

01

Адиабатические потенциалы квазимолекулярных ионов $H-p$, He^+-p : релятивистский подход

© А. Данилов¹, А. Аникин^{1,2}, Д. Глазов^{1,3}, Е. Корзинин², А. Котов¹, Д. Соловьев^{1,4}^{1*} Санкт-Петербургский государственный университет,
190034 Санкт-Петербург, Россия² Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д.И. Менделеева,
190005 Санкт-Петербург, Россия³ Национальный исследовательский университет ИТМО,
197101 Санкт-Петербург, Россия⁴ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, НИЦ „Курчатовский институт“,
188300 Гатчина, Ленинградская обл., Россия

e-mail: st063038@student.spbu.ru

Поступило в редакцию 18.10.2023 г.

В окончательной редакции 09.11.2023 г.

Принята к публикации 24.11.2023 г.

В рамках полностью релятивистского А-ДКБ-подхода получены адиабатические потенциалы квазимолекулярных термов. Решая двухцентровое уравнение Дирака, рассмотрены два соединения: одноэлектронный гомоядерный $H-p$ и одноэлектронный гетероядерный He^+-p (квази)молекулярные ионы. В рамках приближения Борна–Оппенгеймера рассчитаны энергии связи электрона (основного и нескольких первых возбужденных состояний) в широком диапазоне межъядерных расстояний. В рамках используемого релятивистского подхода исследованы расщепление адиабатических кривых, их пересечения и проведена соответствующая идентификация энергетических термов.

Ключевые слова: уравнение Дирака, релятивистские эффекты, потенциальные поверхности, квазимолекулы, метод А-ДКБ.

DOI: 10.61011/OS.2023.11.57025.5672-23

1. Введение

Двухатомные молекулы являются объектом изучения с момента становления квантовой механики (КМ) [1,2]. Интерес к таким системам был стимулирован необходимостью описания в рамках КМ связанных состояний электронов и разработки теории для решения задачи многих тел. На заре становления КМ определение, например, равновесного межъядерного расстояния в легких молекулярных системах служило проверкой теории [3]. С тех пор непрерывное развитие теории в сочетании с повышением точности измерений молекулярных систем нашло множество применений в различных областях физики и химии. Например, в физике плазмы особый интерес представляет описание процесса рассеяния протона на атомарном водороде [4–6]. Во многих астрофизических задачах исследуются легкие молекулярные ионы (H_2^+ и He^+-p), рассматриваются столкновительные процессы, приводящие к образованию атомного водорода в ранней Вселенной [7]. Недавно на основе теоретических и экспериментальных достижений молекулярный ион водорода и его изотопы было предложено использовать в качестве молекулярных оптических часов [8]. Как следствие, было показано, что такие системы можно использовать для точного определения фундаментальных физических констант, таких как отно-

шение масс электрона и протона и зарядовый радиус протона [9].

Одноэлектронные двухъядерные ионы наряду с атомом гелия являются простейшим случаем задачи многих тел. Традиционным способом описания таких систем является использование численных методов. Один из широко используемых методов заключается в применении нерелятивистского подхода. Для точного расчета энергии связи электрона решается уравнение Шредингера, а затем учитываются различные релятивистские и радиационные поправки, рассчитываемые в рамках нерелятивистской квантовой электродинамики (НРКЭД). Наиболее выдающиеся результаты были получены с помощью вариационного принципа [10–15], в рамках которого были рассчитаны поправки вплоть до порядков $m\alpha^6$ и $m\alpha^6 (m/M)$ (m и M — массы электрона и ядра соответственно, α — постоянная тонкой структуры). Альтернативный подход состоит в решении уравнения Дирака с двухцентровым потенциалом. При этом широко распространенным методом является разложение дираковских волновых функций по парциальным волнам. В рамках этого подхода были рассчитаны энергии низколежащих состояний молекулярного иона H_2^+ с точностью порядка 10^{-13} – 10^{-14} [16–20] и выше для основного состояния [21]. Результаты, полученные другими методами, представлены в [22,23].

В настоящей работе для изучения одноэлектронных ионных соединений водород-протон ($H-p$) и однократно ионизованный гелий-протон (He^+-p) используется другой полностью релятивистский подход. В рамках приближения Борна–Оппенгеймера уравнение Дирака с двухцентровым потенциалом решается с помощью разложения волновой функции по B -сплайнам [24]. Построенный на B -сплайнах метод дуально-кинетического баланса (ДКБ) [25] был расширен на случай систем, обладающих аксиальной симметрией (А-ДКБ), в работе [26]. Недавно посредством А-ДКБ-подхода был проведен теоретический анализ тяжелых одноэлектронных квазимолекулярных соединений [27,28].

