

Ps

1966

Configuration interaction wave function for positronium hydride. Oliver G. Ludwig (Carnegie Inst. of Technol., Pittsburgh, Pa.) and Robert G. Parr. *Theoret. Chim. Acta* 5(5), 440-5(1966)(Eng). A configuration interaction wave function is obtained for the pseudoatom positronium hydride (consisting of 1 proton, 1 positron, and 2 electrons), by using Slater orbitals centered on the proton as basis functions. A pos. dissociation energy is calculated for the process $\text{PsH} \rightarrow \text{Ps} + \text{H}$. Comparison is made with previous calculations of this energy, and its actual value is predicted to be 0.0009 a.u. The 2-quantum annihilation rate also is calculated. 17 references.

RCTC

C.A. 1966. 65.9
130 H 49

1968

Кв. мех.
расчет

12 Б27. Энергия связи молекулы позитрония. Sh a r -
m a R. R. Binding energy of the positronium molecule.
«Phys. Rev.», 1968, 171, № 1, 36—42 (англ.)

В результате специального выбора вариационной функции удалось найти надежное значение для энергии связи молекулы позитрония, состоящей из двух электронов и двух позитронов. Энергия связи этой молекулы оказалась равной 0,948 эв, что в несколько раз больше значения, полученного ранее с помощью менее строгих оценок. Была правильно решена проблема исключения кинетич. энергии центра масс и определения относительных кинетич. энергий позитронов и электронов. Вариационная волновая функция содержала явно все расстояния между позитронами и электронами и зависела от пяти параметров.

И. С. Мисуркин

X. 1969. 12

1968

Социализм!

(масса)

И. В. Лер,
раб.

1 Д98. Энергия связи молекулы позитрония. Sharma R. R. Binding energy of the positronium molecule. «Phys. Rev.», 1968, 171, № 1, 36—42 (англ.)

Проблема точного теоретич. определения энергии связи молекулы позитрония, т. е. комплекса, состоящего из двух электронов и двух позитронов, стала особенно важной после эксперим. обнаружения подобной экситонной молекулы в Si, где положит. дырки играют роль позитронов. Гамильтониан молекулы позитрония сначала упрощается путем исключения кинетич. энергии центра масс системы, не дающей вклада в энергию связи, а затем выражается в эллиптич. координатах, что дает возможность записать вариационную волн. ф-цию в форме, использованной Джеймсом и Кулиджем для исследования молекулы водорода:



ф. 1969. 19

$$g = N^{-1/2} \sum_{mnjkr} C_{mnjkr} \Psi_{mnjkr}$$

$$\Psi_{mnjkr} = (2\pi)^{-1} \exp[-\delta(\lambda_1 + \lambda_2)] \times \\ \times (\lambda_1^m \lambda_2^n \mu_1^j \mu_2^k \rho^p + \lambda_1^n \lambda_2^m \mu_1^k \mu_2^j \rho^p),$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \mu_1, \mu_2, \rho$ — эллиптич. координаты. Пробная волн. ф-ция содержит пять членов, соответствующих разным наборам значений $mnjkr$, и выражение для общей энергии молекулы минимизировано относительно вариац. параметров σ и C_{mnjkr} . Полученное значение энергии связи молекулы позитрония 0,948 эв приблизительно в 7 раз больше вычисленного ранее с более грубой вариац. ф-цией (Ogé A. «Phys. Rev.», 1947, 71, 913). Б. С. Александров

Рс

1975

11 Д243. Измерения тонкой структуры первого возбужденного уровня позитрония. Mills A. P., Berko S., Canter K. F. Fine-structure measurement in the first excited state of positronium. «Phys. Rev. Lett.», 1975, 34, № 25, 1541—1544 (англ.)

