

B - 486

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

4 - 11701

ВИНИЦКИЙ
Сергей Ильич

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ В ЗАДАЧЕ
О СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЯХ СИСТЕМЫ ТРЕХ ТЕЛ
С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Специальность 01.04.02 -
теоретическая и математическая физика
Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1978

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук

Л.И. ПОНОМАРЕВ.

кандидат физико-математических наук

И.В. ПУЗЫНИН.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук

Ю.Н. ДЕМКОВ,

доктор физико-математических наук

Ю.А. СИМОНОВ.

Ведущее научно-исследовательское учреждение:
Физический институт АН СССР им. П.Н. Лебедева.

Защита диссертации состоится " " _____ 1978 года на заседании Специализированного ученого совета К 047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований (Московская обл., г. Дубна).

Автореферат разослан " " _____ 1978 года.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук

В.И. ЖУРАВЛЕВ

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы. В последние годы в мезоатомной физике активно исследуются как теоретически, так и экспериментально процессы, происходящие при торможении и остановке M^- -мезонов в смесях изотопов водорода ^{1/1/}.

В настоящее время большое внимание уделяется изучению процессов образования мезомолекул ppm , pdm ^{2/2/} и т.д., и особенно процессу резонансного образования мезомолекул ddm и dtm ^{3/3/}.

Знание скоростей этих процессов представляет значительный интерес в связи с явлением катализа реакции синтеза ядер изотопов водорода в M -мезомолекулах ^{3/3/}.

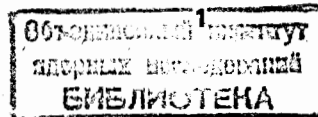
Для вычисления скоростей резонансных процессов необходимо с высокой точностью найти уровни энергии и волновые функции M -мезомолекул.

Существующие подходы, см. обзор ^{1/1/}, не позволяют получить информацию о наиболее интересных высоковозбужденных слабосвязанных состояниях M -мезомолекул, которые определяют резонансный характер их образования, установленный в эксперименте по измерению скорости образования ddm -мезомолекул, проведенном недавно в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ ^{4/4/}.

Таким образом, для количественного объяснения и уверенной интерпретации экспериментов, проводимых и планируемых в настоящее время, необходимо иметь алгоритм, позволяющий вычислять с высокой точностью энергию связи и волновые функции возбужденных слабосвязанных состояний M -мезомолекул, которые представляют частный случай системы трех частиц, взаимодействующих по закону Кулона.

Основная цель работы состояла в том, чтобы развить метод решения задачи о связанных состояниях системы трех тел с кулоновским взаимодействием, надежно работающий вблизи границы континуума (т.е. при энергии связи системы, близкой к нулю), и вычислить с его помощью все уровни энергии и волновые функции M -мезомолекул изотопов водорода с точностью, достаточной для количественного объяснения результатов эксперимента.

Научная новизна и практическая ценность. В данной диссертации впервые в полной мере реализован адиабатический метод ^{5/5/} решения задачи о связанных состояниях системы трех тел с кулоновским взаимодействием, надежно работающий вблизи границы континуума.



Реализованный в диссертации алгоритм был использован для вычисления всех уровней энергии M - мезомолекул и волновых функций, представляющих относительное движение ядер в M - мезомолекулах с точностью ($\sim 0,1$ эВ), достаточной для количественного объяснения эксперимента¹⁴⁷.

Данный подход может быть использован для расчета связанных состояний различных систем трех тел с кулоновским взаимодействием. В частности, нами был выполнен расчет системы $e^+e^-e^+$.

Развитый в работе алгоритм численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы ~ 40 обыкновенных дифференциальных уравнений на основе непрерывного аналога метода Ньютона⁶⁷ может быть использован при решении широкого класса задач современной физики.

Качественно новый физический результат, полученный в данной диссертации, состоит в том, что в мезомолекулах $dd\mu$ и $dt\mu$ найдены высоковозбужденные слабосвязанные уровни в состояниях с орбитальным моментом $J=1$ и колебательным квантовым числом $\nu=1$, с энергией связи $E_{11}(dd\mu) = -2$ эВ и $E_{11}(dt\mu) = -1$ эВ (при глубине эффективного потенциала задачи ~ 600 эВ).