Мы применяем метод А-ДКБ для расчета основных и нескольких первых возбужденных квазимолекулярных термов легких ионов $H-p$ и He^+-p . По результатам вычислений производится детальный анализ адиабатических потенциальных поверхностей. В частности, рассматривается поведение основного и возбужденных квазимолекулярных термов в зависимости от межъядерного расстояния и проводится их классификация в рамках строгого релятивистского подхода. Обычно идентификация энергетических состояний молекул, наряду с корреляционными диаграммами, выполняется в нерелятивистском приближении, что приводит к необходимости ее адаптации на релятивистский случай. Наличие большого количества (псевдо)пересечений, а также тонкое расщепление усложняют классификацию адиабатических потенциальных поверхностей связанного электрона. Поэтому мы непосредственно сосредоточимся на вопросе прямого релятивистского определения квазимолекулярных термов.

2. Метод и результаты

Метод А-ДКБ

В приближении Борна–Оппенгеймера стационарное уравнение Дирака для электрона в двухцентровом потенциале имеет вид

$$[\alpha\mathbf{p} + \beta + V(\mathbf{r})] \Psi_n(\mathbf{r}) = E_n \Psi_n(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где \mathbf{r} — радиус-вектор электрона, \mathbf{p} — оператор импульса, α и β представляют собой матрицы Дирака. Двухцентрвый потенциал задается выражением

$$V(\mathbf{r}) = V_1(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_1|) + V_2(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_2|) \\ \equiv -\frac{\alpha Z_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_1|} - \frac{\alpha Z_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_2|}, \quad (2)$$

где $V_{1,2}(\mathbf{r})$ есть кулоновский потенциал, соответствующий ядрам с зарядами Z_1, Z_2 в точке нахождения электрона, задаваемой радиусом-вектором \mathbf{r} . Начало отсчета выбрано на оси квазимолекулы z между двумя ядрами так, что векторы $\mathbf{R}_{1,2}$ задают координаты ядер.

Для систем с осевой симметрией волновую функцию можно записать как

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G_1(r, \theta) e^{i(m_j-1/2)\varphi} \\ G_2(r, \theta) e^{i(m_j+1/2)\varphi} \\ iF_1(r, \theta) e^{i(m_j-1/2)\varphi} \\ iF_2(r, \theta) e^{i(m_j+1/2)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где m_j — проекция на ось z полного углового электрона j . Компоненты $G_{1,2}(r, \theta)$ и $F_{1,2}(r, \theta)$ дираковской функции можно представить в виде разложения

$$\phi(r, \theta) \cong \sum_{u=1}^4 \sum_{i_r=1}^{N_r} \sum_{i_\theta=1}^{N_\theta} C_{i_r, i_\theta}^u \Lambda B_{i_r}(r) Q_{i_\theta}(\theta) e_u. \quad (4)$$

Здесь набор $\{B_{i_r}(r)\}_{i_r=1}^{N_r}$ представлен B -сплайнами, зависимость по углу θ задается набором полиномов Лежандра $\{Q_{i_\theta}(\theta)\}_{i_\theta=1}^{N_\theta}$, $\{e_u\}_{u=1}^4$ — четырех-компонентные базисные вектора. Матрица Λ накладывает условие ДКБ на базисный набор [25]. Дальнейшие вычисления заключаются в численных расчетах, например, в недавних работах [22,23] была достигнута точность на уровне 27–32 значащих цифр для основного терма.

Для вычисления энергии связанного электрона используется подход, полностью аналогичный нерелятивистскому, т.е. численные расчеты проводятся для конкретного фиксированного межъядерного расстояния в приближении бесконечно тяжелых ядер. Стоит отметить, что решение двухцентрвого уравнения Дирака автоматически учитывает релятивистские эффекты. В то же время (хотя и достигнув выдающихся результатов) нерелятивистские методы с необходимостью включают расчет соответствующих релятивистских поправок в требуемом порядке.

