eta}{1 - e^{-2\pi\eta}}\right]^{1/2} , \tag{20}$$

$$\langle Q^{(M)} \rangle = \int d\vec{R} d\vec{r}\, \Psi_{J'v'}^{(f)*} Q^{(M)} \Psi_{Jv}^{(i)} = \frac{1}{2} J_1 - \frac{2(2M_d^2 - M_\mu^2)}{(2M_d + M_\mu)^2} J_2 \,, \tag{2I}$$

$$J_\mu(R) = \int r^2 \Phi_{1s\sigma_g}^2(\vec{r}; R)\, d\vec{r} \,,$$

$$J_1 = \int R^2 \chi_{Jv}^{(i)}(R) \chi_{J'v'}^{(f)}(R)\, dR \,,$$

$$J_2 = \int \chi_{Jv}^{(i)}(R) \chi_{J'v'}^{(f)}(R) J_\mu(R)\, dR \,. \tag{22}$$

Проводя в выражении /2/ интегрирование по импульсам $\vec{q}$ электрона, получим

$$\lambda_{dex}^{(0)} = \frac{4\pi}{9} m_e q_0 I^2(q_0) |\langle Q^{(M)} \rangle|^2 . \tag{23}$$

Здесь

$$q_0 = \left[2m_e(|\varepsilon_{10}| - |\varepsilon_{11}| - |E_I|)\right]^{1/2} ,$$
$$m^{-1} = M_\mu^{-1} + M_d^{-1} . \tag{24}$$

3. Скорость девозбуждения /23/, вычисленная в первом порядке теории возмущений, имеет порядок малости $(a_m/a_e)^4$. Как следует из работ[10,11], вклад того же порядка малости в величину скорости перехода из состояния с малой энергией связи $|\varepsilon_{11}| \ll |E_I|$ вносит учет взаимодействия /I6/ во втором порядке теории возмущений. Поэтому суммарная скорость процесса /5/ определяется матричным элементом перехода /4/ вида

$$T_{fi} = V_{fi}^{(I)} + V_{fi}^{(II)} \,, \tag{25}$$

$$V_{fi}^{(II)} = \sum_{nN} \frac{\langle f | H_{int}^{(D)} | nN \rangle \langle nN | H_{int}^{(D)} | i \rangle}{\varepsilon_{11} + E_I - \varepsilon_N - E_n} \,, \tag{26}$$

где суммирование проводится по всем состояниям $dd\mu$-молекулы и мезоатомного комплекса $(dd\mu)e$ с энергиями ε_N и E_n соответственно

Основной вклад при суммировании по электронным состояниям в выражении /26/, как показывают оценки[10], дают состояния непрерывного спектра с характерными импульсами электрона $q \gg 1$ /в ат. ед./. Это условие позволяет описать движение электрона вместо волновой функции вида /9/ плоской волной:

$$\Psi_q(\vec{\rho}) = e^{i\vec{q}\vec{\rho}}. \qquad /27/$$

Как было отмечено, матричные элементы, соответствующие EI-переходам между связанными состояниями мезомолекулы $dd\mu$ вида $\langle J'=0;2|\vec{d}|J=1\rangle$ равны нулю; поэтому в сумме /26/ индекс "$\mathcal{N}$" нумерует состояния $J' \equiv L = 0;2$ только непрерывного спектра $dd\mu$-молекулы, т.е. системы $d\mu + d$. Волновая функция, описывающая такую систему в состояниях, переходы в которые отличны от нуля, имеет вид

$$\Psi_k(\vec{r},\vec{R}) = \Phi_{2p\sigma_u}(\vec{r};R)\,\varphi_k(\vec{R}),$$
$$\varphi_k(\vec{R}) = \frac{1}{R}\chi^{(u)}_{Lk}(R)\,Y_{LM_L}(\Theta,\Phi),$$
$$k^2 = 2M\mathcal{E}_{\mathcal{N}}, \quad M = M_d/2, \quad L = 0;2, \qquad /28/$$

функция $\Phi_{2p\sigma_u}$ - нечетное решение задачи двух центров[16], функция $\chi^{(u)}_{Lk}(R)$ нормирована асимптотическим условием

$$\chi^{(u)}_{Lk}(R) \underset{R\to\infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin\left(kR - \frac{\pi L}{2} + \delta_u\right) \qquad /29/$$

и вычислена в работах[17,18].

