

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

956/2-81

23/п-81

P4-80-749

Л.Гр.Иксару, В.С.Мележик

ВЫЧИСЛЕНИЕ
УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ μ -МЕЗОМОЛЕКУЛ
ЧИСЛЕННЫМ МЕТОДОМ ВОЗМУЩЕНИЙ

1980

1. ВВЕДЕНИЕ

Для количественного описания мезомолекулярных процессов в смеси изотопов водорода необходимо знать уровни энергии μ -мезомолекул с большой точностью $\sim 0,01$ эВ, что составляет $\sim 10^{-6}$ мезоатомных единиц энергий /1,2/. В настоящее время задача о нахождении уровней энергии μ -мезомолекул решена с абсолютной точностью $\sim 0,1$ эВ^{3/4}. Вычисления проводились в адиабатическом представлении задачи трех тел^{4/}. В этом подходе исходная физическая задача сводится к решению бесконечной системы интегро-дифференциальных уравнений:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + E - V_{ii}(R) \right] \chi_i(R) = \sum_{j \neq i}^{\infty} [2Q_{ij}(R) \frac{d}{dR} + V_{ij}(R)] \chi_j(R), \quad /1/$$

с граничными условиями

$$\chi_i(0) = \chi_i(\infty) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, \quad /2/$$

где \sum_j подразумевает суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектру задачи двух кулоновских центров^{5/}: $\sum_j \equiv \sum_{n_2 m} \left(\sum_{n_1} + \int dk \right) / j = (n_1 n_2 m)$ или $j = (kn_2 m)$ - квантовые числа задачи двух центров/.

Коэффициенты системы уравнений^{6/7/} определяются через эффективные потенциалы задачи трех тел

$$V_{ij}(R) = U_{ij}(R) + \frac{d}{dR} Q_{ij}(R),$$

$$U_{ij}(R) = U_{ji}(R),$$

$$Q_{ij}(R) = -Q_{ji}(R).$$

Задача Штурма-Лиувилля /1/-/2/ для бесконечной системы уравнений на полуоси $[0, \infty)$ аппроксимировалась задачей для конечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений размерности N на конечном интервале:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \bar{E} - \bar{V}_{ii}(R) \right] \bar{\chi}_i(R) = \sum_{j \neq i}^N [2\bar{Q}_{ij}(R) \frac{d}{dR} + \bar{V}_{ij}(R)] \bar{\chi}_j(R), \quad /3/$$

$$\bar{\chi}_i(0) = \bar{\chi}_i(R_{\max}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad /4/$$

Вопрос о выборе N и R_{\max} , а также о задании граничных условий в точке R_{\max} , исследовался в работе ^{/3/}, где они были выбраны такими, чтобы решение $/3/-/4/$ E^* отличалось от решения $/1/-/2/$ E^* не более, чем на $0,1$ эВ.

Для повышения точности нахождения собственных значений задачи $/1/-/2/$ необходимо решить ряд проблем, часть из которых связана с аппроксимацией $/3/-/4/$ исходной задачи, а другая часть - с численным решением задачи $/3/-/4/$. Здесь мы не будем касаться вопроса о точности аппроксимации задачи $/1/-/2/$, а остановимся на численном решении $/3/-/4/$ с заданной точностью.

2. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ $/3/-/4/$

Точность решения задачи $/3/-/4/$ определяется двумя факторами: точностью задания потенциалов $V_{ij}(R)$ и $Q_{ij}(R)$ и точностью вычислительного метода, используемого для нахождения собственных значений E . Коэффициенты $V_{ij}(R)$ и $Q_{ij}(R)$ заданы в виде таблиц с равномерным шагом H по переменной R , что является особенностью задачи. Они выражаются через эффективные потенциалы задачи трех тел, которые вычислены с относительной точностью $\sim 10^{-7}$ в работах ^{/6/}.

До недавнего времени для численного решения задачи $/3/-/4/$ использовались только непрерывный аналог метода Ньютона ^{/8/} и метод обратной итерации в подпространстве ^{/9/}. В первом подходе возникающие краевые задачи для итерационных поправок аппроксимируются конечно-разностными, причем шаг конечно-разностных формул совпадает с шагом таблиц коэффициентов V_{ij} и Q_{ij} системы уравнений $/3/$. Расчеты проводились по программе SYSTEM ^{/10/} в которой используются трехточечные конечно-разностные формулы, аппроксимирующие краевую задачу с ошибкой $\sim H^2$. Алгоритм, реализованный на языке FORTRAN, подробно описан в работе ^{/10/}. Однако ввиду важности физической задачи о вычислении уровней энергии μ -мезомолекул интересно применить для численного решения задачи $/3/-/4/$ вычислительную схему, принципиально отличную от рассмотренной выше.

