

Исследование квантовой системы димера неона

Д. И. Шалапинин*, Е. А. Колганова

Лаборатория теоретической физики имени Н. Н. Боголюбова
Объединённого института ядерных исследований, Дубна, Россия

*e-mail: shalapinin@theor.jinr.ru

В докладе исследуются связанные состояния димера неона ^{20}Ne , образованные ван-дер-ваальсовским взаимодействием. Дается обзор теоретических результатов и применимость дифференциального уравнения Шрёдингера в конфигурационном пространстве для неглубоких потенциалов. Проводится сравнительная характеристика с экспериментом, а также с результатами, полученными при альтернативном подходе в импульсном пространстве.

Ван-дер-ваальсовские кластеры привлекают значительный интерес в последние десятилетия, поскольку их изучение дает большой объем информации о молекулярных свойствах систем. Система неоновых димеров занимает промежуточное положение между квантово-механическими димерами гелия и классическими димерами более тяжелых благородных газов, что делает её удобным объектом для тестирования потенциальных моделей, численных методов и наблюдения эффектов, связанных с природой химически инертных ван-дер-ваальсовских связей.

Расчеты проводятся на основе стационарного уравнения Шрёдингера для относительного движения двух атомов в центрально-симметричном поле. Используется актуальный реалистический потенциал Хеллманна, а также потенциал Азиза–Сламана. Малая глубина потенциала и слабо затухающий характер на асимптотике объясняют наличие небольшого количества крайне слабых связей (< 25 К). Расчеты демонстрируют наличие возбужденных состояний при орбитальных моментах $l = 10$ включительно.

При $l = 0$ были найдены три колебательных уровня: 24,165 К, 4,323 К, 0,023 К, что хорошо согласуется с экспериментальными данными [1] и современными расчетами [2] в импульсном пространстве. Показано, что потенциал Хеллманна точнее воспроизводит порог диссоциации, чем потенциал Азиза–Сламана.

Список источников

1. A. Wüest, F. Merkt, J. Chem. Phys. **118**, 8807 (2003).
2. R. Ahnouch and M. R. Hadizadeh, Sci. Rep. **15**, 11928 (2025).