Выражение /26/ с учетом определений /27/ и /28/ приводится к виду

$$V^{(II)}_{fi} = -\int dk\,\langle J'=1, M'_J; v'=0|d_\alpha|LM_L\rangle\langle LM_L|d_\gamma|J=1, M_J; v=1\rangle\, Q_{\alpha\gamma}(k) \qquad /30/$$

где

$$Q_{\alpha\gamma}(k) = 2m_e\int\frac{d\vec{q}\,'}{(2\pi)^3}\,\frac{\langle\vec{q}\,|\frac{\rho_\alpha}{\rho^3}|\vec{q}\,'\rangle\langle\vec{q}\,'|\frac{\rho_\gamma}{\rho^3}|1S\rangle}{(q')^2 + \tilde{k}^2}, \qquad /31/$$

$$\tilde{k}^2 = 2m_e\left(|\varepsilon_{1s}| + |E_I| + k^2/2M\right), \qquad /32/$$
$$q' = \sqrt{2m_e E_n}$$

и проводится суммирование по дважды повторяющимся индексам $L = 0;2$ и $\alpha,\gamma = x,y,z$. Величина $Q_{\alpha\gamma}(k)$ вычислена в Приложении и имеет вид

$$Q_{\alpha\gamma}(k) = A\delta_{\alpha\gamma} + B\,\frac{q_\alpha q_\gamma}{q^2}. \qquad /33/$$

Явные выражения для $A \equiv A(k)$ и $B \equiv B(k)$ приведены также в Приложении.

Учитывая в формуле /30/ соотношение /33/, определения /11/, /12/, /28/ и используя теорему Вигнера-Эккарта[19]

$$\langle JM_J|d_\mu|LM_L\rangle = C^{JM_J}_{LM_L,1\mu}\,\frac{\langle J\|d\|L\rangle}{\sqrt{2J+1}}, \qquad /34/$$

где d_μ - циклические компоненты вектора $\vec{d}$ $\left(d_\pm = \mp\frac{d_x \pm i d_y}{\sqrt{2}},\ d_0 = d_z\right)$, $C^{JM_J}_{LM_L,1\mu}$ - коэффициент Клебша-Гордона, получим величину $V^{(II)}_{fi}$ /30/ в виде

$$V^{(II)}_{fi} = \delta_{M_J M'_J}\,v^{(II)}_{M_J}(q), \qquad /35/$$

$$v^{(II)}_{M_J}(q) = \frac{1}{3}\int dk\left\{\left[A + B(1 - M_J^2)\right]D_0 + \left[A + \frac{B}{10}(4 - M_J^2)\right]D_2\right\}. \qquad /36/$$