Наличие этих уровней позволяет количественно описать процесс резонансного образования $dd\mu$ - и $dt\mu$ - мезомолекул^{3,47}, что важно для планируемых в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ экспериментов по измерению скоростей резонансного образования мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$.

Следующие результаты выдвигаются для защиты

1) Система обыкновенных интегродифференциальных уравнений, описывающих относительное движение ядер в адиабатическом представлении задачи трех тел.

2) Асимптотические разложения для эффективных потенциалов задачи трех тел, взаимодействующих по закону Кулона, для произвольных зарядов одноименно заряженных частиц (ядер).

3) Устранение одной из основных трудностей адиабатического метода, связанной с неверным определением предела диссоциации системы трех тел на атом и ядро.

4) Схема теории возмущений с непрерывным включением взаимодействия.

5) Схема теории возмущений, позволяющая численно находить собственные значения и собственные функции задачи Штурма-Лиувилля для системы обыкновенных интегродифференциальных уравнений.

6) Алгоритм численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы 30-40 обыкновенных дифференциальных уравнений.

7) Вычисление всех известных уровней M - мезомолекул изотопов водорода с абсолютной точностью $\sim 0,1$ эВ, а также энергии связи системы $e^+e^-e^+$.

8) Нахождение высоковозбужденных слабосвязанных уровней в мезомолекулах $dd\mu$ и $dt\mu$ в состояниях с орбитальным моментом $J=1$ и колебательным квантовым числом $\nu=1$, с энергией связи $E_{11}(dd\mu) = -2$ эВ и $E_{11}(dt\mu) = -1$ эВ.

Апробация работы. Результаты данной диссертации докладывались и обсуждались на семинарах Лаборатории теоретической физики, Лаборатории ядерных проблем, Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединённого института ядерных исследований, кафедры теоретической физики Ленинградского государственного университета, а также на Международном симпозиуме по проблемам мезонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе (г. Дубна, 7-10 июня, 1977 г.), на III Всесоюзной школе по электронным и атомным столкновениям (г. Красновидово, 13 октября, 1977 г.), на VII Международной конференции по физике высоких энергий и структуре ядра (г. Цюрих, 28 августа-2 сентября, 1977 г.), на Международном совещании по программированию и математическим методам решения физических задач (г. Дубна, 20-23 сентября 1977 г.).

Публикации. Результаты настоящей диссертации опубликованы в девяти работах.

Объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и четырех приложений, она содержит 150 страниц машинописного текста, 14 рисунков и библиографический список из 96 названий.

Содержание работы

Во введении дан краткий обзор типичных механизмов образования мезомолекул $pd\mu$ и $dd\mu$ в смесях H_2, D_2, T_2 .

Сформулированы основные задачи, поставленные в диссертации, связанные с необходимостью вычисления высоковозбужденных уровней M - мезомолекул, а также основные идеи и новые

возможности адиабатического метода^{/5/} в задаче о связанных состояниях системы трех тел (M - мезомолекулы), взаимодействующих по закону Кулона (влиянием электронных оболочек молекул H_2 , D_2 или T_2 можно пренебречь ввиду малости мезоатомной единицы длины $a_\mu = 2,56 \cdot 10^{-11}$ см).

Отмечено, что существенный прогресс в использовании адиабатического метода связан с разработкой эффективных алгоритмов решения задачи двух центров квантовой механики^{/7/}, т.е. задачи о движении отрицательно заряженной частицы (мезона) с некоторой эффективной массой m_{ab} в поле двух закрепленных ядер.

Рассмотрена общая структура построения диссертации и кратко перечислены основные полученные результаты.

