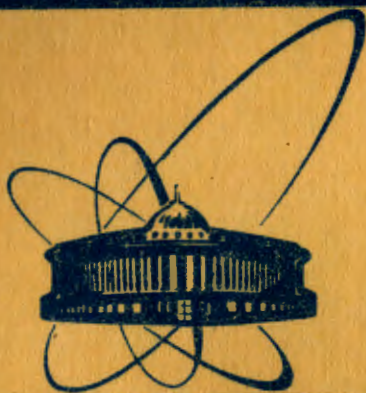


83-734

9/1-84



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

276/84

P4-83-734

В.Б.Беляев, С.А.Сергеенков

О СПЕКТРЕ $d_{1\mu}$ -МЕЗОМОЛЕКУЛЫ

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

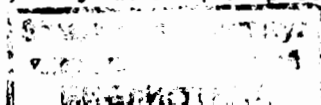
В настоящее время в связи с проблемой μ -катализа термоядерных реакций синтеза изотопов водорода интенсивно исследуются мезомолекулярные соединения, участвующие в таких реакциях. Наибольший интерес представляет мезомолекула $dt\mu$, в которой протекает реакция $d + t + \mu^- \rightarrow {}^4\text{He} + p + \mu^- + 17,6 \text{ МэВ}$. Необходимо отметить, что все имеющиеся сейчас расчеты спектра энергии и волновой функции $dt\mu$ -системы основаны либо на прямых вариационных процедурах /4/, либо на использовании метода адиабатического приближения /1,5/. Причем во всех случаях задача на собственные значения решается численно. По поводу подобных расчетов можно выдвинуть следующие возражения.

Во-первых, при численном расчете не "ухватываются" возможные особенности волновой функции /например, $\psi(R) \sim \ln R$, $R \rightarrow 0$ /. Во-вторых, применение адиабатической гипотезы на малых расстояниях ($r \sim 10^{-13}$ см) проблематично, так как кинетическая энергия системы при этом велика / $\sim 1 \text{ МэВ}$ /. а при наличии сильного взаимодействия и потенциальная энергия составляет несколько МэВ. В-третьих, для численной сходимости адиабатического приближения волновой функции $\psi_{ad}(R)$ при $R \rightarrow 0$ нет никаких физических доводов. В-четвертых, численная функция неудобна в употреблении. Наконец, можно отметить энергоемкость и громоздкость таких расчетов.

В силу вышесказанного желательно иметь подход, не основанный на адиабатике и не столь громоздкий. В качестве такового предлагается метод, основанный на конечномерных аппроксимациях компактных операторов /гамильтониана мишени h_{dt} и потенциала взаимодействия V_d /. С помощью этого метода решается задача на связанное состояние трех тел ($dt\mu^-$). Для конечномерных аппроксимаций также можно рассмотреть и задачу рассеяния $t\mu + d$ при $E < 0$. Данная работа посвящена исследованию $dt\mu$ -системы с полным сохраняющимся угловым моментом, равным нулю в приближении потенциала взаимодействия оператором первого ранга /в виде р-волновой функции Гаусса/.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Стандартным образом вводя координаты Якоби и отделяя движение центра тяжести $dt\mu$ -системы, получим стационарное уравнение



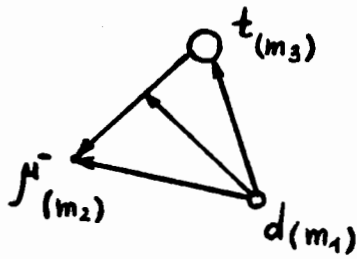


Рис. 1

Шредингера в операторной форме:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad /2.1/$$