Здесь введено обозначение

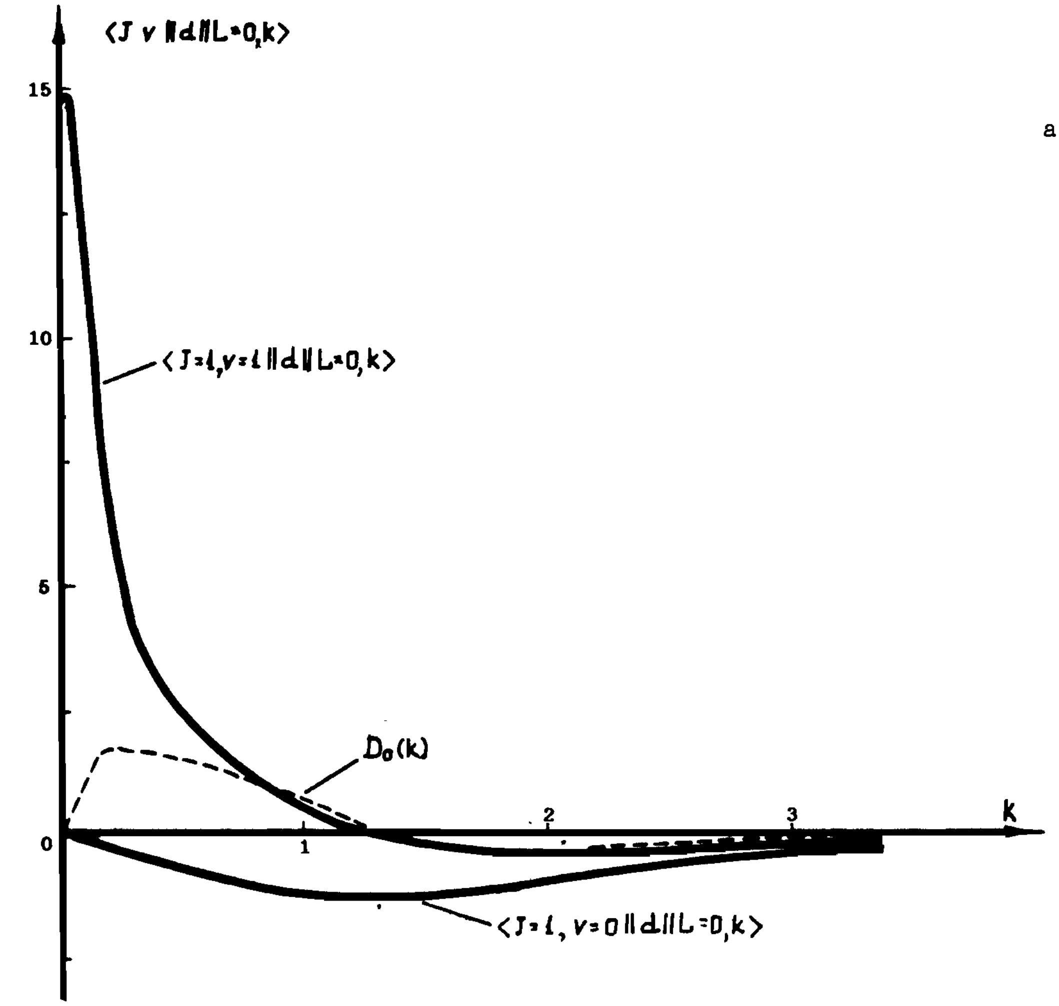
$$D_L = \langle J'\|d\|L\rangle\langle L\|d\|J\rangle \qquad /37/$$

где приведенные матричные элементы $\langle J\|d\|L\rangle$, определенные согласно теореме /34/, равны