Измерено расщепление уровней $\Delta(2^3S_1 - 2^3P_2)$ позитрония с помощью возбуждения РЧ-переходов в слабом магн. поле (~ 50 гс) в присутствии буферного газа: $\Delta = 8628,4 \pm 2,8$ Мгц. Приведено описание и схема эксперим. установки. Результаты измерений Δ находятся в хорошем согласии с расчетами, выполненными с помощью ур-ния Бете-Салпетера с точностью до членов $\alpha^3 R$: $\Delta_T = 8625,14$ Мгц. Библ. 10. В. П. Шевелько

тонкая
структура

ф. 1975 № 11

Обзор:

Позитроний
и мюоний

1975

13 Б106. Химия позитрония и мюония. Ache H. J. (Positronium and muonium chemistry. «Hot Atom Chem. Status Rept. Proc. Panel, Vienna, 1974». Vienna, 1975, 81—105 (англ.)

Обзор. Проанализировано современное состояние химии новых атомов — позитрония и мюония. Обсуждены вопросы взаимодействия термализованных атомов позитрония с различными соединениями. Рассмотрены общие проблемы химии горячих атомов позитрония. Раздел, относящийся к химии мюония, представляет обзор работ по исследованиям взаимодействия мюония с различными соединениями. Обсуждены перспективы развития химии позитрония и мюония. Библ. 42.

Л. А. Корытко

X/1976 N13

P₃ - позитрон, позитроний

1976

7 Б15. Приближенная теория молекулярных орбиталей для связанных с молекулами позитронов и атомов позитрония. Schrader D. M., Wang C. M. Approximate molecular orbital theory for positrons and positronium atoms bound to molecules. «J. Phys. Chem.», 1976, 80, № 22, 2507—2518 (англ.)

A₃

Рассмотрена теория молек. систем, содержащих наряду с ядрами и электронами позитроны. Волновые функции систем записаны в приближении МО; для определения МО получены ур-ния ССП и введена параметризация, характерная для приближения ППДП. Параметризация интегралов, содержащих орбитали позитронов, выполнена по интерполяц. схеме, опирающейся на известные эксперим. данные о сродстве к позитронию атомов водорода, кислорода и фтора и радикала ОН. Полученные значения параметров приведены для атомов второго периода. В рамках процедуры ППДП/2 проведены расчеты сродства к позитрону и позитронию для ~60 молекул. Найдено, что среди малых диамагнитных молекул связывать позитрон может только молекула LiH, а позитроний — молекула О₃. Установлена линей-

X. 1977 №7

ная корреляция между константами ионизации нек-рых слабых к-т НА и сродством к позитрону соотв-щего аниона A^- . Результаты вычислений сродства к позитрону для отдельных соединений согласуются с эксперим. данными, напр., для нитробензола, тогда как для др. соединений, напр., для п-бензохинона, такое согласие отсутствует. В соответствии с эксперим. данными теория предсказывает стабильность связанного состояния позитрония с NO_2 .

А. В. Немухин

11.

чет

Обзор: Позитрон

1976

6 Б79. Позитрон и химия позитрония. Табата
Донэо. «Гэндай кагаку, Chem. Today», 1976, № 66,
52—60 (япон.)
Обзор В популярной форме рассматриваются процес-
сы аннигиляции позитронов и образования позитрония
в конденсированных средах. Кратко описываются экс-
перим. методы исследования физ.-хим. св-в позитрония.
Приводится ряд примеров хим. р-ций позитрония.
Л. А. Корытко

Х. 1977 № 6

70422.8944
Ph, TC, MGU

(позитроний)
42529
Ps

1977

* 8-18045

Carlson E.R., Hughes V.W., Lindgren I.

Precision determination of the fine-structure interval in the ground state of positronium. III.

"Phys. Rev. A: Gen. Phys.", 1977, 15, N 1,
241-250 (англ.)

0859 лнк.

824 829

315 U

ВИНИТИ

Раттисей 5111

1974

PsO

PsS

20 Б92. Теоретический анализ возможности существования PsO и PsS. Farazdel Abbas, Cade Paul E. Theoretical considerations regarding the existence of PsO and PsS. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 47, № 3, 584—588 (англ.)