В общем случае молекулярное энергетическое состояние электрона характеризуется проекцией полного углового момента на ось молекулы. Будучи сохраняющейся величиной для систем с осевой симметрией, такое описание приводит к вырождению по знаку m_j . Для гомоядерных систем, в которых два ядра идентичны, имеется дополнительное квантовое число g (gerade) для четных и u (ungerade) для нечетных состояний, выражающее симметрию относительно отражения в плоскости, перпендикулярной оси молекулы. Кроме того, конкретное энергетическое состояние электрона можно рассматривать в пределе нулевого межъядерного расстояния, т.е. в пределе „объединенного“ атома. Тогда „объединенный“ заряд ядра задается суммой Z_1 и Z_2 , и можно использовать обычные атомные обозначения энергетического состояния: nl_j , где n — главное квантовое число, l — орбитальный момент, а j — полный угловой момент электрона. Таким образом, электронный молекулярный терм можно определить по формуле $nl_j \lambda_p m_j$ [29], где λ — проекция орбитального момента электрона на ось молекулы, а p обозначает четность состояния при перестановке ядер (только для гомоядерных систем).

Аналогичные обозначения можно ввести, рассматривая предел бесконечного межъядерного расстояния, когда электрон локализован только на одном из ядер. В настоящей работе мы придерживаемся обозначений, соответствующих „объединенному“ атому.

Гомоядерный квазимолекулярный ион Н–р

В рамках метода А-ДКБ энергии гомоядерного соединения водород-протон, Н–р, возникают в результате численного решения двухцентрового уравнения Дирака (1) с разложением волновой функции, заданым, например, выражением (4). Согласно методу А-ДКБ [25,26], весь дираковский спектр энергий (включая отрицательный и положительный континуумы) воспроизводится в виде дискретного набора состояний с заданной проекцией углового момента, самые нижние из которых соответствуют реальным дискретным квазимолекулярным термам. В нерелятивистском случае состояние электрона в молекуле определяется абсолютной величиной проекции его орбитального углового момента на ось молекулы λ . Учет спина электрона приводит к тонкому расщеплению молекулярного терма на два состояния $\lambda + 1/2$ и $\lambda - 1/2$ [30].

Далее рассмотрим адиабатические потенциальные поверхности основного и первых четырех возбужденных квазимолекулярных состояний. Поскольку кривые для возбужденных состояний могут пересекать друг друга и (или) быть близкими по энергии, следует рассматривать и состояния, лежащие более высоко, в том числе состояния с большими значениями проекции m_j . На рис. 1 показаны адиабатические потенциальные кривые, полученные методом А-ДКБ.

Определение основного состояния, $1s_{1/2}\sigma_g$ ($m_j = -1/2$), не выявляет трудностей. В частности,

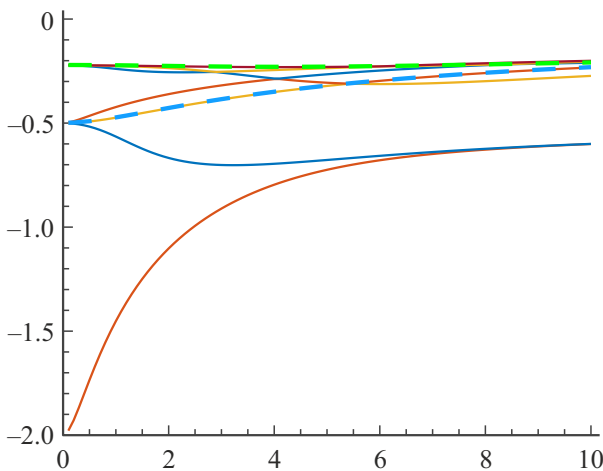


Рис. 1. Адиабатические потенциальные поверхности квазимолекулярного иона Н–р для первых семи состояний с $m_j = -1/2$ (сплошные линии) и первых двух состояний с $m_j = -3/2$ (штриховые линии). По оси ординат отложены энергии, а по оси абсцисс — межъядерное расстояние. Все величины представлены в атомных единицах.

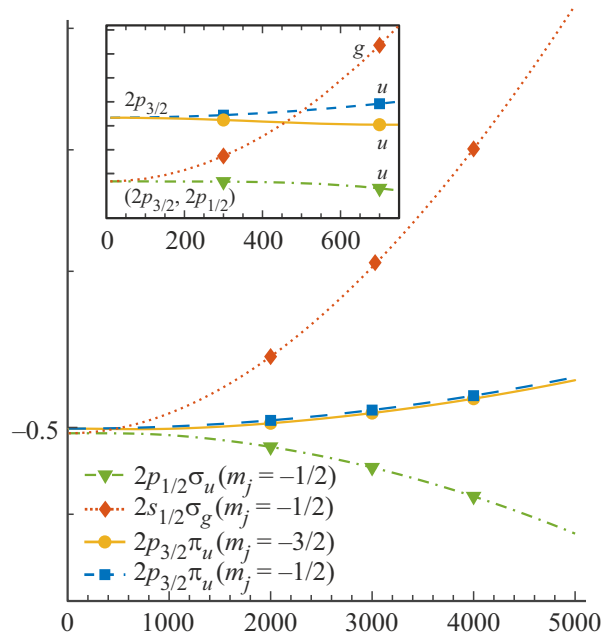


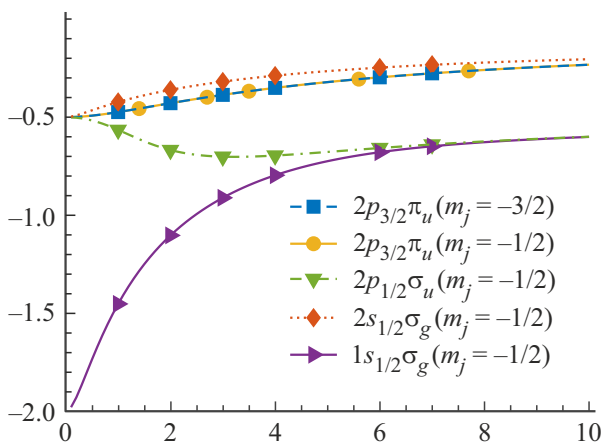
Рис. 2. Адиабатические потенциальные поверхности первых четырех возбужденных состояний иона H_2^+ в области малых межъядерных расстояний (fm). По оси ординат отложены энергии, а по оси абсцисс - межъядерное расстояние. Энергии представлены в атомных единицах.

в пределе объединенного атома эта адиабатическая кривая переходит в основное состояние иона с ядром, состоящим из двух протонов, ${}^2He^+$. Для него энергия в нерелятивистском пределе равна -2 атомным единицам (далее а.е.). Следует отметить, что четность состояний относительно перестановки ядер также может быть вычислена в рамках А-ДКБ-подхода, позволяя проводить идентификацию термов. Однако на масштабе рис. 1 кривые разных тонких подуровней неразличимы, и возможные пересечения или расщепления термов требуют отдельного анализа. Для этого рассмотрим область малых расстояний, где квазимолекулярные термы вырождены в нерелятивистском пределе. Для состояний с $n = 2$ в атомном ионе ${}^2He^+$ на рис. 2 представлены адиабатические поверхности первых четырех возбужденных уровней в зависимости от межъядерного расстояния в области нескольких тысяч ферми (вставлена область $R \leq 600$ fm).

Согласно рис. 2, расщепление состояния с нерелятивистской энергией объединенного атома -0.5 а.е. начинается с межъядерного расстояния ≈ 1000 fm. На вставке на рис. 2, соответствующей меньшим межъядерным расстояниям, видно тонкое расщепление уровней. Это расщепление хорошо известно и возникает в релятивистской теории Дирака для связанного атомного состояния. Численные результаты расчета для состояний $2p_{1/2}\sigma_u (m_j = -1/2)$, $2s_{1/2}\sigma_g (m_j = -1/2)$, $2p_{3/2}\pi_u (m_j = -1/2)$ и $2p_{3/2}\pi_u (m_j = -3/2)$ приведены в табл. 1. На основе полученных значений и теории

Таблица 1. Энергии связи первых четырех возбужденных состояний в квазимолекулярном ионе $H-p$ на малых межъядерных расстояниях. Значения энергий даны в а.е., расстояния представлены в fm

Состояние	R , fm		
	10	100	300
$2p_{1/2}\sigma_u(m_j = -1/2)$	-0.500033286	-0.500033287	-0.500033375
$2s_{1/2}\sigma_g(m_j = -1/2)$	-0.500033274	-0.500032098	-0.500022679
$2p_{3/2}\pi_u(m_j = -1/2)$	-0.500006658	-0.500006774	-0.500007638
$2p_{3/2}\pi_u(m_j = -3/2)$	-0.500006655	-0.500006538	-0.500005585

**Рис. 3.** Адиабатические потенциальные кривые основного и первых четырех возбужденных состояний квазимолекулярного иона $H-p$. По оси ординат отложены энергии, а по оси абсцисс — межъядерное расстояние. Все величины представлены в атомных единицах.

Дирака можно однозначно идентифицировать соответствующие состояния.