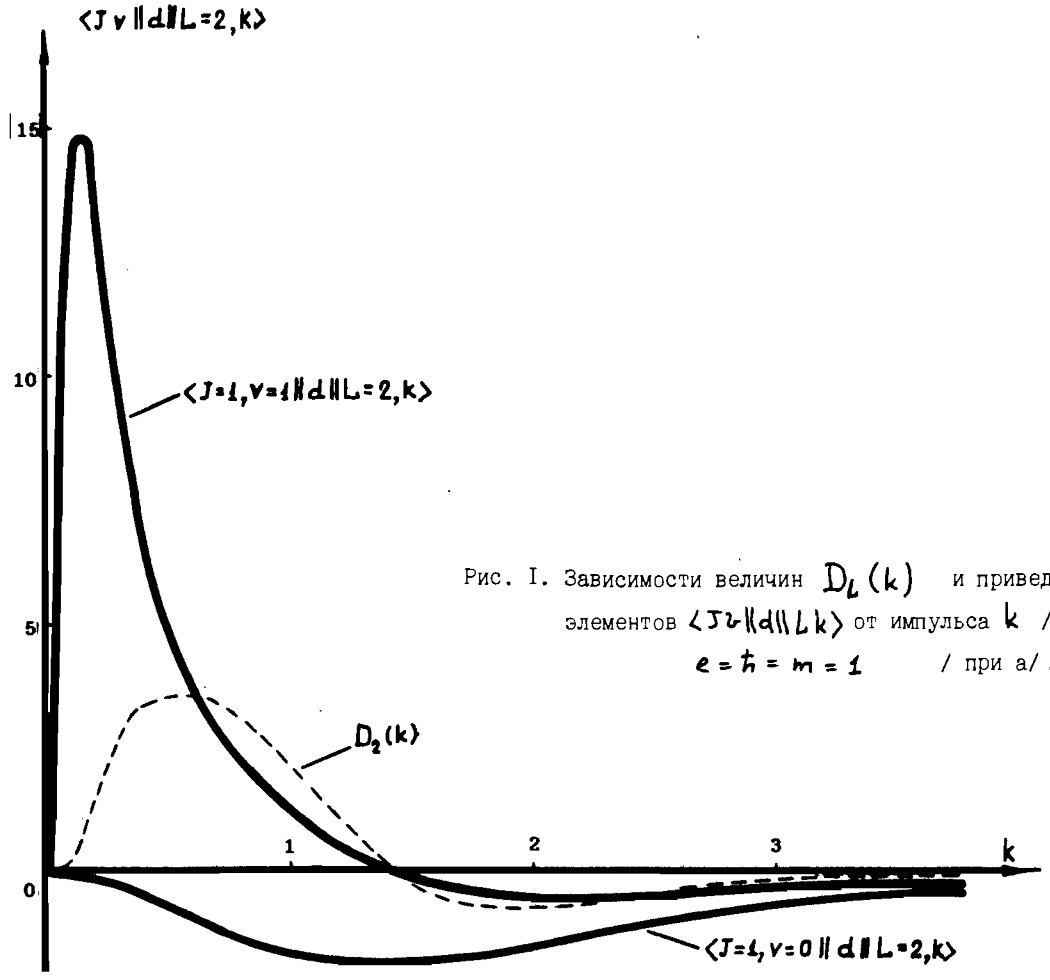
$$\langle J\|d\|L\rangle = (\delta_{L0} - \sqrt{2}\,\delta_{L2})\int dR\,\chi^{(g)}_{Jv}\,\chi^{(u)}_{Lk}\,D_{gu}(R), \qquad /38/$$
$$D_{gu}(R) = \frac{\vec{R}}{R}\int d\vec{r}\,\Phi_{1s\sigma_g}(\vec{r};R)\,\vec{d}\,\Phi_{2p\sigma_u}(\vec{r};R),$$
$$\langle L\|d\|J\rangle = -\langle J\|d\|L\rangle, \quad L = 0;2, \quad J = 1.$$

Матричный элемент /3/, соответствующий переходу /5/, с учетом /18/ и /35/ равен

$$|t_{fi}|^2 = \frac{1}{2J+1}\sum_{M_J M'_J}\left|V^{(I)}_{fi} + V^{(II)}_{fi}\right|^2 = \left|V^{(I)}_{fi}\right|^2\sum_{M_J}\frac{1}{3}\left|1 + \frac{v^{(II)}_{M_J}(q)}{v^{(I)}(q)}\right|^2. \qquad /39/$$



а



б

Рис. I. Зависимости величин $D_L(k)$ и приведенных матричных элементов $\langle J\nu \| d \| L k\rangle$ от импульса k /в системе единиц $e = \hbar = m = 1$ / при а/ $L = 0$, б/ $L = 2$.

Выражение для скорости девозбуждения /2/ с учетом второго порядка теории возмущений после интегрирования по импульсам электрона примет вид

$$\lambda_{dex}^{(a)} = \frac{1}{3}\lambda_{dex}^{(0)} \sum_{M_J} \left| 1 + \frac{v_{M_J}^{(II)}(q_0)}{v^{(I)}(q_0)} \right|^2 . \qquad /40/$$

где скорость $\lambda_{dex}^{(0)}$ определена формулой /23/.