На основании анализа эксперим. данных и по аналогии с водородсодержащими соединениями предположено, что в р-циях позитрония (Ps) с анионами кислотсодержащих к-т H_2PO_4^- , HSO_4^- , ClO_4^- и NO_3^- в водн. р-рах может образоваться частица PsO (I) либо сама по себе, либо в кач-ве интермедната. В связи с этим исследована стабильность (I) и PsS (II) по отношению к диссоциации на Ps и O(^3P) или S(^3P) путем расчетов в рамках ограниченного метода ССП. Получены оценки нижнего предела энергии диссоциации I и II на O или S и Ps, соотв. равные $-0,47$ и $-0,70$ эв. Высказано мнение, что учет корреляц. поправки к величине позитронного сродства O $^-$ мог бы привести к предсказанию связанного состояния для I. То резюме

существование
молекулы

(до)

Х. 1974 N 20

Позитроний
Стрел. мск

1979

12 Д14. Автоионизационные состояния отрицательного иона позитрония. Но Y. K. Autoionization states of the positronium negative ion. «Phys. Rev.», 1979, A19, № 6, 2347—2352 (англ.).

Методом комплексного вращения изучены автоионизационные синглетные состояния отрицательного иона позитрония $(e^-e^+e^-)$. С использованием 161-членной волн. ф-ции Хиллерааса получены следующие значения резонансных параметров E_r (энергии) и Γ (ширины): $4,73400 \pm 0,00003$ и $(1,16 \cdot 10^{-3}) \pm (0,03 \cdot 10^{-3})$ для состояний ниже порога $n=2$ ионизации позитрония и $5,84119 \pm \pm 0,00014$ и $(1,97 \cdot 10^{-3}) \pm (0,14 \cdot 10^{-3})$ для состояний ниже порога $n=3$ (все величины в электрон-вольтах). Более высокие резонансы найдены методом стабилизации: $E_r = 5,0723$ и $5,9928$ эв для $n=2$ и $n=3$ соответственно. Полученные результаты для наинизших резонансов использованы для нахождения резонансных параметров аналогичных систем: $e^- \mu^+ e^-$, $\mu^- p \mu^-$, $\mu^- d \mu^-$ и $\mu^- t \mu^-$. А. Чесный

автоиониз.

7.1979, №12

Ps (позитроний)

1979

11 Б904. Химия позитрония и мюония. Positronium and Muonium Chemistry. Symp. 2nd Joint CIC/ACS Conf., Montreal, May 31—June 2, 1977. Ed. Ache Hans J. Washington, D. C., 1979. VIII, 376 pp., ill. (Adv. Chem. Ser., № 175). (англ.)

Дан краткий обзор данных, представленных на Второй совместной конференции Отделения Физической химии АН СССР и Канадского Химического института, проходившей с 31 мая по 2 июня 1977 г. в городе Монреаль (Канада) и посвященной проблемам химии позитрония и мюония.

В. А. Сараев

(обзор)

2.1980.114

Позитроний

Мюоний

9 Б62. О химии легких экзотических атомов. Hógváth D. On the chemistry of the lightest exotic atoms. (Объедин. ин-т ядер. исслед. Дубна. Сообщ.), 1979, № E14—12824, 17 pp., ill. (англ.; рез. рус.)

Обсуждены хим. аспекты образования трех водородоподобных экзотич. атомов: позитрония, мюония и рл-мезоатома. Для позитрония предсказания по двум механизмам образования, модель Оре с р-циями «горячего» позитрония и трековская модель сравниваются с эксперим. наблюдениями в растворах. Препринт

Химия
атомов

Л. 1980. №9

Мюонии³

1980

9 ДЗ. Мюоний. Muonium. Hughes Vernon W.
«Exotic Atoms'79: Fundam. Interactions and Struct. Mat-
ter Proc. 2nd Course Int. School Phys. Exot. Atoms,
Erice, 1979». New York—London, 1980, 3—18 (англ.)

Краткий обзор некоторых недавних эксперим. работ,
посвященных изучению свойств системы положительно
заряженный мюон и электрон (мюоний). Обсуждаются
измерения расщепления между уровнями сверхтонкой

(обзор)

пер-
чль

Ф 1980 № 9

структуры основного состояния мюония. Эксперимент поставлен по классич. схеме микроволнового магн. резонанса на мюонном пучке микроволнового магн. резонанса на мюонном пучке мезонной фабрики в Лос-Аламосе. Измерения позволили получить сверхтонкое расщепление и магн. момент мюона с высокой точностью. Результаты сравниваются с предсказаниями квантовой электродинамики. Отмечается, что точность эксперимента выше точности существующих расчетов. Обсуждаются пути дальнейшего улучшения точности эксперимента и теоретич. вычислений, возможности эксперим. определения лэмбовского сдвига для мюония, а также поиски прямых переходов мюоний — антимюоний, которые предсказываются единой теорией слабых и электромагн. взаимодействий. Для постановки таких экспериментов необходимо получить мюоний в вакууме. Описаны первые эксперим. попытки получения мюония в вакууме при тепловых и высоких энергиях. Обсуждаются измерения сверхтонкого расщепления основного состояния мюонного мезоатома гелия ($^4\text{He}^+-e$). Измерения, аналогичные измерениям для мюония, дали величину расщепления в согласии с теоретич. расчетами.

Н. М. К.

1980

 $e^+ e^-$
 позитроний

 тонкая
 структура
 (τ)

Д4. Позитроний. Positronium. Hughes Ver-
 non W. «Exotic Atoms'79: Fundam. Interactions and
 Struct. Matter Proc. 2nd Course Int. School Phys. Exot.
 Atoms, Erice, 1979». New York—London, 1980, 19—22
 (англ.)

Кратко обсуждаются эксперим. данные о тонкой струк-
 туре уровней позитрония (e^+e^-) и о его распадных
 свойствах. Описаны и обсуждаются предполагаемые в
 ближайшее время измерения лэмбовского сдвига в по-
 зитронии с помощью техники двухфотонной лазерной
 спектроскопии. Кратко описан недавний эксперимент
 по определению времени жизни состояния с $n=1$ орто-
 позитрония. Показано, что полученное эксперим. время
 жизни хорошо согласуется с предсказаниями теории.
 Отмечен интерес к проблемам несохранения четности в
 позитронии и кратко обсуждаются соответствующие
 эксперименты.

Н. М. К.

ф 1980 №9

H-Ps

[arXiv:10776] 1980.

Ps-He

Martin D.W., Fraser P.

Ps-Ps

J. Phys. B: Atom. and Mol.

непрямой
взаимог.

Phys., 1980, 13, 3383-87

The van der Waals force between
positronium and ● light atoms.

Мюоний

1981

16 Б1087. Изотопный эффект и динамика химических реакций мюония в газовой фазе. Соппог J. N. L. Isotope effects and chemical reaction dynamics of muonium in the gas phase. Muon Spin Rotation. Proc. 2nd Int. Top. Meet., Vancouver, Aug. 11—15, 1980. «Hyperfine Interact.», 1981, 8, № 4—6, 423—434 (англ.)

Обзор выполненных в последние годы исследований, посвященных теор. описанию механизма простых газо-фазных р-ций с участием мюония. Подробно рассмотрены след. р-ции: $\text{Mu} + \text{F}_2 \rightarrow \text{MuF} + \text{F}$; $\text{Mu} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{MuCl} + \text{Cl}$; $\text{Mu} + \text{H}_2 \rightarrow \text{MuH} + \text{H}$ и $\text{Mu} + \text{D}_2 \rightarrow \text{MuD} + \text{D}$. Проведено сравнение результатов, полученных с применением различных теор. моделей, с эксперим. данными. Библ. 33.