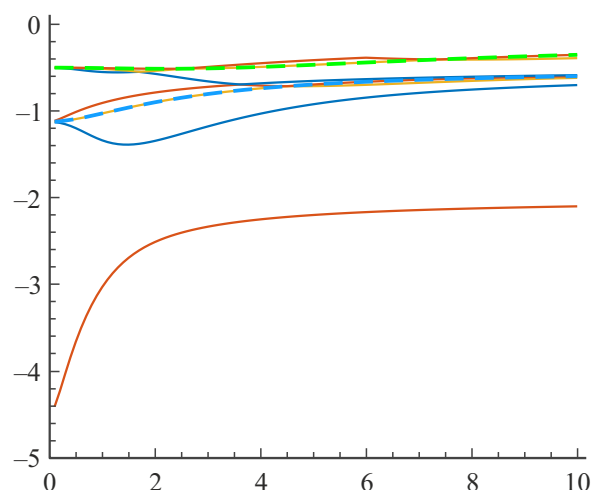
В частности, состояния $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ вырождены при $R \rightarrow 0$, их расщепление в низшем порядке определяется эффектами квантовой электродинамики (лэмбовским сдвигом). Тогда, согласно теории Дирака, верхние состояния отделены интервалом тонкой структуры и соответствуют атомному уровню $2p_{3/2}$. Два выходящих термина соответствуют разным проекциям полного углового момента: верхний $m_j = -3/2$, а нижний $m_j = -1/2$. Оба представляют собой квазимолекулярные π -термы и, следовательно, могут быть определены как $2p_{3/2}\pi_u(m_j = -3/2)$ для верхней кривой и $2p_{3/2}\pi_u(m_j = -1/2)$ для нижней.

Наконец, вставка на рис. 2 отчетливо демонстрирует пересечение квазимолекулярных термов $2p_{3/2}\pi_u(m_j = -3/2)$ и $2p_{3/2}\pi_u(m_j = -1/2)$ с одним из термов, исходящих из $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, в окрестности 450 fm. В то же время можно предположить, что в более точном расчете данное пересечение могло бы представлять собой расщепление термов. Согласно [1,31], пересечение адиабатических кривых возможно лишь для термов с различной симметрией.

Симметрия, в частности, определяется перестановкой ядер. Вычисляя соответствующую четность состояний, квазимолекулярные термы определены следующим образом: кривая, идущая вверх, $2s_{1/2}\sigma_g(m_j = -1/2)$, а кривая, идущая вниз, $2p_{1/2}\sigma_u(m_j = -1/2)$. Следовательно, $R \approx 450$ fm представляет собой точку пересечения. Пересечения/расщепления термов на рис. 1 анализируются аналогично и для других расстояний. Таким образом, рассматривая предел малых межъядерных расстояний, можно идентифицировать все квазимолекулярные термы. Окончательная картина адиабатических потенциальных поверхностей представлена на рис. 3.

Гетероядерный квазимолекулярный ион He^+-p

В данной части работы проводится детальный анализ классификации квазимолекулярных термов в рамках полностью релятивистского подхода на примере соединения однократно ионизованного гелия с протоном He^+-p . В этом случае картина становится несколько

**Рис. 4.** Адиабатические потенциальные кривые, полученные численным расчетом в рамках метода А-ДКБ, для первых семи состояний с $m_j = -1/2$ (сплошные линии) и первых двух состояний с $m_j = -3/2$ (штриховые линии) в одноэлектронном квазимолекулярном ионе He^+-p . По оси ординат отложены энергии, а по оси абсцисс — межъядерное расстояние. Все величины представлены в атомных единицах.

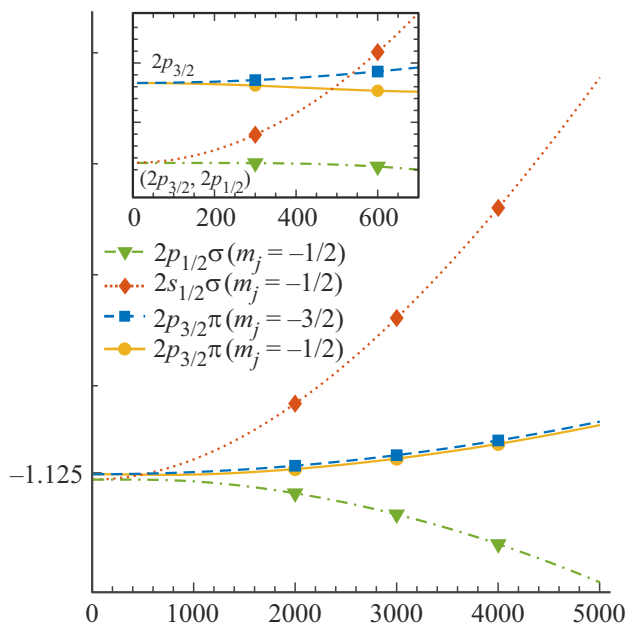


Рис. 5. Адиабатические потенциальные поверхности для первых четырех возбужденных состояний иона $\text{He}^+ - p$ в области малых межъядерных расстояний. По оси ординат отложены энергии (в атомных единицах), а по оси абсцисс — межъядерное расстояние (в fm).