Представим $d\mu$ -систему в виде схемы /см. рис.1/, где гамильтониан уравнения /2.1/ имеет следующую структуру:

$$H = H_0 + h + V. \quad /2.2/$$

Здесь H_0 - гамильтониан свободного движения дейтрона относительно центра

тяжести системы $t\mu^-$; h - гамильтониан мишени / $t\mu^-$ -кластер/; $V = V_{12} + V_{13}$ - кулоновский потенциал взаимодействия dt и $d\mu^-$. В координатном представлении /см.рис.1/ они имеют следующий вид:

$$\begin{cases} H_0(\vec{R}) = -\frac{\Delta_{\vec{R}}}{2\mu}, \\ h(\vec{r}) = -\frac{\Delta_{\vec{r}}}{2\mu_{23}} - \frac{1}{r}, \\ V(\vec{r}, \vec{R}) = \frac{1}{|\vec{R} - \gamma_1 \vec{r}|} - \frac{1}{|\vec{R} + \gamma_2 \vec{r}|}, \end{cases} \quad /2.3/$$

$$\text{где } \mu = \frac{m_1(m_2 + m_3)}{m_1 + m_2 + m_3}, \quad \mu_{23} = \frac{m_2 m_3}{m_2 + m_3}, \quad \gamma_1 = \frac{\mu_{23}}{m_3}, \quad \gamma_2 = \frac{\mu_{23}}{m_2}, \quad \gamma_1 + \gamma_2 = 1.$$

Перейдем от уравнения Шредингера /2.1/ к интегральному операторному уравнению Липпмана-Швингера. С этой целью введем свободную функцию Грина:

$$G_0(E) = (E - H_0)^{-1}. \quad /2.4/$$

После этого уравнение /2.1/ можно представить в форме

$$|\psi\rangle = G_0(E)(V + h)|\psi\rangle. \quad /2.5/$$

В координатном представлении гамильтониан мишени h и потенциал V имеют вид локальных операторов /см./2.3//, в то время как функция Грина недиагональна:

$$\langle \vec{R} | G_0(E) | \vec{R}' \rangle = -\frac{2\mu}{4\pi} \frac{e^{-\kappa|\vec{R} - \vec{R}'|}}{|\vec{R} - \vec{R}'|}, \quad \kappa = \sqrt{2\mu E}. \quad /2.6/$$

В импульсном представлении функция Грина имеет диагональный вид:

$$\langle \vec{k} | G_0(E) | \vec{k}' \rangle = \frac{\delta(\vec{k} - \vec{k}')}{E - k^2/2\mu}, \quad /2.6'/$$

но нелокальными теперь являются матричные элементы гамильтониана мишени и потенциала:

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | h | \vec{p}' \rangle &= \delta(\vec{p} - \vec{p}') \frac{p^2}{2\mu_{23}} - \frac{1}{|\vec{p} - \vec{p}'|^2}, \quad /2.3'/ \\ \langle \vec{p}, \vec{k} | V | \vec{p}', \vec{k}' \rangle &= \frac{32\pi^4}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} \{ \delta[(\vec{p} - \vec{p}') + \gamma_1(\vec{k} - \vec{k}')] - \delta[(\vec{p} - \vec{p}') - \gamma_2(\vec{k} - \vec{k}')] \}. \end{aligned}$$

3. РЕШЕНИЕ

А. Описание метода

Метод конечномерной аппроксимации основан на приближении гамильтониана мишени и потенциала операторами конечного ранга. Главное преимущество этого метода есть сведение задачи к приближенной, но точно решаемой. Соответствующие разложения для гамильтониана мишени h и потенциала V имеют вид

$$h = h^N = \sum_n \epsilon_n |X_n\rangle \langle X_n|, \quad /3.1/$$

$$V = V^N = \sum_{i,j} |\sigma_i\rangle \langle \sigma_i| V |\sigma_j\rangle \langle \sigma_j|, \quad /3.2/$$