В. А. Сараев

Обзор

Х. 1981. N 16

Ps_2

1981

10 Д90. Исследование аннигиляции молекулы позитрония. Тисенко, Ю. А. «Укр. физ. ж.», 1981, 26, № 5, 832—836 (рез. англ.)

исследов
аннигиляции

Исследуется распад молекулы позитрония Ps_2 на электрон, позитрон и фотоны. Определены диффер. вероятности распадов. Вычислены полные вероятности аннигиляции Ps_2 с образованием двух и трех фотонов. Изучена кривая угловой корреляции γ -квантов при распаде Ps_2 на два фотона, электрон и позитрон и вычислена ее ширина. Максимум распределения фотонов по импульсам центра масс аннигилирующей пары, $|P'|$ достигается при $|P'| = 0,2$ ат. ед. Библ. 14. Автореферат

Ф. N 10. 1981

Позитроний

1982

12 Д469. Возбуждение двухфотонного перехода $1^3S_1-2^3S_1$ в позитронии. Excitation of the positronium $1^3S_1-2^3S_1$ two-photon transition. Chu Steven, Mills Allen P., Jr. «Phys. Rev. Lett.», 1982, 48, № 19, 1333—1337 (англ.)

90 ухротно.
переход

Проведены первые эксперименты по оптич. возбуждению атомов позитрония (Ps). С применением метода бездоплеровской двухфотонной спектроскопии возбуждался переход $1^3S_1-2^3S_1$. Медленные позитроны образовывались в импульсном источнике на основе ^{58}Co , затем при реакции на монокристаллич. Si получались атомы Ps. Установлено, что из 20 позитронов, получаемых в каждом импульсе, около 4 образуют атомы Ps. Для возбуждения Ps использовалось излучение перестраиваемого лазера на красителе с шириной линии генерации 800 МГц, стабилизированного с точностью 500 МГц, двухфотонные резонансы фиксировались по

ФР. 1982, 18, N 12

сигналу ионизации атомов лазерным излучением с состояния 2^3S_1 с использованием метода регистрации единичных атомов. Полученный при сканировании частоты лазерного излучения резонанс имел ширину 1,5 ГГц при отношении сигнал/шум 20/1; амплитуда резонанса пропорциональна квадрату интенсивности излучения. Зарегистрирован заметный сдвиг резонанса вследствие эффекта Штарка при наложении внешнего электрич. поля $E=160-280$ В/см. Измеренное расщепление $1^3S_1-2^3S_1$ согласуется с расчетным значением с точностью 0,5 ГГц. Библ. 22. С. 4.



Позитроний

1982

Уровни
(энергии)

97: 171469s Corrections to the Balmer energy differences in positronium. Fulton, Thomas (Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *Phys. Rev. A* 1982, 26(3), 1794-5 (Eng). The abs. values of the ground-state ($n = 1$) levels of positronium and of $\Delta E(2^3S_1 - 1^3S_1)$ are given through order α^3 Ry.

C.A. 1982, 97, N 20.

Соединения Рз

1982

2 Д109. Химическая стабильность и приближенная квантовая механика. Chemical stability and approximate quantum mechanics. Schrader D. M. «Positron Annihilation. Proc. 6 Int. Conf., Arlington, Tex., 3—7 Apr., 1982». Amsterdam e. a., 1982, 71—81 (англ.)

Обзор теоретич. и эксперим. работ, в которых исследуются связанные (химически стабильные) состояния различных электрон-позитронных систем: позитрония (Ps), отрицат. иона Ps^- , гидрида PsH , молекулы Ps_2 и целого ряда других более сложных соединений позитрония с атомами и молекулами. Для теоретич. описания простейших систем используется вариационный принцип Рэлея — Ритца с различными вариантами пробных волн. функций, а более сложные позитрон-атомные и позитрон-молекулярные системы описываются волн. функциями в приближении Хартри — Фока. Приведены результаты теоретич. расчетов энергий связи, скоростей аннигиляции, верхней и нижней границ сродства атомов и молекул к