В главе 2 выводится система обыкновенных интегродифференциальных уравнений для волновых функций $\chi_j(R)$, представляющих относительное движение ядер с массами M_a и M_b :

$$\left\{ \frac{d^2}{dR^2} + 2ME - V_{ii}^J(R) \right\} \chi_i(R) = \sum_{i \neq j} V_{ij}^J(R) \chi_j(R), \quad (I)$$

где $\sum = \sum_m \sum_{n_2} \left\{ \sum_{n_1} + \int dk \right\}$, $M = \frac{M_0}{m_{ab}}$, $M_0 = \frac{M_a M_b}{M_a + M_b}$, $R = |\vec{R}|$ - расстояние между ядрами, m_{ab} - эффективная масса.

В § 2.1 вводится система координат Якоби задачи трех тел. Отмечается, что произвол в разбиении полного гамильтониана H на кинетическую T и потенциальную W части (движение центра масс системы выделено) приводит к разному выбору эффективной массы задачи m_{ab} .

В § 2.2 движение мезона рассматривается в системе координат, вращающейся вместе с вектором $\vec{R} = \{R, \theta, \phi\}$, приводится выражение для гамильтониана H системы трех частиц с учетом сложения моментов мезона \vec{L} и ядер \vec{l} в полный момент $\vec{J} = \vec{L} + \vec{l}$. Осуществляется разложение полной волновой функции системы трех тел по симметризованным D - функциям^{/8/} ("молекулярное" представление^{/9/}).

В § 2.3 приводится уравнение Шредингера системы трех частиц в "молекулярном" представлении, полученное усреднением по угловым переменным координат системы трех тел.

В § 2.4 вводится определение адиабатического базиса как полного набора решений задачи двух центров^{/7/}. Для них построено

удобное асимптотическое разложение, основанное на результатах работ^{/10/}. Индекс j соответствует квантовым числам $[n_1, n_2, m]$ дискретного спектра и $[kn_2, m]$ непрерывного спектра задачи двух центров по классификации "разъединенных" атомов^{/7/}.

В § 2.5 получена система уравнений (I) усреднением уравнения Шредингера в "молекулярном" представлении по движению мезона (по адиабатическому базису $|j\rangle$). Выражения для операторов, соответствующих эффективным потенциалам $\langle i | H | j \rangle + \delta_{ij} \frac{d^2}{dR^2} = V_{ij}^J(R)$ представлены в сферической системе координат^{/7/} для трех разных разбиений исходного гамильтониана H на T и W , что соответствует трем выборам эффективной массы мезона m_{ab} : $m_a = m_\mu M_a / (m_\mu + M_a)$ - приведенная масса мезона изолированного атома ($m_\mu M_a$), $m_x = 4m_\mu M_0 / (m_\mu + 4M_0)$ - эффективная масса мезона в задаче двух центров^{/7/}, $m_b = \frac{m_\mu M_b}{m_\mu + M_b}$ - приведенная масса мезона изолированного атома ($m_\mu M_b$).

В § 2.6 получены асимптотические разложения эффективных потенциалов $V_{ij}^J(R)$ по степеням R^{-1} , при этом были использованы асимптотические разложения для двухцентровых функций § 2.4.

В главе 3 разработаны итерационные схемы численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы (I) обыкновенных интегродифференциальных уравнений.

В § 3.1 описаны известные итерационные схемы^{/12/} решения задачи Штурма-Лиувилля, реализующие непрерывный аналог метода Ньютона^{/6/}.

В § 3.2 исследуется влияние типа нормировки решений $\chi(R)$ на сходимость итерационного процесса.

В § 3.3 предложены итерационные схемы, естественно обобщающие итерационные схемы § 3.2 и 3.3, и схемы теории возмущений^{/13/}, реализующие способ^{/14/} введения непрерывного параметра на конечном интервале, что существенно расширяет область их применимости. Возможности этих схем с непрерывным включением взаимодействия иллюстрируются на некоторых точно решаемых задачах для одномерного уравнения Шредингера.

В § 3.4 показано, что при малых константах взаимодействия ($\sim 0,2$) схема, предложенная в § 3.3, может быть сведена к схеме теории возмущений, где нулевое приближение находится с помощью схем § 3.1 или 3.2. Для этого на основе первой схемы § 3.1 был реализован алгоритм численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы $\sim 30 \div 40$ обыкновенных дифференциальных уравнений.

В данном подходе интегральный член системы уравнений (I) рассматривается как возмущение.

В главе 4 приведены различные способы построения схемы теории возмущений § 3.4, связанные как с выбором нулевого приближения (числа уровней системы (I)), так и с выбором эффективной массы мезона $m_{\alpha\beta}$ в задаче двух центров.

В § 4.1 эта схема реализована в наиболее удобном для проведения расчетов виде. В качестве примера приводятся результаты вычисления энергии связи $E_{\text{TV}} = E - E_a$ мезомолекулы $pd\mu$ в основном состоянии $J=0, \nu=0$ (J - полный момент мезомолекулы, ν - число нулей функции $X_i(R)$ на луче $[0, \infty)$, E - полная энергия мезомолекулы, E_a - энергия основного состояния атома $d\mu$).

В § 4.2 предложено преобразование адиабатического базиса, позволяющее получать в рамках одной системы уравнений типа (I) правильные пределы диссоциации^{/15/} при развале мезомолекулы $(a,b,c) \rightarrow (ac)+b$ или $a+(bc)$. При этом существенно используются разные определения (§ 2.5) эффективных потенциалов $V_{ij}^J(R)$. В случае равных масс ядер $M_a = M_b$ данное преобразование сводится к выбору в качестве эффективной массы мезона m_a и простому переопределению исходных потенциалов § 2.5. Сравниваются результаты вычислений уровней энергии мезомолекул $pp\mu, dd\mu$ в единицах m_{π} и m_a .

В § 4.3 приведены результаты вычислений всех уровней энергии M - мезомолекул водорода и его изотопов, полученные с помощью разных вариантов теории возмущений (в единицах m_a). Вычисленные значения энергии сравниваются между собой и с наилучшими вариационными расчетами^{/16/}. Достигнутая точность вычислений составляет $\sim 0,1$ эВ.

Один из основных результатов предложенного подхода состоит в том, что найдены уровни энергии слабосвязанных состояний ($J=1, \nu=1$) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$.

В § 4.4 вычислена энергия связи системы $e^+e^-e^+e^-e^+$ = $-0,314$ эВ, которая отличается от наилучшего вариационного расчета^{/17/} $\epsilon_{\text{var}}(e^+e^-e^+e^-e^+) = -0,326$ эВ лишь на $\sim 0,01$ эВ.

В приложениях I - III приведены технические детали вычислений асимптотических разложений эффективных потенциалов $V_{ij}^J(R)$.

В приложении IV рассмотрены некоторые особенности реализации разностной схемы решения задачи Штурма-Лиувилля.

Основные результаты, полученные в диссертации

1. В адиабатическом представлении задачи трех тел выведена система обыкновенных интегродифференциальных уравнений, представляющих относительное движение ядер.

2. Получены асимптотические разложения для эффективных потенциалов задачи трех тел в адиабатическом представлении.

3. Устранена основная трудность адиабатического метода в задаче о связанных состояниях системы трех тел: неверное определение предела диссоциации системы при ее развале на атом и ядро.

4. Разработана схема теории возмущений с непрерывным включением оператора возмущения на основе непрерывного аналога метода Ньютона.

5. Реализована схема теории возмущений, позволяющая численно находить собственные значения и собственные функции задачи Штурма-Лиувилля для системы обыкновенных интегродифференциальных уравнений (I).

6. Реализован алгоритм численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы $\sim 30 \div 40$ обыкновенных дифференциальных уравнений.

7. Вычислены все известные уровни M - мезомолекул изотопов водорода с абсолютной точностью $\sim 0,1$ эВ, а также энергия связи системы $e^+e^-e^+$.

8. Найдены высоковозбужденные слабосвязанные уровни в мезомолекулах $dd\mu$ и $dt\mu$ в состояниях с орбитальным моментом $J=1$, колебательным квантовым числом $\nu=1$, с энергией связи $E_{11}(dd\mu) = -2$ эВ и $E_{11}(dt\mu) = -1$ эВ.

Результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., ЯФ 20, 576, 1974.
2. Gaifman M.P., Ponomarev L.I. and Vinitzky S.I. J.Phys. B: Atomic and Molec. Phys. 9, 2255, 1976.
3. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 5, 1670, 1977.
4. Виноцкий С.И. и др. ОИЯИ, Р4-10336, Дубна, 1976.
5. Виноцкий С.И., Пузынин И.В. ОИЯИ, РП-10802, Дубна, 1977.

6. Виницкий С.И. и др. ОИЯИ, Р4-10942, Дубна, 1977.
7. Виницкий С.И. и др. Мезоны в веществе. В сб.: Труды Международного симпозиума по проблемам мезонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе. Д1-10908, Дубна, 1977.
8. Виницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 74, 348, 1978.
9. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ОИЯИ, Р4-11332, Дубна, 1978.

Литература:

1. Gerstein S.S., Ponomarev L.I. In "Muon Physics", Ed. V. Hughes and C.S. Wu, Academic Press, New York, 1975.
2. Пономарев Л.И. Мезоны в веществе. В сб.: Труды Международного симпозиума по проблемам мезонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе, ОИЯИ, Д1-10908, Дубна, 7-10 июня, 1977.
3. Gerstein S.S. and Ponomarev L.I. Phys.Lett., 1977, 72B, 80.
4. Бистрицкий В.М., Джелепов В.П., Петрухин В.И., Руденко А.И., Сомов Л.Н., Суворов В.М., Фильченков В.В., Хемниц Г., Хованский Н.Н., Хоменко Б.А., Хорват Д. Мезоны в веществе В сб.: Труды в Международного симпозиума по проблемам мезонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе. ОИЯИ, Д1-10908, Дубна, 7-10 июня, 1977.
5. Born M., Nachr. Acad. Wiss. Göttingen, 1951, 1.
Born M., Huang K., Dynamical theory of Crystal Lattices, The Clarendon Press, Oxford, England, 1954.
6. Гавурин М.К. Изв. ВУЗов, Математика 1958, 5, 18.
Жидков Е.П. Макаренко Г.И. Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, 125.
7. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука," М., 1976.
8. Nielson H.H., Encyclopedia of Physics, v.37, part 1, Springer Verlag, Berlin, 1959.
9. Крониг Р. Полосатые спектры и строение молекул. ОНТИ, Харьков - Киев, 1935.
10. Coulson C.A. and Gilliam C.M. Proc. Roy. Soc. 1947., A237, 360.
Tarter C.V. J. Math. Phys., 1970, 11, 3192.
11. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П., Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р4-11185, Дубна, 1978.
Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N. J. Phys. B: Atom and Molec. Phys. 1977, 10, 1335.

12. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. J. Comput. Phys., 1973, 13, 1.
Гареев Ф.А., Гончаров С.А., Жидков Е.П., Пузынин И.В., Ямалеев Р.М. ЖВМ и МФ, 1977, 17, 407.
13. Lowdin P.O. J. Math. Phys. 1965, 6, 1341; Perturbation Theory and Its Applications, Ed. by M. Wilcos Wilcoy, New York, 1966.
14. Давиденко Д.Ф. Укр. матем. ж., 1955, 7, 1; Препринты ИАЭ-2048, М., 1970, ИАЭ-2081-83, М., 1971.
Wasserstrom E.J. Comput. Phys., 1972, 9, 53.
15. Froman A.J. Chem. Phys., 1962, 36, 1490.
Hunter G., Gray B.F., Pritchard H.O. J. Chem. Phys. 1966, 45, 3806.
Матвеев А.В., Пономарев Л.И. ТМФ, 1972, 1, 64; ЯФ, 1972, 16, 3, 620.
Hunter G. J. Chem. Phys. 1976, 64, 3213.
16. Halpern A. Phys. Rev. Lett. 1964, 13, 660.
Carter B.P., Phys. Rev. 1966, 141, 663; 1968, 165, 139.
17. Kolos W., Roothan C.C.J., Sack R.A. Rev. Mod. Phys., 1960, 32, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 июня 1978 года.