



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P4-87-225

В.И.Коробов, И.В.Пузынин, С.И.Виницкий

ВАРИАЦИОННЫЙ РАСЧЕТ
СЛАБОСВЯЗАННЫХ
ВРАЩАТЕЛЬНО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ
МЕЗОМОЛЕКУЛ $dd\mu$ И $dt\mu$

Направлено в журнал "Physics Letters B"

1987

1. Явление резонансного образования мезомолекул dd_μ и dt_μ в реакциях $d_\mu + D_2 \rightarrow [(dd_\mu)dee]^*$ и $t_\mu + D_2 \rightarrow [(dt_\mu)dee]^*$ и т.д. интенсивно изучается как теоретически^{/1/}, так и экспериментально^{/2/}. Критическим пунктом в вычислениях скоростей этих реакций является знание нерелятивистских энергий ϵ_{Jv} слабосвязанных состояний dd_μ и dt_μ с полным угловым моментом $J = 1$ и вибрационным числом $v = 1$. Энергия связи слабосвязанных состояний приблизительно равна 1 эВ при глубине эффективных потенциалов ~ 600 эВ. Требуемая точность составляет 0,001 эВ, т.е. относительная точность составляет 10^{-6} . До недавнего времени вычисления слабосвязанных состояний были выполнены лишь в адиабатическом представлении задачи трех тел^{/3/}. Эти расчеты стимулировали развитие вариационных методов для этой проблемы^{/4/}. В данной статье мы развиваем наш вариационный подход^{/5/} для исследования слабосвязанных состояний с использованием вариационных функций молекулярного типа в сфероидальной системе координат^{/6/}. Мы вводим две группы вариационных параметров, позволяющих лучше аппроксимировать делокализацию волновой функции по сравнению с работой^{/6/}. Мы также используем улучшенное распределение степеней независимых переменных в вариационных функциях по сравнению с работой^{/5/}. Это позволило нам достичь высокой точности в наших оценках и получить следующие экстраполированные значения для уровней энергии $-\epsilon_{11}(dd_\mu) = (1,9750 \pm 0,0002)$ эВ, $-\epsilon_{11}(dt_\mu) = (0,6604 \pm 0,0002)$ эВ. В работе приводятся также вычисленные значения γ -факторов с использованием вариационных функций.

2. Мы исходим из нерелятивистского уравнения Шредингера для системы трех частиц, состоящей из двух ядер с массами $M_a \geq M_b$ и с положительными единичными зарядами и отрицательного мюона с массой m_μ . Гамильтониан этой системы в сфероидальных координатах $\Omega = \{\xi, \eta, R\}$ имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} \\ H_{10} & H_{11} \end{pmatrix},$$

где

$$H_{kk} = -\frac{1}{2M} \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{MR^2} \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} [(\xi - \kappa\eta)(\xi^2 - 1) \left(\frac{\partial}{\partial \xi} + R \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial R} \right) +$$

/1/

$$\begin{aligned}
& + (\eta - \kappa \xi)(1 - \eta^2) \left(\frac{\partial}{\partial \eta} + R \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial R} \right) + \frac{1 - k}{MR^2} + \\
& + \frac{2k}{R^2} \frac{\{ (1 + (4M)^{-1} [\xi^2 + \eta^2 - 2 - 2\kappa(\xi\eta + 1)]) \}}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} - \\
& - \frac{1}{2} \{ 1 + (4M)^{-1} [\xi^2 + \eta^2 - 2 - 2\kappa(\xi\eta + 1)] \} \frac{4}{R^2} \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \times \\
& \times \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] - \frac{4\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)} + \frac{1}{R}, \quad k = 0, 1
\end{aligned}$$

$$H_{10} = \frac{1}{MR^2} \frac{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}{\xi^2 - \eta^2} \left[(\eta - \kappa \xi) \frac{\partial}{\partial \xi} - (\xi - \kappa \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} \right],$$

$$H_{01} = -H_{10} - \frac{1}{MR^2} \frac{\xi\eta - \kappa}{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}.$$

Здесь $M = M_0 / m_a$, $M_0 = M_a M_b / (M_a + M_b)$, $m_a = m_\mu M_a / (M_a + m_\mu)$, $\kappa = (M_b - M_a) / (M_b + M_a)$ и используется система единиц $e = h = m_a = 1$. Сферические координаты ξ и η определены соотношениями $\xi = (r_a + r_b) / R$, $\eta = (r_a - r_b) / R$, где R - расстояние между ядрами, r_a и r_b - расстояния между ядрами a и b и мюоном соответственно. Вариационная функция молекулярного типа имеет две компоненты σ и π , которые выбираются в виде $F_0 \equiv F_\sigma = F_{\sigma g} + F_{\sigma u}$ и $F_1 \equiv F_\pi = F_{\pi g} + F_{\pi u}$:

$$F_{\sigma p} = \sum_{t=1}^2 \sum_{i,j,k(p)}^{(\sigma \text{ тп})} a_{ijk(p)} R^{\frac{i-1}{\xi} \frac{j-1}{\eta} \frac{k(p)-1}{e} - (\alpha^{(tp)} + \beta^{(tp)}) \xi} R$$