где $h^N |X_n\rangle = \epsilon_n |X_n\rangle$, т.е. $|X_n\rangle$ и ϵ_n - известные решения задачи на собственные значения для гамильтониана мишени /7/, $|\sigma_i\rangle$ - неизвестные /пробные/ волновые функции. Причем будем считать, что функции $|\sigma_i\rangle$ являются квадратично интегрируемыми и что для них имеют место соотношения ортонормировки:

$$\langle \sigma_i | \sigma_j \rangle = \delta_{ij}. \quad /3.3/$$

Этому же условию /по определению/ подчиняются и кулоновские волновые функции

$$\langle X_n | X_m \rangle = \delta_{nm}. \quad /3.3'/$$

Весь описанный ниже метод решения основан на использовании условия квадратичной интегрируемости функции $\psi(\vec{r}, \vec{R})$ в виде $\int d\vec{r} |\psi(\vec{r}, \vec{R})|^2 < \infty$, т.е. по одной переменной. Чтобы пояснить это условие, перепишем разложение /3.2/ для матричного элемента потенциала в импульсном представлении:

$$\langle \vec{k}, \vec{p} | V | \vec{k}', \vec{p}' \rangle = \sum_{i,j} \langle \vec{k}, \vec{p} | \sigma_i \rangle \langle \sigma_j | V | \sigma_j \rangle \langle \sigma_j | \vec{k}', \vec{p}' \rangle.$$

Тогда изложенное выше требование относительно функций $|\sigma_i\rangle$ означает, что последнее выражение можно представить в виде

$$\langle \vec{k}, \vec{p} | V^N | \vec{k}', \vec{p}' \rangle = \sum_i \langle \vec{p} | \sigma_i \rangle \langle \vec{k} | \hat{V}_{ij} | \vec{k}' \rangle \langle \sigma_j | \vec{p}' \rangle, \quad /3.4/$$

$$\text{где } \langle \vec{k} | \hat{V}_{ij} | \vec{k}' \rangle = \int d\vec{p} d\vec{p}' \sigma_i(\vec{p}) \langle \vec{k}, \vec{p} | V | \vec{k}', \vec{p}' \rangle \sigma_j^*(\vec{p}').$$

Рассмотрим сперва более простой случай аппроксимации потенциала V оператором первого ранга:

$$V \approx \hat{V} = |\sigma\rangle\langle\sigma| V |\sigma\rangle\langle\sigma|, \quad /3.5/$$

и самое общее выражение для аппроксимации гамильтониана мишени в виде /3.1/. Подставив эти разложения в уравнение /2.5/, получим:

$$|\psi\rangle = G_0(E) |\sigma\rangle \hat{V} \langle\sigma|\psi\rangle + G_0(E) \sum_n \epsilon_n |\chi_n\rangle \langle\chi_n|\psi\rangle, \quad /3.6/$$

где $\hat{V} = \langle\sigma| V |\sigma\rangle$.

Можно понизить размерность уравнения /3.6/ путем введения новых неизвестных функций A_n и B :

$$B = \langle\sigma|\psi\rangle, \quad A_n = \langle\chi_n|\psi\rangle, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots, N. \quad /3.7/$$

Эти функции, очевидно, подчиняются следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} A_n = a_n G_0(E) \hat{V} B + \epsilon_n G_0(E) A_n, \\ B = G_0(E) \hat{V} B + G_0(E) \sum_n a_n \epsilon_n A_n. \end{cases} \quad /3.8/$$

где $a_n = \langle\sigma|\chi_n\rangle$ - интегралы перекрытия. Эта система допускает расщепление. Действительно, первое уравнение /3.8/ можно переписать в виде

$$A_n = a_n G_0(E - \epsilon_n) \hat{V} B. \quad /3.9/$$

Подставив соотношение /3.9/ во второе уравнение /3.8/, получим однородное уравнение относительно одной неизвестной функции B :

$$B = (1 - \sum_n a_n^2) G_0(E) \hat{V} B + \sum_n a_n^2 G_0(E - \epsilon_n) \hat{V} B. \quad /3.10/$$

Таким образом, с помощью конечномерной аппроксимации гамильтониана мишени и потенциала /операторами N -го и 1 -го ранга соответственно/ мы понизим размерность исходного уравнения /2.5/ в два раза.