При вычислении величины $v_{M_J}^{(II)}(q)$ волновые функции, описывающие движение электрона в непрерывном спектре, были выбраны в виде плоских волн /27/, в то время как величина $v^{(I)}(q)$ вычислена с точными кулоновскими функциями атома водорода /9/. Поскольку основной вклад в интеграл $Q_{d\gamma}$ /31/ вносит область ρ, где $\rho \lesssim q^{-1} \ll$ I ат.ед. /см. Приложение/, то замена $\Psi_q^{(c)}(0) = \left[\frac{2\pi\eta}{1-\exp(-2\pi\eta)}\right]^{1/2}$ на $\Psi_q(0)$ = I привносит в $v_{fi}^{(II)}$ погрешность $\sim[|E_I|/(|\varepsilon_{10}|-|\varepsilon_{11}|)]^{1/2} \simeq 0,3$. Такую же погрешность будет иметь величина $\bar{v}^{(I)}(q)$, вычисленная по формуле /19/, но с заменой в выражении /20/ $\Psi^{(+)}(0) = 1$. Отсюда следует, что значение скорости $\lambda_{dex}^{(a)}$ можно уточнить, если формулу /40/ представить в виде

$$\lambda_{dex}^{(a)} = \lambda_{dex}^{(0)} \sum_{M_J} \frac{1}{3} \left| 1 + \frac{v_{M_J}^{(II)}(q_0)}{\bar{v}^{(I)}(q_0)} \right|^2 . \qquad /41/$$

Учет условия $v_{M_J}^{(II)}(q) = v_{-M_J}^{(II)}(q)$ согласно определению /36/ и равенству /6/ приводит к окончательному выражению для скорости девозбуждения в молекуле $dd\mu$:

$$\lambda_{dex} = \lambda_0^{(m)} P_v , \qquad /42/$$

где обозначено

$$\lambda_0^{(m)} = \varkappa \lambda_{dex}^{(0)} , \qquad /43/$$

$$P_v = \frac{1}{3}\left(1 + \frac{v_0^{(II)}(q_0)}{\bar{v}^{(I)}(q_0)}\right)^2 + \frac{2}{3}\left(1 + \frac{v_1^{(II)}(q_0)}{\bar{v}^{(I)}(q_0)}\right)^2 . \qquad /44/$$

4. На рис.Iа и б представлены зависимости приведенных матричных элементов $\langle Jv \| d \| Lk \rangle$ /38/ от импульса k и орбитального

момента L = 0;2 относительного движения мезоатома $d\mu$ и ядра d.

Величина λ_{dex} скорости девозбуждения мезомолекулы $dd\mu$, вычисленная по формулам /42/ - /44/, равна

$$\lambda_{dex} = 0,22 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1} . \qquad /45/$$

В таблице приведены численные значения промежуточных величин /в единицах $e = \hbar = m = 1$ /, полученные при вычислении скорости λ_{dex}, а также скорость $\lambda_0^{(m)}$ монопольного перехода / J = I, v = I/ → / J = I, v = 0/, определенная соотношением /43/.

Таблица

q_0	$\bar{v}^{(I)}$	$v_0^{(II)}$	$v_1^{(II)}$	$\lambda_0^{(m)}$
0,020	$-4,6 \cdot 10^{-4}$	$2,4 \cdot 10^{-4}$	$3,5 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{8}$ c^{-1}

Сравнение величин $\lambda_0^{(m)}$ и λ_{dex} /45/ показывает, что учет дипольного члена /16/ в разложении оператора взаимодействия /13/ во втором порядке теории возмущений приводит к существенному уменьшению значения скорости девозбуждения, вычисленной с учетом только монопольного члена /14/.

Аналогичный эффект компенсации был отмечен при вычислении поправки на конечные размеры мезомолекул к уровням энергии комплексов типа $[(dd\mu)dee]$ в работе /10/ и численно рассчитан в работе /11/. Согласно этим работам в матричном элементе T_{fi} /25/ первое слагаемое почти полностью компенсируется вторым, если $|f\rangle = |i\rangle$ и $|\varepsilon_{Jv}| \ll E_I$. В данном расчете скоростей девозбуждения $|f\rangle \neq |i\rangle$ и выполняются неравенства $|\varepsilon_{11}| \ll |E_I|$, но $|\varepsilon_{10}| \gg |E_I|$ / ε_{11} = - 1,96 эВ, ε_{10} = -226,61 эВ, E_I = = -13,61 эВ /, и поэтому компенсация менее значительна.