$$i, j = 1, 2, \dots; \quad i > j, \quad k(g) = 2\ell - 1, \quad k(u) = 2\ell, \quad \ell = 1, 2, \dots$$

$$F_{\pi p} = \sum_{t=1}^2 \sum_{i,j,k(p)}^{(\pi \text{ тп})} a_{ijk(p)} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} R^{\frac{i-1}{\xi} \frac{j-1}{\eta} \frac{k(p)-1}{\eta}} \times$$

$$\times e^{-(\gamma^{(tp)} + \nu^{(tp)}) \xi} R$$

$$i, j = 1, 2, \dots; \quad i > j + 1, \quad k(g) = 2\ell, \quad k(u) = 2\ell - 1, \quad \ell = 1, 2, \dots$$

Значения нелинейных параметров даны в табл. 1.

Таблица 1

Значения нелинейных параметров вариационной функции /2/.
Использовались следующие системы единиц - для dd_μ : $e = h = m_\mu = 1$, для dt_μ : $e = h = m_\mu = 1$

	p	α_1	β_1	α_2	β_2	γ_1	ν_1	γ_2	ν_2
dt_μ g	1,7979	0,7063	0,0005	0,5137	1,7979	0,7192	0,0051	0,5651	
dt_μ g	2,3339	0,6976	0,0005	0,5200	2,0295	0,7103	0,0051	0,6088	
u	1,2177	0,4313	0,0005	0,4313	1,8365	0,6596	0,0507	0,5074	

3. Наша задача состоит в сведении уравнения Шредингера с гамильтонианом /1/ к алгебраической задаче на собственные значения

$$Ax = \lambda Bx, \quad x = \{x_1, \dots, x_n\} = \{a_{ijk(p)}^{(\sigma \text{ тп})}, a_{ijk(p)}^{(\pi \text{ тп})}\}, \quad /3/$$

и решении ее методом обратных итераций с регуляризацией. Мы выполнили аналитическое интегрирование для нахождения матричных элементов в задаче /3/, используя вариационные функции /2/. Заметим, что полученная задача на собственные значения плохо обусловлена. Для ее регуляризации мы используем следующее уравнение:

$$Ax = \lambda(B + \delta I)x, \quad /4/$$

где δ - малый параметр. Значение δ варьировалось в диапазоне $10^{-13} \div 10^{-11}$. Это позволило нам выполнить вычисления с точностью 10^{-8} эВ.

Энергия ϵ_{11} каждой мезомолекулы $\epsilon_{11} = (\lambda + \frac{1}{2}) m_a 2Ry$ была вычислена на серии увеличивающихся наборов базисных функций. Результаты представлены в табл. 2 и 3. Здесь i - номер серии, p_1 - число членов в вариационной функции. В вычислениях использовались следующие значения масс частиц и константы Ридберга:

$$M_t = 5496,918 m_e, \quad M_d = 3670,481 m_e,$$

$$M_\mu = 206,7686 m_e, \quad Ry = 13,605804 \text{ эВ}.$$

В табл. 2 также представлены наши предыдущие вычисления^{/5/}, выполненные при $m_\mu = 206,769$. Сравнение этих вычислений с представленными здесь показывает, что поправка на погрешность в массе m_μ практически не зависит от p и составляет величину 10^{-4} эВ. Это дало возможность нам не проводить трудоемкий расчет с $p = 1286$, а ввести эту поправку в значение, вычисленное ранее.

Таблица 2.

Сходимость значений энергии связи $-\epsilon_{11}$ для мезомолекулы $dd\mu$ /эВ/

i	n_i	$-\epsilon_{11}(n_i)^5$ $m_\mu = 206,769 m_e$	$-\epsilon_{11}(n_i)$ $m_\mu = 206,768 m_e$
1	304	1,96933	1,96941
2	449	1,97274	1,97284
3	607	1,97368	1,97379
4	819	1,97431	1,97442
5	1286	1,97465	1,97475*
∞		1,9749+0,0002	1,9750+0,0002

* Значение было получено с помощью предыдущего расчета /5/ с учетом поправки на новую массу мюона.

Таблица 3

Сходимость значений энергии связи $-\epsilon_{11}$ для мезомолекулы $dt\mu$ /эВ/

i	n_i	$-\epsilon_{11}(n_i)$
1	542	0,65114
2	596	0,65223
3	927	0,65691
4	1483	0,65889
5	1513	0,65923
6	2084	0,65968
∞		0,6604+0,0002

Таким образом, наши вычисления уровней энергии мезомолекул для различных масс мюона показали, что погрешность представленных результатов сравнима с известной сегодня точностью масс частиц.