иной из-за отсутствия четности состояний, устанавливаемой перестановочной симметрией ядер. Поэтому для определения пересечения или расщепления квазимолекулярных термов мы воспользуемся условием непрерывности адиабатических потенциальных поверхностей.

Как и ранее, адиабатические потенциалы основного и первых возбужденных состояний в соединении $\text{He}^+ - p$ изначально можно классифицировать только как наборы состояний с различными проекциями полного углового момента m_j . Схема квазимолекулярных термов представлена на рис. 4.

Нижняя кривая на рис. 4, как и ранее, представляет основное квазимолекулярное состояние $1s_{1/2}\sigma(m_j = -1/2)$. В пределе нулевого межъядерного расстояния (объединенный атом) данный терм переходит в основное состояние одноэлектронного иона с литиеподобным ядром. Следующие четыре вышележащие кривые вырождены в пределе нулевого межъядерного расстояния и представляют собой в нерелятивистском приближении состояние объединенного атома с $n = 2$ и т.д. для последующих состояний.

Для классификации первых четырех возбужденных квазимолекулярных термов рассмотрим предел малых межъядерных расстояний. Соответствующий график для расстояний $R \in [0, 5000]$ fm представлен на рис. 5, на котором также показана область $R \leq 600$ fm.

Численные значения квазимолекулярных энергий в зависимости от межъядерных расстояний для

состояний $2p_{1/2}\sigma(m_j = -1/2)$, $2s_{1/2}\sigma(m_j = -1/2)$, $2p_{3/2}\pi(m_j = -1/2)$ и $2p_{3/2}\pi(m_j = -3/2)$ даны в табл. 2. Последние позволяют идентифицировать состояния иона в пределе объединенного атома. В частности, в пределе $R \rightarrow 0$ видны вырожденные состояния $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$, которые формируют термы $2s_{1/2}\sigma(m_j = -1/2)$ и $2p_{1/2}\sigma(m_j = -1/2)$ соответственно. Два вышележащих состояния соответствуют состоянию объединенного атома $2p_{3/2}$, которое расщепляется на две компоненты с $m_j = -1/2$ (нижнее) и $m_j = -3/2$ (верхнее).

Согласно вставке на рис. 5, имеется точка, в которой необходимо определить, происходит пересечение или расщепление термов. Эта точка, как и в случае, рассмотренном в предыдущем разделе, находится в окрестности 450 fm. Нами было также обнаружено соответствующими численными расчетами, что эта точка практически не зависит от заряда ядер. В отличие от случая гомоядерной квазимолекулы идентификация пересечения/расщепления термов в данном случае может быть осуществлена только с использованием условия непрерывности адиабатических кривых. Поэтому в рамках метода А-ДКБ, отслеживая возможный минимум кривой, была численно рассчитана первая производная адиабатических потенциалов. Такого рода подход справедлив как для гетеро-, так и для гомоядерных систем, и также был использован для иона $\text{H} - p$. Согласно условию непрерывности, квазимолекулярные термы, выходящие из двух нижних вырожденных состояний, определяются как $2p_{1/2}\sigma(m_j = -1/2)$ и $2s_{1/2}\sigma(m_j = -1/2)$. Эти состояния в пределе объединенного атома соответствуют атомным уровням $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$. Далее, состояние $2p_{3/2}$, отделенное от них интервалом тонкой структуры в пределе $R \rightarrow 0$, расщепляется на квазимолекулярные термы $2p_{3/2}\pi(m_j = -1/2)$ (кривая, идущая вниз) и $2p_{3/2}\pi(m_j = -3/2)$ (кривая, идущая вверх). Такого рода