5. Вычисленная в данной работе скорость девозбуждения λ_{dex} важна для расчета вероятности w синтеза ядер в мезомолекуле $dd\mu$,

определенной соотношением[5,6]

$$w = \frac{\tilde{\lambda}_f}{\tilde{\lambda}_f + \Gamma} .$$

Здесь $\tilde{\lambda}_f = \lambda_{11} + \lambda_{dex}$ и $\Gamma \approx 10^8$ с$^{-1}$ соответственно скорости стабилизации и распада молекулярного комплекса $[(dd\mu)dee]$, образующегося в резонансных реакциях[5], $\lambda_{11} = 4{,}3 \cdot 10^8$ с$^{-1}$ скорост ядерной реакции в состоянии $J = v = 1$ в молекуле $dd\mu$[20]. Знание величин w позволяет с большой точностью определить из экспериментов по измерению скоростей образования $dd\mu$-молекул уровень энергии ε_{11} слабосвязанного состояния $J = v = 1$.

Основная погрешность вычисления скоростей девозбуждения обусловлена описанием состояний электрона плоскими волнами /27/ вместо волновых функций возбужденных электронных состояний комплекса $[(dd\mu)dee]$. Однако, как отмечено в работах[12,13] и в данной работе, учет выражений в виде /6/ и /41/ приводит к точности $\sim 10\%$ для величины λ_{dex}. Такая точность вполне достаточна для вычислений волновых функций дискретного и непрерывного спектра состояний мезомолекулы $dd\mu$ в одноуровневом приближении[11,28] адиабатического метода[15].

Изложенная схема расчета обладает определенной общностью и применима к ряду задач, в которых необходим учет эффекта компенсации в расчетах скоростей переходов.

В заключение авторам приятно поблагодарить Л.И.Пономарева за постоянный интерес к работе на всех ее этапах.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Для вычисления скорости девозбуждения необходимо вычислить интеграл $Q_{d\gamma}(k)$, определенный формулой /31/. Матричные элементы, входящие в подынтегральное выражение, с учетом определений /8/ и /27/, равны

$$\langle \vec{q} \,|\, \frac{\vec{\rho}}{\rho^3} \,|\, \vec{q}\,' \rangle = \frac{4\pi i (\vec{q}\,' - \vec{q})}{(\vec{q}\,' - \vec{q})^2} , \qquad /П.1/$$

$$\langle \vec{q}\,' \,|\, \frac{\vec{\rho}}{\rho^3} \,|\, 1s \rangle \approx - \frac{4\pi i \vec{q}\,'}{(\vec{q}\,')^2} \psi_{1s}(0) . \qquad /П.2/$$

Интеграл $Q_{d\gamma}(k)$ приводится к виду

$$Q_{d\gamma}(k) = \frac{4 m_e}{\sqrt{\pi^3}} \int d\vec{q}\,' \frac{(q'-q)_d \, q'_\gamma}{(\vec{q}\,' - \vec{q})^2 (\vec{q}\,')^2 [(\vec{q}\,')^2 + \tilde{k}^2]} , \qquad /П.3/$$

откуда после интегрирования по направлениям импульса $\vec{q}$ следуют соотношения

$$Q_{dd} = \frac{8 m_e}{\sqrt{\pi} q} F_1(\beta) , \qquad \frac{q_d q_\gamma}{q^2} Q_{d\gamma} = \frac{4 m_e}{\sqrt{\pi} q} F_2(\beta) , \qquad /П.4/$$

где обозначено

$$F_1(\beta) = \int_0^\infty \frac{dx}{x^2 + \beta^2} \left(1 + \frac{x^2 - 1}{2x} \ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right| \right) , \qquad /П.5/$$

$$F_2(\beta) = \int_0^\infty \frac{dx \, (1 - x^2)}{x^2 + \beta^2} \left(1 - \frac{x^2 + 1}{2x} \ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right| \right) , \qquad \beta = \frac{\tilde{k}}{q} . \qquad /П.6/$$

Интеграл $F_2(\beta)$ представим в виде

$$F_2(\beta) = (1 + \beta^2) G(\beta) - G(0) , \qquad /П.7/$$

$$G(\beta) = \int_0^\infty \frac{dx}{x^2 + \beta^2} \left(1 - \frac{x^2 + 1}{2x} \ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right| \right) . \qquad /П.8/$$

Выражение для $G(0)$ получено из /П.8/ заменой $x \to x^{-1}$ и при $\beta = 0$.

