

Использование непрерывных дробей для описания высоковозбужденных вращательных состояний молекулы H_2O

В.И. Стариков*

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
634050, г. Томск, пр. Ленина, 40

Поступила в редакцию 18.02.2009 г.

Описание высоковозбужденных вращательных состояний молекулы H_2O проведено с использованием непрерывных дробей $D(a, x)$, зависящих от элементарных вращательных операторов, связанных с переменной x , и от параметра a , определяющего асимптотическое поведение вычисленных уровней энергий. Непрерывные дроби $D(a, x)$ являются одним из представлений для производящих функций эффективного вращательного гамильтониана нежестких молекул типа H_2X и используются для совместного описания вращательных уровней энергий с $J \leq 42$, $K_a \leq 32$ первых восьми колебательных состояний молекулы H_2^{16}O .

Ключевые слова: непрерывные дроби, высоковозбужденные состояния, молекула H_2O ; continued fractions, highly excited rotational levels, H_2O molecule.

Введение

Известно, что описание высоковозбужденных вращательных состояний легких нежестких молекул типа H_2X в рамках традиционного полиномиального представления H_W эффективного вращательного гамильтониана H сталкивается с определенными проблемами [1, 2]. Одной из них является плохая сходимость H_W по вращательному оператору J_z , который является компонентой оператора полного углового момента \mathbf{J} . Как следствие, гамильтониан H_W практически не пригоден для описания вращательных состояний молекулы с большими значениями вращательного квантового числа K_a , являющегося собственным значением для оператора J_z . Для молекулы H_2O ряд H_W имеет радиус сходимости по квантовому числу K_a порядка 10–12 для основного колебательного состояния, и этот радиус быстро убывает с возбуждением квантового числа v_2 , связанного с изгибным колебанием большой амплитуды [1, 2]. К настоящему времени для молекулы H_2^{16}O получены экспериментальные данные для вращательных уровней энергий с вращательными квантовыми числами $J \leq 42$, $K_a \leq 32$ [3], что выходит далеко за пределы радиуса сходимости гамильтониана H_W .

Был предложен ряд неполиномиальных форм гамильтониана H , обзор которых можно найти в [1, 2]. Часть из этих форм базируется на точно решаемой модели для «изгибно-вращательного» взаимодействия в молекуле. Эти модели приводят

к различным производящим функциям $F(\mathbf{J}^2, J_z)$ и $\chi(\mathbf{J}^2, J_z)$ для эффективного гамильтониана H , который принимает вид

$$H = F(\mathbf{J}^2, J_z) + \frac{1}{2}\{\chi(\mathbf{J}^2, J_z), J_z^2 + J_z^{-2}\}. \quad (1)$$

Функции $F(\mathbf{J}^2, J_z)$ и $\chi(\mathbf{J}^2, J_z)$, разложенные в ряд Тейлора по операторам \mathbf{J}^2 и J_z , приводят к полиномиальному представлению H_W . Обычно F и χ представляют в виде разложения в ряд по параметру малости λ , например $F = F_0 + \lambda F_1 + \lambda^2 F_2$, и в качестве нулевого приближения $F_0(\mathbf{J}^2, J_z)$ берется функция $h(\mathbf{J}^2, J_z)$, т.е.

$$F_0(\mathbf{J}^2, J_z) = h(\mathbf{J}^2, J_z). \quad (2)$$

Операторная функция $h(\mathbf{J}^2, J_z)$ является аналитическим решением уравнения Шредингера с модельным потенциалом (сечением внутримолекулярного потенциала вдоль переменной, описывающей колебания большой амплитуды в молекуле) и с модельным «изгибно-вращательным» взаимодействием. Функция $\chi(\mathbf{J}^2, J_z)$ определяется также через $h(\mathbf{J}^2, J_z)$. Различные представления для функций $F(\mathbf{J}^2, J_z)$, $\chi(\mathbf{J}^2, J_z)$ и $h(\mathbf{J}^2, J_z)$ можно найти в [1, 2, 4].

Цель настоящей работы заключалась в проведении обработки экспериментальных уровней энергий первых восьми колебательных состояний молекулы H_2^{16}O с максимально известными на сегодняшний день значениями вращательных квантовых чисел $J \leq 42$, $K_a \leq 32$. Для этого использованы производящие функции F и χ в форме непрерывных дробей $D(a, x)$, а экспериментальные уровни

* Виталий Иванович Стариков (star@iao.ru).