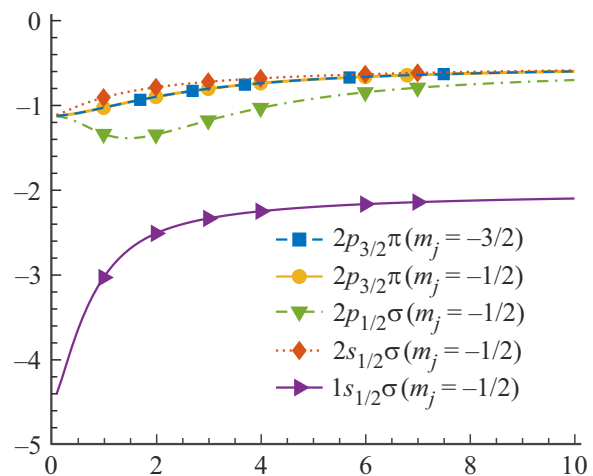


Рис. 6. Адиабатические потенциальные поверхности основного и первых четырех возбужденных состояний квазимолекулярного иона $\text{He}^+ - p$. По оси ординат отложены энергии, а по оси абсцисс — межъядерное расстояние. Все величины даны в атомных единицах.

Таблица 2. Энергии связи первых четырех возбужденных электронных состояний квазимолекулярного иона $He-p$ на малых межъядерных расстояниях. Значения энергий даны в атомных единицах, тогда как межъядерное расстояние в fm

Состояние	R , fm		
	10	100	300
$2p_{1/2}\sigma(m_j = -1/2)$	-1.125168533	-1.125168537	-1.125168886
$2s_{1/2}\sigma(m_j = -1/2)$	-1.125168474	-1.125163183	-1.125120996
$2p_{3/2}\pi(m_j = -1/2)$	-1.125033706	-1.125034232	-1.125038165
$2p_{3/2}\pi(m_j = -3/2)$	-1.125033695	-1.125033164	-1.125028878

картина качественно повторяет случай квазимолекулы $H-p$, рассмотренный выше.

Выполняя аналогичный анализ для точек пересечения/расщепления на больших межъядерных расстояниях, рис. 4, получаем окончательные результаты для кривых адиабатических потенциалов, представленные на рис. 6.

3. Заключение

В настоящей работе был проведен детальный анализ адиабатических потенциальных поверхностей, полученных в рамках полностью релятивистских расчетов. Используя метод А-ДКБ, были рассмотрены два примера: гомоядерный квазимолекулярный ион $H-p$ и гетероядерный квазимолекулярный ион He^+-p . Путем численных расчетов были построены адиабатические потенциальные кривые для основного и нескольких первых возбужденных состояний. Квазимолекулярные термы соединений $H-p$ и He^+-p представлены на рис. 1 и 4 соответственно [32].

Поскольку адиабатические потенциальные кривые имеют явные пересечения, необходимо проводить точную идентификацию термов. Хотя классификация квазимолекулярных термов хорошо представлена в рамках нерелятивистского подхода [1,31], в полностью релятивистской картине возникает дополнительная сложность. Это связано с наличием состояний, невырожденных в теории Дирака и соответствующих разным полным угловым моментам электрона. Идентификация квазимолекулярных термов в соединениях $H-p$ и He^+-p была проведена следующим образом. Сначала рассматривался предел $R \rightarrow 0$, в котором исследуемую систему можно описать как объединенный одноэлектронный ион (в качестве альтернативы можно рассматривать предел бесконечного межъядерного расстояния). В рамках теории Дирака соответствующие энергетические состояния можно однозначно идентифицировать с учетом тонкого расщепления. Затем, вводя стандартные обозначения молекулярных термов, анализировались точки пересечения/расщепления кривых адиабатических потенциалов.

В случае гомоядерной квазимолекулы пересечение/расщепление характеризуется, в частности, с помощью четности состояний, определяемой перестановкой

ядер в плоскости, перпендикулярной оси молекулы. Данная четность квазимолекулярных термов рассчитывается в рамках подхода А-ДКБ. Однако для гетероядерных соединений данная симметрия отсутствует. Таким образом, для интерпретации пересечения/расщепления в такого рода системах, например в He^+-p , мы использовали условие непрерывности адиабатических потенциальных поверхностей. Отслеживая значения первой производной адиабатической кривой, можно определить, имеет ли место пересечение или расщепление термов, находя возможные экстремумы или „скачки“ значений.