Б. Разложение по парциальным волнам

Ввиду того, что все расчеты для $d\mu$ -системы выполнялись для конкретного значения полного орбитального момента системы L , разложим исходное интегральное уравнение /2.5/ по полной системе бисферических функций, а затем перейдем к конкретному значению

$L = 0$. Предварительно, однако, перейдем к импульсному представлению в виде

$$\langle \vec{k}, \vec{p} | \psi \rangle = G_0(E, k) \int d\vec{k}' d\vec{p}' \langle \vec{k}, \vec{p} | V | \vec{k}', \vec{p}' \rangle \langle \vec{k}', \vec{p}' | \psi \rangle + G_0(E, k) \int d\vec{p}' \langle \vec{p} | h | \vec{p}' \rangle \langle \vec{k}, \vec{p}' | \psi \rangle. \quad /3.11/$$

Спроектируем это уравнение на состояние с полным орбитальным моментом L . Для этого воспользуемся известными формулами разложения /6,8/

$$\psi(\vec{p}, \vec{k}) = \sum_{\ell\lambda} \sum_{LM} \psi_{\ell\lambda}^L(k, p) Y_{\ell\lambda}^{LM}(\hat{p}, \hat{k}), \quad /3.12/$$

$$Y_{\ell\lambda}^{LM}(\hat{p}, \hat{k}) = \sum_{m\mu} (\ell m \lambda \mu | LM) Y_{\ell m}(\hat{p}) Y_{\lambda \mu}(\hat{k})$$

и условием ортогональности бисферических функций

$$\int d\vec{p} d\vec{k} Y_{\ell\lambda}^{*LM}(\hat{p}, \hat{k}) Y_{\ell'\lambda'}^{LM}(\hat{p}, \hat{k}) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{LL'} \delta_{MM'}, \quad /3.13/$$

где $\vec{L} = \vec{\ell} + \vec{\lambda}$, $M = m + \mu$; \hat{p} и \hat{k} - единичные вектора в направлении \vec{p} и \vec{k} соответственно, $d\vec{p}$ и $d\vec{k}$ - элементы сферического объема в тех же направлениях, (ℓm) и $(\lambda \mu)$ - полные сферические базисы $t\mu$ - системы /мишень/ и дейтрона относительно этой системы соответственно. $(\ell m \lambda \mu | LM)$ - коэффициенты Клебша-Гордона. Окончательно будем иметь:

$$\psi_{\ell\lambda}^L(p, k) = G_0(E, k) \int_0^\infty p'^2 dp' k'^2 dk' \sum_{\ell'\lambda'} V_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^L(p, k; p', k') \psi_{\ell'\lambda'}^L(p', k') + G_0(E, k) \int_0^\infty p'^2 dp' \sum_{\ell'\lambda'} H_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^L(p, p') \psi_{\ell'\lambda'}^L(p', k),$$

$$V_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^L(kp, k'p') = \int d\vec{p} d\vec{k} d\vec{p}' d\vec{k}' Y_{\ell\lambda}^{*LM}(\hat{p}, \hat{k}) \langle \vec{p}\vec{k} | V | \vec{p}'\vec{k}' \rangle Y_{\ell'\lambda'}^{LM}(\hat{p}', \hat{k}'),$$

$$H_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^L(p, p') = \int d\vec{p} d\vec{p}' d\vec{k} Y_{\ell\lambda}^{*LM}(\hat{p}, \hat{k}) \langle \vec{p} | h | \vec{p}' \rangle Y_{\ell'\lambda'}^{LM}(\hat{p}', \hat{k}).$$

Используя описанную выше схему аппроксимации в импульсном представлении

$$\langle \vec{p}\vec{k} | V | \vec{p}'\vec{k}' \rangle \approx \langle \vec{p}\vec{k} | \hat{V} | \vec{p}'\vec{k}' \rangle = \langle \vec{p} | \sigma \rangle \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}' \rangle \langle \sigma | \vec{p}' \rangle, \quad /3.14/$$

$$\langle \vec{p} | h | \vec{p}' \rangle \approx \langle \vec{p} | h^N | \vec{p}' \rangle = \sum_{n=1}^N \epsilon_n \langle \vec{p} | \chi_n \rangle \langle \chi_n | \vec{p}' \rangle,$$