расчет E, A_e ;

ср. 1984, 18, 42

позитрону и позитронию. В ряде случаев проведено сравнение результатов теоретич. расчетов и эксперим. данных. Отмечается хорошее согласие ф-ций угловой корреляции аннигиляционного излучения. Подчеркивается неадекватность описания электрон-позитронных корреляций на малых расстояниях волн. ф-циями Хартри — Фока, что приводит к плохому согласию теоретич. и эксперим. значений для скорости аннигиляции. Для PsCl теория дает $\lambda_{2\gamma} = 0,235 \text{ нс}^{-1}$, а эксперимент $\lambda_{2\gamma} \simeq 2 \text{ нс}^{-1}$.
Библ. 81. В. П. П.

Рз-

Ом. 18190

1983

4 Д32. Новый расчет свойств иона позитрония.
New calculation of the properties of the positronium ion.
Bhatia A. K., Drachman Richard J. «Phys.
Rev. A: Gen. Phys.», 1983, 28, № 4, 2523—2525 (англ.)

Описан вариационный расчет связанных состояний $^1S^e$ и $^3P^e$ системы $e^-e^-e^+$ (иона Ps^-) в нерелятивистском приближении с использованием пробной обобщенной функции Хиллера с двумя нелинейными и 120—220 линейными параметрами. Установлено, что энергия связи основного ($^1S^e$) состояния системы по отношению к $Ps + e^-$ составляет 0,3266770 эВ. Соотношение оптимальных значений параметров показывает, что Ps^- в этом состоянии представляет собой Ps со слабо связанным вторым электроном. Найдено значение скорости распада $Ps^- (^1S^e)$ $\Gamma = 2,0858 \text{ нс}^{-1}$, удовлетворительно согласующееся с измеренным ($\Gamma = 2,0017 \text{ нс}^{-1}$). Показано, что $Ps^- (^3P^e)$ нестабилен относительно распада на $Ps (n=2)$ и e^- . Исследована зависимость стабильности состояния $^3P^e$ произвольной 3-фермионной системы $a^-a^-b^+$ от соотношения масс частиц a и b .

А. В. З.

расчет Γ

ср. 1984, 18, № 4

Ps^-
(незгусток)

[Om. 18190]

1983

99: 164225x New calculation of the properties of the positronium ion. Bhatia, A. K.; Drachman, Richard J. (Lab. Astron. Sol. Phys., Goddard Space Flight Cent., Greenbelt, MD 20771 USA). *Phys. Rev. A* 1983, 28(4), 2523-5 (Eng). The positronium neg. ion Ps^- , the system composed of two electrons and a positron, is reinvestigated theor. Using a Hylleraas wave function with two nonlinear parameters and more than 200 linear terms, excellent values were obtained of binding energy and annihilation lifetime of the particle-stable ground state. In addn., the 3P_e state is probably not stable against breakup into $Ps(n=2) + e^-$ as proposed by A. P. Mills (1981). Improved limits on the crit. "positron" mass for binding the 3P_e state were also obtained.

(неоп. pac-
rem)

C.A. 1983, 99, N20

$e^+(H_2O)_4$

1983

8 Б1023. Неэмпирический расчет гидратированного позитрона. An ab initio study of the hydrated positron. Bugaenko V. L., Grishkin V. L. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 103, № 3, 187—190 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 4—31 ГФ проведен расчет энергии гидратации позитрона e^+ . Рассмотрен тетраэдрич. кластер $e^+(H_2O)_4$ (I), в к-ром молекулы воды ориентированы к e^+ атомами О. Геометрич. параметры H_2O приняты равными станд. значениям. Варьировалось расстояние R между атомами О и центром тетраэдра. Согласно полученным результатам, энергия гидратации e^+ при $R=3$ А составляет 1,48 эВ и на 0,3 эВ больше соотв. величины для e^- . При оптим. значении $R=2,38$ А энергия гидратации e^+ равна 1,87 эВ. Равновесный радиус кластера I меньше равновесного значения R для сольватированного электрона на 0,27 А.

Э. Герман

теор-
расчет

х. 1984, 19, № 8

P₃₂

1987

Abdel-Raouf M. A.

Z. Phys. D: At., Mol. Clus-
ters 1987, 6 (4), 345-9.

( cell. H₂ ; III)

Р-

OT 26572 1987

178 Д36. Адиабатическое изучение отрицательного иона позитрония. Adiabatic study of the positronium negative ion. Botero Javier. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1987, 35, № 1, 36—50 (англ.)

В методе гиперсферич. координат с использованием адиабатич. приближения вычислены энергии нижних состояний отрицат. иона позитрония (Ps^-) симметрии 1S_e , 1P_o , 3P_o , 3P_e , 1D_e при заданной и варьируемой величине гиперрадиуса. Особенности расположения этих потенц. кривых позволяют понять характер спектра возбужденных состояний и резонансов Ps^- . Напр., кривая для 3P_e терма на обладает достаточным притягивательным характером, поэтому ниже $n=2$ порога отсутствует квазисвязанное состояние (соответствовавшее бы $2P^2\ ^3P_e$ метастабильному состоянию H^-), однако она способна удерживать резонанс формы выше порога. Библ. 44.

А. Ф. Шестаков

ф. 1987, 18, № 8

$$P_3 \equiv e^+ e^-$$

positronium

(OM. 31463)

1989

Mundinger H.-J.,

Arnold K.P. et al.

Europhys. Lett., 1989, 8, N4, 339-44

First Observation of the
Free Pionium ● Atom in
Vacuum.

BCL

1992

У 22 Б1019. Энергия связи в хлориде позитрония. Квантовый расчет методом Монте Карло. Binding energy of positronium chloride: A quantum Monte Carlo calculation /Schrader D. M., Yoshida Takashi, Iguchi Kaoru //Phys. Rev. Lett. .—1992 .—68 ,№ 22 .—С. 3281—3283 .—Англ.

Хлорид позитрония PsCl представляет собой хлорид-ион, содержащий позитрон. Энергия связи в PsCl рассчитана квантовым методом Монте-Карло для позитрона и восьми валентных электронов хлора при использовании модельного потенциала для десяти остовных электронов хлора. Она составляет $1,92 \pm 0,16$ эВ, что несколько превышает величину, полученную ранее с модельным потенциалом, но прекрасно согласуется с оценкой, данной на основании экспериментов по аннигиляции позитронов в хлоре. За исключением трех- и четырехчастичных систем, это первый точный расчет энергии связи в соединении, содержащем позитрон.

Ю. В. Новаковская

И.Н.

Х. 1994, №22

1993

PsF

PsCl

PsBr

Ps - no gap for it

(Do)

119: 56622x Binding energies of positronium fluoride and positronium bromide by the model-potential quantum-Monte-Carlo method. Schrader, D. M.; Yoshida, Takashi; Iguchi, Kaoru (Chem. Dep., Marquette Univ., Milwaukee, WI 53233 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(9), 7185-90 (Eng). A method previously used by the authors in an accurate calcn. of the binding energy of positronium chloride is applied to positronium fluoride and positronium bromide. The binding energies obtained with this method are PsF, 1.93 ± 0.17 eV; PsCl, 1.91 ± 0.16 eV; PsBr, 1.14 ± 0.11 eV.

C A. 1993, 119, N 6

Мониторинг позитронии

1993

120: 62702k Nonadiabatic variational calculations for the ground state of the positronium molecule. Kozlowski, Pawel M.; Adamowicz, Ludwik (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *Phys. Rev. A* 1993, 48(3), 1903-8 (Eng). For a four-particle system consisting of two electrons and two positrons, the nonadiabatic wave function is constructed with the use of an expansion in terms of explicitly correlated Gaussian-type basis functions and a Cartesian-coordinate lab. frame. Motions of all particles are correlated at the same time in the wave function. The energy of the center-of-mass motion is effectively eliminated from the total nonrelativistic energy of the system by defining the variational principle based on the internal Hamiltonian. The ground-state energy is computed for different lengths of Gaussian expansions and values are compared with previous literature results. The best estn. of the binding energy of the positronium mol. is 0.435 eV.