Сочетание в настоящей работе анализа адиабатических кривых на малых межъядерных расстояниях с исследованием точек пересечения/расщепления позволило определить основное и первые четыре (в качестве примера) возбужденных квазимолекулярных терма как в гомо-, так и гетероядерном соединениях $H-p$, He^+-p . Соответствующие результаты представлены на рис. 3 и 6. Представленный анализ не ограничивается одноэлектронными легкими квазимолекулярными ионами и, очевидно, может быть применен к более тяжелым квазимолекулярным соединениям.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00250, <https://rscf.ru/project/23-22-00250/>

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Л.Д. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)* (Наука, М., 1963).
- [2] А.С. Давыдов. *Квантовая механика* (Наука, М., 1973).
- [3] L. Pauling. *Chemical Reviews*, **5**, 173 (1928).
- [4] R. Hemsworth, H. Decamps, J. Graceffa, B. Schunke, M. Tanaka, M. Dremel, A. Tanga, H.D. Esch, F. Geli, J. Milnes, T. Inoue, D. Marcuzzi, P. Sonato, P. Zaccaria. *Nuclear Fusion*, **49**, 045006 (2009).

- [5] I.B. Abdurakhmanov, S.U. Alladustov, J.J. Biley, A.S. Kadyrov, I. Bray. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, **60**, 095009 (2018).
- [6] A.C.K. Leung, T. Kirchner. *The European Phys. J. D*, **73**, 246 (2019).
- [7] T. Kereselidze, I. Noselidze, J.F. Ogilvie. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **501**, 1160 (2020).
- [8] S. Schiller, D. Bakalov, V.I. Korobov. *PoS*, **113**, 023004 (2019).
- [9] J.-P. Karr, L. Hilico, J.C.J. Koelemeij, V.I. Korobov. *Phys. Rev. A*, **94**, 050501 (2016).
- [10] V. Korobov, T. Tsogbayar. *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **40**, 2661 (2007).
- [11] T. Tsogbayar, V. Korobov. *The J. Chem. Phys.*, **125**, 024308 (2006).
DOI: 10.1063/1.2209694
- [12] V.I. Korobov, J.-P. Karr, M. Haidar, Z.X. Zhong. *Phys. Rev. A*, **102**, 022804 (2020).
- [13] D. Bakalov, V.I. Korobov, S. Schiller. *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 243001 (2006).
- [14] V.I. Korobov, L. Hilico, J.-P. Karr. *Phys. Rev. Lett.*, **112**, 103003 (2014).
- [15] V.I. Korobov, L. Hilico, J.-P. Karr. *Phys. Rev. Lett.*, **118**, 233001 (2017).
- [16] L. Yang, D. Heimemann, D. Kolb. *Chem. Phys. Lett.*, **178**, 213 (1991).
- [17] O. Kullie, D. Kobl. *The European Phys. J. D: Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, **17**, 167 (2001).
- [18] A. Ishikawa, H. Nadashima, H. Nakatsuji. *J. Chem. Phys.*, **128**, 124103 (2008).
- [19] S.R. McConnell, A.N. Artimyyev, M. Mai, A. Surzhykov. *Phys. Rev. A*, **86**, 052705 (2012).
- [20] И.И. Тупицын, Д.В. Миронова. *Опт. и спектр.*, **117**, 351 (2014).
- [21] D. Mironova, I. Tupitsyn, V. Shabaev, G. Plunien. *Chem. Phys.*, **449**, 10 (2015).
- [22] O. Kullie, S. Schiller. *Phys. Rev. A*, **105**, 052801 (2022).
- [23] H.D. Nogueira, J.-P. Karr. *Phys. Rev. A*, **107**, 0428817 (2023).
- [24] W.R. Johnson, S.A. Blundell, J. Sapirstein. *Phys. Rev. A*, **37**, 307 (1988).
- [25] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yrokhin, G. Plunien, G. Soff. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 103405 (2004).
- [26] E.B. Bozenbaum, D.A. Glazov, V.M. Shabaev, K.E. Sosbova, D.A. Telnov. *Phys. Rev. A*, **89**, 012514 (2014).
- [27] A.A. Kotov, D.A. Glasov, A.V. Malyshev, A.V. Vladimirova, V.M. Shabaev, G. Plunien. *X-Ray Spectrometry*, **49**, 110 (2020).
- [28] A.A. Kotov, D.A. Glazov, V.M. Shabaev, G. Plunien. *Atoms*, **9**, 44 (2021). DOI: 10.3390/atoms9030044.
- [29] E. Fermi, E. Teller. *Phys. Rev.*, **72**, 399 (1947).
- [30] E. Fermi. *Molekuly i kristally* (Tbilisi State University, 2013).
- [31] J. Waltev, H. Eyring, G. Kimball, J. Walter. *Quantum Chemistry* (J. Wiley and Sons, 1944).
- [32] D. Solovyev, A. Anikin, A. Danilov, D. Glazov, A. Kotov. Light one-electron quasimolecular ions within the finite-basis-set method for the two-center dirac equation (2023). arXiv:2310.04057 [physics.atom-ph].