4. Уточненное значение ϵ_{11} для каждой мезомолекулы было найдено из условия минимизации функционала

$$\Phi(\epsilon_n, c, \alpha) = \sum_{i=1}^m [\epsilon_{11}(n_i) - \epsilon_n - c n_i^{-\alpha}]^2 / (\beta n_i^{-2}),$$

где m - число серий, β - нормировочный множитель. Функционал соответствует экстраполяционной формуле

$$\epsilon_{11} = \epsilon_{11}(n) - c n^{-\alpha}, \quad /4/$$

обычно применяемой в вариационных расчетах /4/. Анализ результатов с помощью формулы /4/ показал, что $\alpha \approx 2$. Экстраполированное значение ϵ_n и значения ошибок также приведены в таблицах. Сравнения с лучшими вычислениями других авторов представлены в табл.4. Видно, что наши расчеты имеют лучшее качество и более точны.

Таблица 4

Сравнение различных расчетов энергии связи $-\epsilon_{11}$ слабосвязанных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ /в эВ/

	Gocheva et al /3/	Bhatia, Drachman /4/	Frolov, Efros /4/	Наша работа /5/	Наст. статья
	1,956 (844)	1,862 (364)	1,97110 (350)	1,97465 (1286)	1,97475 (1286)
экстра- поляция	-	1,87	1,972+0,001	1,9749+0,0002	1,9750+ +0,0002
	Gocheva et al /3/	Chi-Yu Hu /4/	Frolov, Efros /4/	Наша работа /5/	Наст. статья
	0,656 (844)	0,628 (440)	0,60719 (400)	0,65889 (1495)	0,65968 (2084)
экстра- поляция	-	-	0,6554+0,0150	0,663+0,002	0,6604+ +0,0002

5. Вычисленные волновые функции были использованы для нахождения γ -факторов /8/ мезомолекулы $dd\mu$ ($m_a^{-1} = m_{d\mu}^{-1} = M_d^{-1} + m_\mu^{-1}$)

$$\gamma_{d\mu}^{11} = \frac{1}{2} \int R^2 dR [F_\sigma(dd\mu)(\xi\eta R) |_{\xi=1, \eta=\pm 1}]^2$$

и мезомолекулы $dt\mu$ ($m_a^{-1} = m_{t\mu}^{-1} = M_t^{-1} + m_\mu^{-1}$),

$$\gamma_{t\mu}^{11} = \frac{1}{2} \int R^2 dR [F_\sigma(dt\mu)(\xi\eta R) |_{\xi=1, \eta=-1}]^2,$$

$$\gamma_{d\mu}^{11} = \frac{1}{2} \int R^2 dR [F_\sigma(dt\mu)(\xi\eta R) |_{\xi=1, \eta=+1}]^2.$$

Они определяют отношение вероятностей нахождения мюона в окрестности ядра мезомолекулы и соответствующем мезоатоме. Получены следующие значения γ -факторов:

$$\gamma_{d\mu} = 0,4965 \quad \gamma_{t\mu} = 0,7974, \quad \gamma_{d\mu} = 0,1992,$$

и они хорошо согласуются с полученными в адиабатических расчетах ^{18/}:

$$\gamma_{d\mu} \approx 0,4965 \quad \gamma_{t\mu} = 0,7989, \quad \gamma_{d\mu} = 0,2051.$$

Эти значения могут быть использованы для расчетов сверхтонкой структуры слабосвязанных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ ^{19/}.

В заключение авторы выражают благодарность профессору Н.Н.Говоруну за поддержку и профессору Л.И.Пономареву за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ponomarev L.I., Fiorentini G. - Invited paper presented at the International Symposium on Muon Catalized Fusion. Tokyo, Japan, September 1-3; 1986; Prepr. IFUP-TH 27/86, Pisa, 1986.
2. Bystritsky V.M. et al. - Sov.Phys.JETP Lett., 1980, 31, p.228. Kammel P. et al. - Phys.Lett., 1982, 112B, 319; Phys.Rev., 1983, A28, p.261. Jones S.E. et al. - Phys.Rev.Lett., 1983, 51, p.1757. Balin D.V. et al. - Phys.Lett., 1984, 141B, p.173. Breunlich W.H. et al. - Invited paper presented at the International Symposium on Muon Catalized Fusion. Tokyo, Japan, September 1-3, 1986; Preprint LBL-22560, Berkeley, 1986.
3. Vinitzky S.I. et al. - Sov.Phys.JETP, 1980, 52, p.353. Gocheva A.D. et al. - Phys.Lett., 1985, 153B, p.349.
4. Bhatia A.K., Drachman R.J. - Phys.Rev., 1984, A30, p.2138. Chi-Yu Hu. - Phys.Rev., 1985, A32, p.1245. Frolov A.M., Efros V.D. - J.Phys., 1985, B18, p.1265.
5. Vinitzky S.I. et al. - In: JINR Rapid Commun. No.19-86, Dubna: JINR, 1986, p.40.
6. Halpern A. - Phys.Rev.Lett., 1986, 13, p.660.
7. Cohen E.R. - Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1976, 18, p.587. Wapstra A.H., Bos K. - Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1977, 19, p.175.
8. Bakalov D. - Preprint JINR 4-80-409, Dubna, 1980.
9. Bakalov D. et al. - Phys.Lett., 1985, 616B, p.5.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 апреля 1987 года.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика