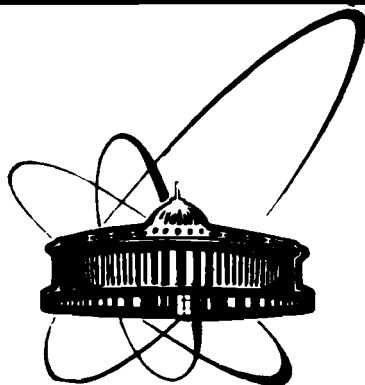


89-515



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

B 486

P11-89-515

С.И.Виницкий, И.В.Пузынин, Ю.С.Смирнов

**ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ
МЕЗОМОЛЕКУЛ С АНОМАЛЬНОЙ
ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ЧЕТНОСТЬЮ
В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ**

Направлено в журнал "Ядерная физика"

1989

При расчете уровней энергии и волновых функций мезомолекул используют как вариационные методы, так и методы, основанные на адиабатическом представлении^{/1/}.

Состояния с аномальной пространственной чётностью $\zeta = -(-1)^J$, где $J=1$ - полный орбитальный момент, до недавнего времени не рассматривались, поскольку их учет в теоретическом плане не влияет на эффективность мюонного катализа. Однако включение соответствующих уровней энергии мезомолекул может оказаться полезным, например, для мезорентгеновской спектроскопии.

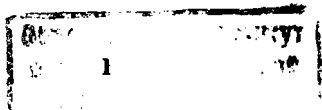
Напомним, что такие связанные состояния могут существовать, поскольку существует дополнительный дискретный интеграл движения - полная пространственная чётность. Так, например, подобные состояния хорошо известны для атома гелия^{/2/}, спектр которого рассчитывался как в гиперсферическом адиабатическом приближении^{/3/}, так и в рамках вариационных подходов, см., например,^{/4/}.

Недавно в работе^{/5/} получены оценки уровней энергии мезомолекул для указанных выше вращательных состояний. Однако точность этих оценок неудовлетворительна для интерпретации возможных экспериментов. Поэтому были проведены вариационные расчёты^{/6/} с точностью $\approx 0,002$ эВ.

В данной работе выполнены расчёты вращательных состояний мезомолекул с $\zeta = -(-1)^J$, где $J=1$, в рамках стандартного адиабатического представления^{/7/} с целью проверки скорости сходимости адиабатического разложения волновой функции и сравнения с полученными ранее результатами. Решение задачи Штурма-Лиувилля для радиальных уравнений осуществлялось с помощью программы MULTCH^{/8/}, реализованной на ЭЕМ ЕС-1061.

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений, возникающую при решении задачи трёх тел в адиабатическом представлении^{/7,1/}:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} \tilde{\Psi}(R) + (\lambda \hat{I} - \hat{W}(R)) \tilde{\Psi}(R) = 0, \\ \tilde{\Psi}(R) |_{R=0} = 0, \\ \hat{I} \frac{d}{dR} \tilde{\Psi}(R) + \hat{I}(\lambda, R) \tilde{\Psi}(R) |_{R=R_m} = 0, \\ (\tilde{\Psi}(R), \tilde{\Psi}(R)) = 1. \end{array} \right. \quad (1)$$



Данная система вытекает из уравнения Шредингера для системы трёх кулоновских частиц, состоящей из двух ядер с массами $M_a \gg M_b$, зарядами $Z_a=Z_b=1$ и μ^- - мезона с массой m_c . Здесь

$\lambda=2M\epsilon$ - собственное значение;

ϵ - искомое значение энергии связи;

$\hat{W}(R)=\hat{U}(R)+2\hat{Q}(R)\frac{d}{dR}$ - матрица эффективных потенциалов задачи трёх кулоновских частиц;

$\vec{Y}(R)$ - вектор радиальных волновых функций;

вид матрицы $\hat{f}(\lambda, R)|_{R=R_m}$ определяется асимптотикой волновых функций при $R_m \rightarrow \infty^1$:

$$\hat{f}(\lambda, R_m) = \begin{pmatrix} \sqrt{-\lambda} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{-\lambda} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{-\lambda} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Величина приведённой массы M и вид эффективных потенциалов $\hat{U}(R)$ зависят от способа разбиения исходного гамильтониана на сумму "кинетической" и "потенциальной" энергии и от соответствующего выбора единиц измерения $e=\hbar=m_c \frac{\lambda}{9}$, где m_c - приведённая масса мюона. Возможны следующие варианты¹⁾:

$$a) \quad e=\hbar=m_0=1$$

Эффективные потенциалы $U_{ij}(R)$ в этом случае примут вид

$$U_{ij}(R) = \left[\frac{J(J+1)-2m^2}{R^2} + 2M \left(\frac{1}{R} + E_1(R) - E_{na} \right) \right] \delta_{ij} + H_{ij}^+(R) + \alpha H_{ij}^-(R) + \alpha^2 H_{ij}^*(R) + \frac{d}{dR} Q_{ij}(R) + B_{ij}(R);$$

$\alpha = (M_b - M_a) / (M_b + M_a)$ - изотопическая разность масс ядер;

$M_0^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}$ - приведённая масса ядер а и b;

$m_0^{-1} = m_c^{-1} + (M_a^{-1} + M_b^{-1})$ - приведённая масса мюона;

$M = M_0 / m_0$ - приведённая масса системы;

1) Для связанных состояний мы пренебрегаем отличием приведённой массы ядер от точных якобиевых масс подсистем ядра + разъединённого атома M_a и M_b , которые формируются в каналах a, b ^{1/2}.

$$E_{na} = -\frac{1}{2n^2} \left[1 - \frac{(1+\alpha)^2}{4M} \right] - \text{начало отсчёта энергии};$$

n - главное квантовое число;

m - азимутальное квантовое число мюона;

J - полный орбитальный момент мезомолекулы.

$$\sigma) \quad e=\hbar=m_* = 1$$

$$U_{ij}(R) = \left[\frac{J(J+1)-2m^2}{R^2} + 2M \left(\frac{1}{R} + E_1(R) - E_{na} \right) \right] \delta_{ij} + H_{ij}^+(R) + \alpha H_{ij}^-(R) + \frac{d}{dR} Q_{ij}(R) + B_{ij}(R);$$

$$m_*^{-1} = m_c^{-1} + (4M_0)^{-1};$$

$$M = M_0 / m_*;$$

$$E_{na} = -\frac{1}{2n^2} \left[1 - \frac{1+2\alpha}{4M} \right].$$

$$\beta) \quad e=\hbar=m_a = 1$$

$$U_{ij}(R) = \left[\frac{J(J+1)-2m^2}{R^2} + 2M \left(\frac{1}{R} + E_1(R) + E_{na} \right) \right] \delta_{ij} + H_{ij}^+(R) + \alpha H_{ij}^-(R) - (1-2\alpha) H_{ij}^*(R) + \frac{d}{dR} Q_{ij}(R) + B_{ij}(R);$$

$$m_a^{-1} = m_c^{-1} + M_a^{-1};$$

$$M = M_0 / m_a;$$

$$E_{na} = -\frac{1}{2n^2}.$$

Для решения задачи (1) применяется итерационная схема непрерывного аналога метода Ньютона. Исходную систему (1) аппроксимируем разностным методом на квазиравномерной сетке. На каждой итерации соответствующие линейные граничные задачи решаются методом матричной прогонки. Задача (1) решается для одного и двух уравнений на квазиравномерной сетке следующего вида: $\omega_{\{0, R_m\}}: R=0, 0(0,1)20, 0(0,5)60, 0$.

В случае аномальной пространственной чётности $\zeta = -(-1)^J$ при $J=1$ эффективные потенциалы строятся лишь из тех термов $E_1(R)$ и матричных элементов $H_{ij}^+(R), H_{ij}^-(R), H_{ij}^*(R), Q_{ij}(R)$, у которых азимутальное квантовое число $m=1$, т.е. в случае двухуровневого

приближения рассматриваются состояния $2p_{11}$ и $3d_{1g}$ задачи двух кулоновских центров, соответствующие $|j|=4$ согласно нумерации, принятой в работе^{/7/}.

При проведении расчётов можно использовать два различных представления (ug) и (ab) волновых функций и потенциалов, связанных между собой преобразованием подобия^{/7/}:

$$\begin{bmatrix} U_{1a, 1a} & U_{1a, 1b} \\ U_{1b, 1a} & U_{1b, 1b} \end{bmatrix} = \hat{A} \begin{bmatrix} U_{1g, 1g} & U_{1g, 1u} \\ U_{1b, 1g} & U_{1u, 1u} \end{bmatrix} \hat{A}^{-1}, \quad (3)$$

$$\begin{bmatrix} y_{1a} \\ y_{1b} \end{bmatrix} = \hat{A} \begin{bmatrix} y_{1g} \\ y_{1u} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где \hat{A} - произвольная невырожденная матрица:

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Важным свойством преобразования подобия^{/10/} является то, что оно сохраняет собственные значения, а собственные векторы при таком преобразовании изменяются согласно соотношению (4). Выбор матрицы \hat{A} в виде (5) согласован с асимптотическим поведением волновой функции при $R \rightarrow \infty$ в каналах a и b . Сравнение рис.5 и рис.6, на которых изображены радиальные волновые функции y_{gu} и y_{ab} для мезомолекулы $pd\mu$, даёт наглядное представление справедливости этого утверждения. Аналогичные функции для мезомолекулы $tt\mu$ представлены на рис.7 и рис.8. Эффективные потенциалы $U(R)$ для мезомолекулы $pd\mu$ при $\zeta=+1$ в представлениях (ug) и (ab) показаны соответственно на рис.1 и рис.2; а на рис.3 и рис.4 - аналогичные потенциалы для мезомолекулы $tt\mu$ в двухуровневом приближении.

При выполнении расчётов были использованы следующие значения масс частиц и константы Ридберга:

$$M_p = 1836.152 m_e, \quad M_d = 3670.481 m_e, \quad M_t = 5496.918 m_e, \\ m_\mu = 206.769 m_e, \quad R_y = 13.6058 \text{ эВ}.$$

В таблице 1 приведены значения энергии связи ϵ_{Jv} (эВ) основных состояний $J=1, v=0$ μ^- - мезомолекул $tt\mu$, $dt\mu$, $dd\mu$, $pp\mu$, $pd\mu$, $pt\mu$ с аномальной пространственной чётностью для трёх вариантов выбора масс: m_0, m_*, m_a (случаи a, σ, δ соответственно).

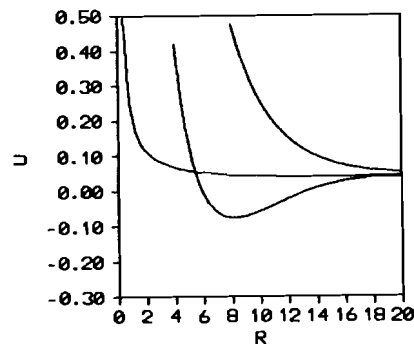


Рис.1. Потенциалы (слева направо) $U_{12}(R), U_{22}(R), U_{11}(R)$ для мезомолекулы $pd\mu$, $\zeta=+1$ в представлении (ug) .

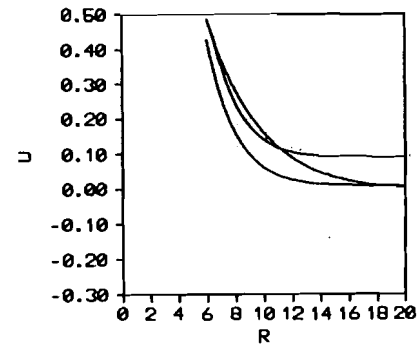


Рис.2. Потенциалы (слева направо) $U_{11}(R), U_{12}(R), U_{22}(R)$ для мезомолекулы $pd\mu$, $\zeta=+1$ в представлении (ab) .

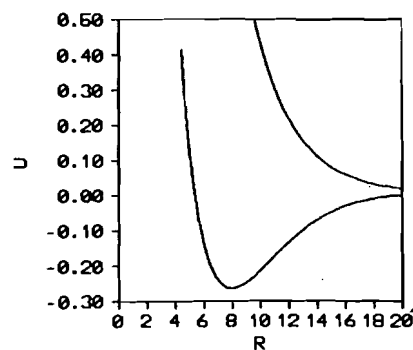


Рис.3. Потенциалы $U_{22}(R), U_{11}(R)$ (справа), $U_{12}(R)=0$ для мезомолекулы $tt\mu$, $\zeta=+1$ в представлении (ug) .

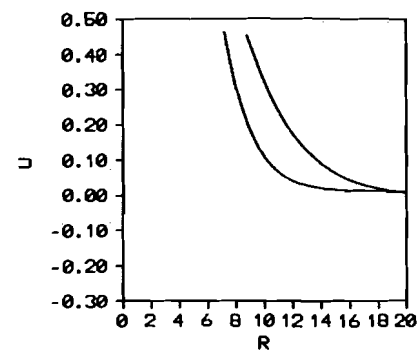


Рис.4. Потенциалы (слева направо) $U_{11}(R)=U_{22}(R), U_{12}(R)$ для мезомолекулы $tt\mu$, $\zeta=+1$ в представлении (ab) .

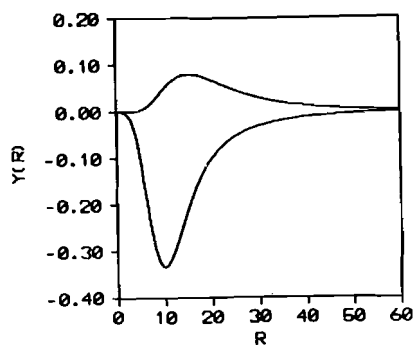


Рис.5. Волновые функции $y_1(R)$ (сверху) и $y_2(R)$ для мезомолекулы $rd\mu$, $\zeta=+1$ в представлении (уг).

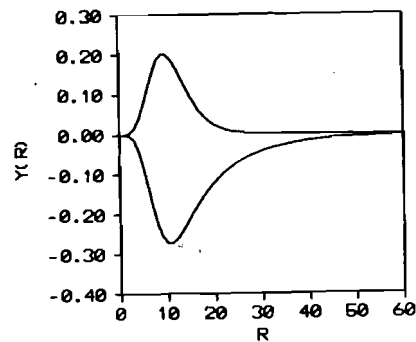


Рис.6. Волновые функции $y_1(R)$ и $y_2(R)$ (сверху) для мезомолекулы $rd\mu$, $\zeta=+1$ в представлении (ab), имеющие правильную асимптотику при "развале" мезомолекулы на ядро + разъединённый атом.

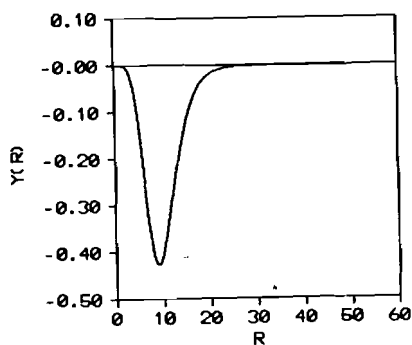


Рис.7. Волновые функции $y_1(R)=0$ и $y_2(R)$ для мезомолекулы $tt\mu$, $\zeta=+1$ в представлении (уг).

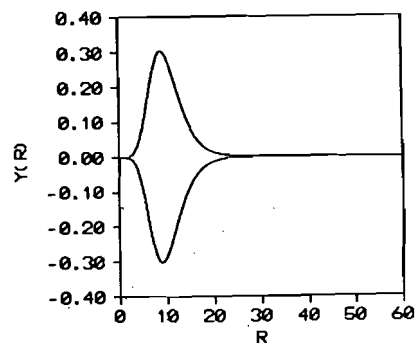


Рис.8. Волновые функции $y_1(R)$ и $y_2(R)$ (сверху) для мезомолекулы $tt\mu$, $\zeta=+1$ в представлении (ab).

ТАБЛИЦА 1. Значения энергии связи ϵ_{Jv} (эВ) основных состояний $J=1, v=0$ μ^- мезомолекул с аномальной пространственной чётностью $\zeta=+1$ для различных выборов масс: m_0, m_+, m_a

	$tt\mu$	$dt\mu$	$dd\mu$	$pp\mu$	$rd\mu$	$rt\mu$
m_0 1 ур.	-27.18	-18.21	-22.18	-12.43	+1.75	+6.62
m_0 2 ур.	-27.18	-18.59	-22.18	-12.43	-2.48	-0.65
m_+ 1 ур.	-27.18	-18.22	-22.18	-12.43	+1.61	+6.62
m_+ 2 ур.	-27.18	-18.60	-22.18	-12.43	-2.56	-0.81
m_a 1 ур.	-27.15	-18.35	-22.12	-12.38	+1.18	+6.22
m_a 2 ур.	-27.15	-18.71	-22.12	-12.38	-2.80	-0.81