Учитывая интегралы

$$\int_0^\infty \frac{dx}{x^2 + \beta^2} = \frac{\pi}{2\beta} , \qquad \int_0^\infty \frac{dx}{x} \ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right| = \frac{\pi^2}{2} , \qquad /П.9/$$

$$\int_0^\infty \frac{dx}{x(x^2+\beta^2)} \ln\left|\frac{x+1}{x-1}\right| = \frac{\pi}{\beta^2} \operatorname{arctg}\beta , \qquad /П.9/$$

приведенные в справочнике[21], получим следующие соотношения для величин F_1 и F_2, определенных формулами /П.5/ и /П.6/ соответственно

$$F_1(\beta) = \frac{\pi^2}{4} + \frac{\pi}{2\beta}\left(1 - \frac{1+\beta^2}{\beta} \operatorname{arctg}\beta\right), \qquad /П.10/$$

$$F_2(\beta) = -\frac{\pi^2}{4}\beta^2 + \frac{\pi(1+\beta^2)}{2\beta}\left(1 - \frac{1-\beta^2}{\beta} \operatorname{arctg}\beta\right). \qquad /П.11/$$

Величины A и B, определенные формулой /33/, имеют вид

$$A = \frac{4m_e}{\sqrt{\pi}\,q}\left(F_1 - \frac{1}{2}F_2\right), \quad B = \frac{4m_e}{\sqrt{\pi}\,q}\left(-F_1 + \frac{3}{2}F_2\right). \qquad /П.12/$$

Численные значения A и B в атомных единицах при $q = q_0 = 3{,}94$, $k = 1{,}76\cdot 10^2$, соответственно равны $A = 9{,}5$, $B = -4{,}2$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Быстрицкий В.М., Джелепов В.П., Петрухин В.И. и др. ЖЭТФ, 1979, 76, 460.
2. Kammel P., Breunlich W.H., Cargnelli M. et al. Phys.Lett., 1982, 112B, 319.
3. Balin D.V., Vorobyov A.A. et al. Phys.Lett., 1984, 141B, 173.
4. Jones S.E., Anderson A.N., Caffrey A.J. et al. Phys.Rev.Lett., 1986, 56, 588.
5. Меньшиков Л.И. и др. ЖЭТФ, 1987, 92, 1173.
6. Leon M. Phys.Rev., 1986, 33A, 4434.
7. Зельдович Я.Б., Герштейн С.С. УФН, 1960, 71, 581.
8. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1982, 82, 985
9. Пономарев Л.И., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1976, 71, 1689.
10. Меньшиков Л.И. ЯФ, 1985, 42, 1449.
11. Бакалов Д.Д., Мележик В.С. Препринт ОИЯИ, Р4-85-952, Дубна, 1985.

12. Меньшиков Л.И. Препринт ИАЭ-3810/12, Москва, 1983.
13. Меньшиков Л.И., Файфман М.П. Препринт ИАЭ-3819/12, Москва, 1983
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М., Наука, 1974.
15. Gocheva A.D., Gusev V.V., Melezhik V.S. et al. Phys.Lett., 1985, 153B, 349.
16. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., Наука, 1976.
17. Файфман М.П. ЯФ, 1977, 26, 434.
18. Melezhik V.S. J.Comp.Phys., 1986, 65, 1.
19. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теори углового момента. Ленинград, Наука, 1975.
20. Bogdanova L.N., Markushin V.E., Melezhik V.S. and Ponomarev L.I Phys.Lett., 1982, 115B, 171, Errata 1985, 167B, 1986.
21. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. М., Наука, 1981.

**Рукопись поступила в издательский отдел
8 января 1988 года.**