В данной работе для решения задачи $/3/-/4/$ применен метод стрельбы, в котором задача Коши для системы $/3/$ при фиксированном E решается численным методом возмущений /perturbative numerical method/ ^{/11/}. Дадим краткое описание этого метода. Предположим, что потенциалы $V_{ij}(R)$, $Q_{ij}(R)$ - известные функции, определенные в любой точке отрезка $[0, R_{\max}]$, причем $V(R) \rightarrow \text{const} \cdot R^{-2}$ при $R \rightarrow 0$. Область $[0, R_{\max}]$ разбивается на два интервала $[0, R_0]$ и $[R_0, R_{\max}]$. На отрезке $[0, R_0]$ главные члены в $V_{ij}(R)$ рассматриваются как эталонный потенциал, а все остальные, включая члены $2Q_{ij}(R) \frac{d}{dR}$, - как возмущение. Регулярное решение

системы $/3/$ в точке R_0 при заданном E находится по теории возмущений. При этом учитывается необходимое число членов теории возмущений для достижения заданной точности ^{/12/}.

Отрезок $[R_0, R_{\max}]$ разбивается точками $R_0, R_1, \dots, R_{\max}$ на подынтервалы $[R_{n-1}, R_n]$, на каждом из которых решение системы $/3/$ при фиксированном E тоже находится по теории возмущений. Но в этом случае эталонный потенциал - постоянная матрица V_{ij} , которая приближает симметричную часть $V_{ij}(R)$, а возмущение - матрица $\Delta V_{ij}(R) \equiv 2Q_{ij}(R) \frac{d}{dR} + V_{ij}(R) - \bar{V}_{ij}$. При нахождении решения системы $/3/$ учитывается число порядков теории возмущений, необходимое для достижения точности $\sim h_n^4$ /где $h_n = R_n - R_{n-1}$ /. Величина каждого интервала h_n выбирается в соответствии с заданной точностью нахождения решений ^{/13/}. Этот алгоритм для систем уравнений, не содержащих коэффициенты $Q_{ij}(R)$, подробно описан в работах ^{/14/}. При практической реализации метода стрельбы для нахождения собственного значения использована параболическая интерполяция по E , что позволяет находить E^* с точностью 6-7 знаков за 5-6 итераций. Изложенный численный метод реализован в виде программы LIVIU на языке FORTRAN.

3. ЧИСЛЕННЫЙ ПРИМЕР

Численный метод возмущений был использован для нахождения уровней энергии μ -мезомолекулы $r_d\mu$ с квантовыми числами $J=0, U=0$ и $J=1, U=0$ /основное и возбужденное вращательные состояния/. Для этого решалась задача $/3/-/4/$ при следующих значениях параметров: $N=6$ и $R_{\max}=10$. Аналогичные вычисления были выполнены по программе SYSTEM. Все расчеты проводились на машине CDC-6500.

При численном решении задачи $/3/-/4/$ по программе SYSTEM коэффициенты системы уравнений задавались в виде таблиц с шагом $H = 0,1; 0,05$ и $0,025$ ^{/6/}, а затем полученные собственные значения экстраполировались к $H \rightarrow 0$ с учетом квадратичной по H сходимости собственных значений E ^{/15/}. Результаты вычислений приведены в первой строке табл. 1а и 1б. Для работы программы LIVIU коэффициенты системы уравнений необходимо задать в виде функций, определенных на всем отрезке $[R_0, R_{\max}]$, для этого использовалась параболическая интерполяция таблиц потенциалов V_{ij} и Q_{ij} . Интерполяционные кривые "проводились" через табличные значения коэффициентов двумя различными способами, чтобы получить некоторое представление о влиянии способа интерполяции потенциалов на получаемое собственное значение. В первом случае потенциал представлялся последова-

Таблица 1а

Уровни энергии мезомолекулы ρd_μ

$J=0, V=0$				
H	0,1	0,05	0,025	$H \rightarrow 0$
SYSTEM	-218,585	-218,491	-218,468	-218,460
LIVIU /рис.1а/	-218,460	-218,460		
LIVIU /рис.1б/	-218,456	-218,461		

Таблица 1б

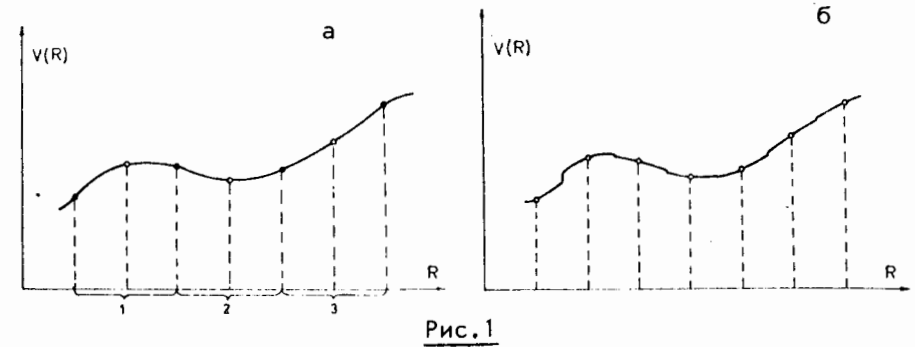
$J=1, V=0$				
H	0,1	0,05	0,025	$H \rightarrow 0$
SYSTEM	-93,769	-93,683	-93,669	-93,664
LIVIU /рис.1а/	-93,667	-93,663		
LIVIU /рис.1б/	-93,664	-93,665		

Значения E_{JU} , полученные при решении задачи /3/-/4/ для значений параметров $N=6$, $R_{\max}=10$, приведены в эВ.