ТАБЛИЦА 2. Сравнение значений энергии связи ϵ_{Jv} (эВ), рассчитанных в работах /5,6/ и настоящей работе

	$tt\mu$	$dt\mu$	$dd\mu$	$pp\mu$	$rd\mu$	$rt\mu$
Прибли- жен. /5/	-24.	-16.	-20.	-12.	-2.	-0.5
Вариант. выч. /6/	-27.412	-19.125	-22.594	-13.540	-3.685	-1.579
Наст. работа 2)	-27.15	-18.71	-22.12	-12.38	-2.80	-0.81

2) Для получения энергии связи каждой мезомолекулы в стандартном адиабатическом двухуровневом приближении требуется 750 Кбайт оперативной памяти и около 8 секунд времени ЭВМ ЕС-1061. Для более точного определения значений уровней энергии мезомолекул необходимо увеличить число радиальных уравнений в системе (1).

Наиболее предпочтительным является разбиение, связанное с массой m_a , поскольку именно это разбиение обеспечивает правильное асимптотическое поведение радиальных решений при достаточно больших R . Из анализа результатов, приведённых в таблице 1, следует, что при использовании одного уравнения для мезомолекул $rd\mu$ и $rt\mu$ получаем квазистационарные состояния с положительными значениями энергии, однако для двухуровневого приближения они переходят в стационарные.

В таблице 2 приведено сравнение результатов, полученных в данной работе, с результатами работы^{/5/} и вариационного расчёта^{/6/}. Сопоставление результатов из таблицы 2, например для симметричных мезомолекул, показывает, что точность приближения^{/5/} уступает точности стандартного адиабатического приближения^{/7/}, используемого в данной работе. Это указывает на возможную некорректность реализации приближения^{/5/}, поскольку оно должно обеспечивать не худшую точность вычислений.

В заключение авторы выражают благодарность В.С.Мележику за обсуждения и помощь в работе.

Литература

1. Puzynin I.V., Vinitzky S.I. - Muon Catalyzed Fusion, 1988, v.3, p.307.
2. Lipsky L., Anania R., Conneely M.J. - Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1977, v.20(2), p.127.
3. Fano U., Rau A. - Atomic Collisions and Spectra, J.Wiley, New York, 1985;
Fano U. - Rep. Progr. Phys., 1983, v.46, p.97;
Macek J. - J. Phys. B, 1968, v.1, p.831.
4. Schwartz C. - Phys. Rev., 1961, v.123, p.1700;
Schwartz C. - Phys. Rev., 1962, v.128, p.1146.
5. Ishihara T., Fukuda H., Hara S., Matveenko A.V. Preprint JINR E4-88-849, Dubna, 1988.
6. Виноцкий С.И., Коробов В.И. Препринт ОИЯИ P11-89-689, Дубна, 1989.
7. Виноцкий С.И., Пономарёв Л.И. - ЭЧАЯ, 1982, т.13, с.556.
8. Смирнов Ю.С. ОИЯИ, P11-88-912, Дубна, 1988.
9. Ponomarev L.I., Vinitzky S.I. - J. Phys. B, 1979, v.12, p.567.
10. Ortega J.M., Poole W.G. An Introduction to Numerical Methods for Differential Equations, Jr. Pitman Publishing Inc., 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 июля 1989 года.

Виноцкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. P11-89-515
Вычисление энергии связанных состояний
мезомолекул с аномальной пространственной
четностью в адиабатическом представлении

Представлены расчеты вращательных состояний мезомолекул с аномальной пространственной четностью $\zeta = -(-1)^J$ и орбитальным моментом $J=1$ в рамках стандартного адиабатического представления. Проведено сравнение с полученными ранее результатами. Решение задачи Штурма - Лиувилля для радиальной системы уравнений осуществлялось с помощью программы MULTCH, реализованной на ЭВМ ЕС-1061.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод авторов

Vinitzky S.I., Puzynin I.V., Smirnov Yu.S. P11-89-515
Calculation of the Bound State Energy
of Mesic Molecules with Anomalous Spatial Parity
in an Adiabatic Representation

Calculation of the rotational states of mesic molecules with anomalous spatial parity $\zeta = -(-1)^J$ and orbital momentum $J = 1$ in an adiabatic representation is presented. A comparison with the results obtained before is given. The solution of the Sturm - Liouville problem for radial system of equations was carried out by the MULTCH program for ES-1061-computer.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989