Черный
цвет, черн.
пачка

C.A. 1994, 120, N 6

Позитроний

1994

123: 96136f Precision atom interferometry and an improved measurement of the $1^3S_1-2^3S_1$ transition in positronium. Chu, S. (Physics Department, Stanford University, Stanford, CA 94305 USA). *Proc. Int. Sch. Phys. "Enrico Fermi"* 1992 (Pub. 1994). 120th, 317-55 (Eng). A review, with 68 refs., which discusses the use of stimulated Raman transitions in the manipulation of laser-cooled atoms, the use of stimulated Raman transitions to cool sodium atoms to an effective temp. of $<100\text{nK}$, and the measurement of the $1^3S_1-2^3S_1$ interval in positronium with an accuracy of 2.6 ppb.

$1^3S_1-2^3S_1$



C.A. 1995, 123, N 8

1995

F: PsCl

P: 3

8Б155. Расчет позитрониевых соединений PsLi, PsF и PsCl во втором порядке вариационной теории возмущений. Calculation of positronium compounds, PsLi, PsF, and PsCl, by second-order variational perturbation method / Saito S. L. // Chem. Phys. Lett. - 1995. - 245, N 1. - С. 54-58. - Англ.

Во втором порядке вариац. теории возмущений с разложением по парциальным волнам рассчитаны энергии корреляции, ионизации позитрона и энергии связи позитрония (E) для основных ($\{2,1\}S$) состояний PsLi, PsF и PsCl ($E = -2,19$; $2,24$ и $1,62$ эВ) и для возбужденных ($\{2,1\}P$) PsF и PsCl

($-0,16$ и $-0,05$). Значения для основных состояний PsF и PsCl хорошо согласуются с эксперим. данными и данными расчетов квантовым методом Монте-Карло. Библ. 31.

Р. Ж. Х. N8, 1996

Ps₂

1996

21 Б121. Время жизни молекулы позитрония. Исследование с явно коррелированными функциями гауссового типа Бойса. Lifetime of positronium molecule. Study with Boys' explicitly correlated Gaussians / Kozlowski Pawel M., Adamowicz Ludwik // J. Phys. Chem. — 1996. — 100, № 15. — С. 6266—6271. — Англ. . Место хранения ГПНТБ

Обсуждены результаты нерелятивистских неадиабатических вариационных расчетов времени жизни и скорости двухфотонной аннигиляции молекулы Ps_2 (e^+e^-)₂ с четырехчастичной волновой функцией в базисе явно коррелированных функций гауссового типа. Е. В. Борисов

ж. 1996, № 21

P₃₂

[Om. 38817]

1997

Dario Bressanini, Massimo
Mella et al.,

Chem. Phys. Lett.,
1997, 272, 370-375

A quantum application ● Monte Carlo
to H₂⁺ and P₃₂⁺

Розенфельд

1997

129: 86138t **Positrons: a challenge and opportunity for QMC.**
Schrader, D. M. (Chemistry Department, Marquette University, Milwaukee, WI 53201-1881 USA). *Recent Adv. Comput. Chem.* 1997, 2(Recent Advances in Quantum Monte Carlo Methods), 163-179 (Eng), World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.. A review is presented with 72 refs. with discussion on positron and positronium, appropriate quantum mechanics, QMC vs. basis expansions of wave functions, electron-positron correlations, review of modern bound state calcns., resonances. Data are presented on Ps, PsH, H⁻, PsF, PsCl, PsBr, PsOH.

Розенфельд

Ps, PsH, H⁻,

PsCl, PsBr,

PsOH

C. A. 1998, 129, 27