получим парциальные аппроксиманты матричных элементов потенциала и гамильтониана мишени в виде

$$\hat{V}_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^L(pk, p'k') = \int d\vec{p} d\vec{k} d\vec{p}' d\vec{k}' Y_{\ell\lambda}^{*LM}(\hat{k}, \hat{p}) \sigma(\vec{p}) \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}' \rangle \sigma^*(\vec{p}') Y_{\ell'\lambda'}^{LM}(\hat{k}', \hat{p}'), \quad /3.15/$$

$$H_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^L(p, p') = \int d\vec{p} d\vec{p}' d\vec{k} Y_{\ell\lambda}^{*LM}(\hat{p}, \hat{k}) \sum_n \epsilon_n \chi_n(\vec{p}) \chi_n^*(\vec{p}') Y_{\ell'\lambda'}^{LM}(\hat{k}, \hat{p}').$$

Следуя идее, намеченной в начале этого пункта, поступим следующим образом. Во-первых, ограничимся случаем $L = 0$. Во-вторых, конкретизируем явный вид угловых частей аппроксимирующих функций $\sigma(\vec{p})$ и $\chi_n(\vec{p})$.

Очевидно, что пробная функция $\sigma(\vec{p})$ должна воспроизводить поведение исходного потенциала, вид которого в импульсном представлении дается формулой /2.3/.

Наиболее важной особенностью этого потенциала является существование у него области притяжения. С другой стороны, явный вид потенциала наталкивает на мысль использовать для его аппроксимации непрерывные аналоги δ -функции Дирака. Из широкого класса таких аппроксимантов мы выберем функцию Гаусса.

Однако использование волновой функции, например в виде $\sigma(\vec{p}) = e^{-\alpha p^2}$, приводит к тому, что полученный с ее помощью аппроксимант потенциала /3.4/ теряет свою способность образовывать связанное состояние. Поэтому в качестве пробной функции $\sigma(\vec{p})$ была выбрана p -волновая / $\ell = 1$ / функция Гаусса:

$$\sigma(\vec{p}) = p Y_{10}(\hat{p}) e^{-\frac{\alpha}{2} p^2} \quad /3.16/$$

В качестве функций $|\chi_n\rangle$ будем использовать известные кулоновские решения для гамилтониана мишени /см., например, /9/. Причем в силу того, что функции $|\chi_n\rangle$ входят в решение только через интегралы перекрытия $a_n = \langle \sigma | \chi_n \rangle$, явный вид $\sigma(p)$ диктует единственный выбор угловой части функции $\chi_n(\vec{p})$ в виде $\chi_n(\vec{p}) = \langle n, \ell = 1 | \chi | \vec{p} \rangle$, где $n = 2, 3, \dots$ / ℓ - орбитальное квантовое число/. После сделанных выше оговорок о выборе аппроксимирующих функций выражения /3.15/ можно представить в виде

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^{L=0}(k, p, k') &= \sum_{mm'} \delta_{\lambda_1} \delta_{\lambda'_1} (\ell m \lambda 0 | LM) (\ell' m' \lambda' 0 | LM) \sigma(p) \sigma^*(p') \times \\ &\times \tilde{V}_{\ell m \ell' m'}(k, k'), \end{aligned} \quad /3.17/$$

$$\text{где} \quad \tilde{V}_{\ell m \ell' m'}(k, k') = \int d\hat{k} d\hat{k}' Y_{\ell m}^*(\hat{k}) \langle \hat{k} | \hat{V} | \hat{k}' \rangle Y_{\ell' m'}(\hat{k}'), \quad /3.18/$$

$$\tilde{H}_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^{L=0}(p, p') = \sum_{nm} \epsilon_n (\ell m \lambda 0 | LM) (\ell' m \lambda' 0 | LM) \chi_n(p) \chi_n^*(p') \delta_{\ell\ell'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\lambda'_1} \quad /3.19/$$

где $\chi_n(p) = \chi_{n10}(p)$.

Переходя далее к случаю $L = 0$ /что эквивалентно выполнению условий $\ell = \lambda$, $m + \mu = 0$ /, получим

$$\tilde{V}_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^{L=0}(k, p, k') = (\ell 0 \ell 0 | 00) (\ell' 0 \lambda' 0 | 00) \delta_{\ell\lambda} \delta_{\lambda'_1} \sigma(p) \sigma^*(p') \tilde{V}_{\ell 0 \ell' 0}(k, k'), \quad /3.20/$$

$$\tilde{H}_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^{L=0}(p, p') = \sum_n \epsilon_n (\ell 0 \ell 0 | 00) (\ell' 0 \lambda' 0 | 00) \chi_n(p) \chi_n^*(p') \delta_{\ell\lambda} \delta_{\lambda'_1} \delta_{\ell\ell'}.$$

Интегральное уравнение /3.13/ в случае $L = 0$ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi_{\ell\ell}^{L=0}(k, p) &= G_0(E, k) \int_0^\infty p'^2 dp' k'^2 dk' \sum_{\ell'\lambda'} \tilde{V}_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^{L=0}(k, p, k') \psi_{\ell'\lambda'}^{L=0}(p', k') + \\ &+ G_0(E, k) \int_0^\infty p'^2 dp' \sum_{\ell'\lambda'} \tilde{H}_{\ell\lambda\ell'\lambda'}^{L=0}(p, p') \psi_{\ell'\lambda'}^{L=0}(p', k). \end{aligned}$$

После подстановки в это уравнение выражений /3.20/ получим единственное интегральное уравнение относительно парциальной волновой функции $\psi_{11}^{L=0}(k, p)$:

$$\begin{aligned} \psi_{11}^{L=0}(k, p) &= \frac{1}{3} G_0(E, k) \int_0^\infty p'^2 dp' k'^2 dk' \sigma(p) \sigma^*(p') \tilde{V}_{10}(k, k') \psi_{11}^{L=0}(k', p') + \\ &+ \frac{1}{3} G_0(E, k) \int_0^\infty p'^2 dp' \sum_n \epsilon_n \chi_n(p) \chi_n^*(p') \psi_{11}^{L=0}(k, p'), \end{aligned} \quad /3.21/$$

где $\tilde{V}_{10}(k, k') = \int d\hat{k} d\hat{k}' Y_{10}^*(\hat{k}) \langle \hat{k} | \hat{V} | \hat{k}' \rangle Y_{10}(\hat{k}')$.
Введем новые неизвестные функции:

$$B(k) = \int_0^\infty p'^2 dp' \sigma^*(p') \psi_{11}^{L=0}(k, p), \quad A_n(k) = \int_0^\infty p'^2 dp' \chi_n^*(p') \psi_{11}^{L=0}(k, p),$$

удовлетворяющие следующей системе интегральных уравнений:

$$\left\{ \begin{aligned} B(k) &= \frac{1}{3} G_0(E, k) \int_0^\infty p'^2 dp' \sigma^*(p') \sigma(p) \int_0^\infty k'^2 dk' \tilde{V}_{10}(k, k') B(k') + \\ &+ \frac{1}{3} G_0(E, k) \sum_n \epsilon_n \int_0^\infty p'^2 dp' \sigma^*(p') \chi_n(p) A_n(k), \\ A_n(k) &= \frac{1}{3} G_0(E, k) \int_0^\infty p'^2 dp' \sigma(p) \chi_n^*(p') \int_0^\infty k'^2 dk' \tilde{V}_{10}(k, k') B(k') + \\ &+ \frac{1}{3} G_0(E, k) \sum_m \epsilon_m \int_0^\infty dp' p'^2 \chi_n^*(p') \chi_m(p) A_m(k), \end{aligned} \right.$$