тельностью парабол, проходящих через три соседние узловые точки /рис.1а/, во втором - в виде кусочно-непрерывной кривой, состоящей из отрезков парабол, построенных так, что центр каждой n -й параболы совпадал с n -м узлом таблицы потенциалов, а длина каждого n -го отрезка была равна $[N(n-\frac{1}{2}), N(n+\frac{1}{2})]$ /рис.1б/. Результаты вычисления собственных значений задачи /3/-/4/, полученные по программе LIVIU для этих двух случаев, приведены во второй и третьей строках таблиц. Расчеты были выполнены для двух таблиц потенциалов V_{ij} , Q_{ij} с шагом $H=0,1$ и $H=0,05$. Поскольку оба результата совпадают между собой с точностью 0,005 эВ, расчет для $H=0,025$ не проводился. R_0 выбиралось равным 0,5.

Из таблицы следует, что собственные значения, вычисленные по программам SYSTEM и LIVIU при $H=0,1$, совпадают

друг с другом с точностью $\sim 0,1$ эВ*. А отличие собственных значений, найденных по программе LIVIU, от значений, полученных по программе SYSTEM в пределе $H \rightarrow 0$, составляет величину $\sim 0,005$ эВ.



4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное численное исследование показывает, что собственные значения задачи /3/-/4/ находятся с точностью $\sim 0,1$ эВ по программе SYSTEM при $H=0,1$, что подтверждает результаты работы /3/. Результаты вычислений по программе LIVIU при $H=0,1$ и $H=0,05$ отличаются друг от друга не более, чем на 0,005 эВ. Откуда следует, что для вычисления уровней энергии μ -мезомолекул с точностью $\sim 0,01$ эВ достаточно иметь эффективные потенциалы задачи трех тел в виде таблицы с шагом $H=0,1$. Подробный математический анализ влияния шага таблицы коэффициентов системы уравнений /3/ на точность получаемого собственного значения задачи /3/-/4/ будет проведен в отдельной работе.

Авторы выражают благодарность Л.И.Пономареву за постановку задачи и многочисленные обсуждения, С.И.Виницкому, Т.П.Пузыниной и Н.Ф.Трусковой за помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gerstein S.S., Ponomarev L.I. Mesomolecular Processes Induced by μ^- - and π^- -Mesons. In: Muon Physics (Eds. V.Hughes, C.S.Wu). Academic Press, New York and London, 1975, v.III.

* Еще раз напомним, что шаг конечно-разностных формул в программе SYSTEM совпадает с шагом H таблицы коэффициентов V_{ij} и Q_{ij} .

2. Виницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1978, 74, с.849; Gerstein S.S., Ponomarev L.I. Phys.Lett., 1977, 72B, p.80.
3. Виницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1980, 79, с.698.
4. Vogt M. Gött. Nachricht, 1, 1951; Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЯФ, 1974, 20, с.576; Ponomarev L.I., Vinitsky S.I. J.Phys., 1979, B12, p.5; Ponomarev L.I., Vinitsky S.I., Vucajlovic' F.R. J.Phys., 1980, B13, p.847; Вукайлович Ф.Р., Пономарев Л.И., Сомов Л.Н. ОИЯИ, Р4-80-442, Дубна, 1980.
5. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
6. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ОИЯИ, Р4-5040, Дубна, 1970; Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F. J.Phys., 1978, B11, p.3861; Трускова Н.Ф. ОИЯИ, P11-10207, Дубна, 1976; ОИЯИ, P11-11218, Дубна, 1978.
7. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N. J.Phys., 1977, B10, p.1336.
8. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1974, т.4, с.127; Пузынин И.В., Пузынина Т.П. В сб.: Algorithms and Programs. KFKI-34, Budapest, 1974.
9. Касчиев М., Мележик В.С. ОИЯИ, Р4-12671, Дубна, 1979.
10. Виницкий С.И. и др. ОИЯИ, Р5-12787, Дубна, 1979.
11. Иксару Л.Гр. Вычислительные методы решения дифференциальных уравнений и их приложение /на румынском языке/. Изд-во Академии СРР, Бухарест, 1979.
12. Ixaru L.Gr., Micu M. A Perturbative Approach to the Solution of the Schrödinger Equation with Singular Potential. In: Topics in Theoretical Physics /Ed. I.A.Dorobantu/. GIPh, Bucharest, 1978.
13. Ixaru L.Gr., Cristu M.I., Popa M.S. J.Compt.Phys., 1980, 36, p.170.
14. Ixaru L.Gr. Preprints CIPh, CM-2-1978, CM-3-1978, Bucharest; J.Comput.Phys., 1980, 36, p.182.
15. Пузынин И.В. ОИЯИ, 11-12016, Дубна, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 ноября 1980 года.