которую с учетом условий ортогональности функции $\chi_n(p)$ можно представить в виде

$$\begin{cases} B(k) = \frac{1}{3} G_0(E, k) \int_0^\infty k'^2 dk' \tilde{V}_{10}(k, k') B(k') + \frac{1}{3} G_0(E, k) \sum_n a_n \epsilon_n A_n(k), \\ A_n(k) = \frac{1}{3} G_0(E, k) a_n \int_0^\infty k'^2 dk' \tilde{V}_{10}(k, k') B(k') + \frac{1}{3} G_0(E, k) A_n(k), \end{cases} /3.22/$$

где $a_n = \int p^2 dp \chi_n(p) \sigma^*(p) = a_n^*$. Как отмечалось выше, эту систему можно редуцировать следующим образом. Представим второе уравнение системы /3.22/ в виде

$$A_n(k) = \frac{1}{3} a_n G_0(E - \frac{1}{3} \epsilon_n, k) \int_0^\infty k'^2 dk' \tilde{V}_{10}(k, k') B(k'),$$

где $G_0(E - \frac{1}{3} \epsilon_n)$ - сдвинутая функция Грина. Тогда после подстановки этого соотношения в первое уравнение системы /3.22/ и учета тождества Гильберта для функции Грина получим однородное одномерное интегральное уравнение относительно одной неизвестной функции $B(k)$:

$$B(k) = \frac{1}{3} (1 - \sum_n a_n^2) G_0(E, k) \int_0^\infty k'^2 dk' \tilde{V}_{10}(k, k') B(k') + \frac{1}{3} \sum_n a_n^2 G_0(E - \frac{1}{3} \epsilon_n, k) \int_0^\infty k'^2 dk' \tilde{V}_{10}(k, k') B(k'). /3.23/$$

Заметим, что нашей целью не является решение этого интегрального уравнения /это самостоятельная задача/. Оно необходимо нам для того, чтобы найти значения энергии связи E_n для $dt\mu$ -системы в состоянии с $L = 0$. Для решения этой задачи необходимо свести интегральное уравнение /3.23/ к алгебраическому. А это, в свою очередь, можно сделать, выполнив соответствующим образом вторичную факторизацию аппроксиманта потенциала $\tilde{V}_{10}(k, k')$. Выпишем явное выражение для функции $\tilde{V}_{10}(k, k')$ в случае гауссовой p -волновой пробной функции $\sigma(p)$:

$$\tilde{V}_{10}(k, k') = \int d\hat{k} d\hat{k}' Y_{10}^*(\hat{k}) \langle \hat{k} | \hat{V} | \hat{k}' \rangle Y_{10}(\hat{k}'), /3.24/$$

где $\langle \hat{k} | \hat{V} | \hat{k}' \rangle = \int d\vec{p} d\vec{p}' \sigma(\vec{p}) \langle \vec{k} \vec{p} | V | \vec{k}' \vec{p}' \rangle \sigma^*(\vec{p}')$.

Подставляя в последнее выражение явный вид матричного элемента потенциала /2.3'/ и усредняя его с гауссовой функцией $\sigma(p)$ в форме /3.16/, получим:

$$\langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}' \rangle = \frac{32\pi^4}{a^3 q^2} (e^{-\frac{\alpha^2 \gamma_1^2 q^2}{4}} - e^{-\frac{\alpha^2 \gamma_2^2 q^2}{4}}) + \frac{64\pi^6}{3a} (\gamma_1^2 e^{-\frac{\alpha^2 \gamma_1^2 q^2}{4}} - \gamma_2^2 e^{-\frac{\alpha^2 \gamma_2^2 q^2}{4}}) Y_{10}(\hat{q}), /3.25/$$

где $\hat{q} = \hat{k} - \hat{k}'$.

Откуда после интегрирования по углам (\hat{k}, \hat{k}') по формуле /3.24/ будем иметь:

$$\tilde{V}_{10}(k, k') = \frac{32\pi^4}{a^3 k k'} [g(\gamma_1) (e^{-\frac{\alpha^2 \gamma_1^2}{4} (k-k')^2} - e^{-\frac{\alpha^2 \gamma_1^2}{4} (k+k')^2}) - g(\gamma_2) (e^{-\frac{\alpha^2 \gamma_2^2}{4} (k-k')^2} - e^{-\frac{\alpha^2 \gamma_2^2}{4} (k+k')^2})], /3.26/$$

где $g(\gamma_\alpha) = \frac{2\pi^2}{3} - \frac{1}{\gamma_\alpha^2} (3 + \frac{8}{3} \pi^2)$, $\alpha = 1, 2$.

На рис.2 приведен график функции $\tilde{V}_{10}(k, k')$ при фиксированном значении параметра $\alpha = 500 \text{ Фм}^2$.

С. Вторичная факторизация. Метод Бейтмана

Таким образом, исследуемая функция $\tilde{V}_{10}(k, k')$ достаточно гладкая /по обоим аргументам/ и симметрична относительно замены $k \leftrightarrow k'$. Для факторизации такой функции от двух переменных наиболее эффективным является метод Бейтмана /10/. Суть этого метода заключается в следующем. Поверхность функции $\tilde{V}_{10}(k, k')$ /см. рис.2/ рассекается плоскостями, перпендикулярными к осям k и k' , и приближенная /уже факторизованная/ функция $\tilde{V}_{10}^B(k, k')$ строится так, что она совпадает с точной функцией на линиях пересечения секущих плоскостей с поверхностью $\tilde{V}_{10}(k, k')$. Факторизованная функция $\tilde{V}_{10}^B(k, k')$ находится из условия $\det \Delta = 0$, где

$$\Delta = \begin{pmatrix} \tilde{V}_{10}^B(k, k') & \tilde{V}_{10}(k, s_1) & \dots & \tilde{V}_{10}(k, s_n) \\ \tilde{V}_{10}(s_1, k') & \tilde{V}_{10}(s_1, s_1) & \dots & \tilde{V}_{10}(s_1, s_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{V}_{10}(s_n, k') & \tilde{V}_{10}(s_n, s_1) & \dots & \tilde{V}_{10}(s_n, s_n) \end{pmatrix}, /3.27/$$

s_n - точки пересечения секущих плоскостей /точки Бейтмана/ с координатными осями (k, k') . Условие /3.27/ можно переписать в форме, напоминающей конечномерную аппроксимацию /сравните с /3.21//:

$$\tilde{V}_{10}^B(k, k') = \sum_{i,j=1}^N \tilde{V}_{10}(k, s_i) (d^{-1})_{ij} \times \tilde{V}_{10}(s_j, k'), /3.28/$$

где $d_{ij} = \tilde{V}_{10}(s_i, s_j)$.

Из /3.28/ в силу /3.23/ имеем следующую систему алгебраических уравнений:

$$c_j = \sum_{ik} \phi_{ik} I_{ij}(E) c_k + \frac{1}{3} \sum_n \sum_{ik} (d^{-1})_{ik} a_n^2 I_{ij}(E - \frac{1}{3} \epsilon_n) c_k,$$

$$c_j = \int_0^\infty k^2 dk \tilde{V}_{10}(k, s_j) B(k),$$

$$\phi_{ik} = \frac{1}{3} (1 - \sum_n a_n^2) (d^{-1})_{ik},$$

$$I_{ij}(E) = \int_0^\infty k^2 dk G_0(E, k) \hat{V}_{10}(k, s_i) \tilde{V}_{10}(s_j, k). \quad /3.29/$$

Заметим, что ранг этой системы равен числу используемых точек Бейтмана, а все интегралы $I_{ij}(E)$ в уравнении /3.29/ берутся аналитически и представляют собой комбинации интегралов ошибок $\Phi(x)$ и их производных /именно в этом смысле понимается термин "трансцендентность алгебраического уравнения"/. Из условия равенства нулю детерминанта системы /3.29/ получаем трансцендентное алгебраическое уравнение на E , которое решалось графически на ЭВМ.

В заключение этого раздела приведем формулу для оценки сходимости бейтмановской процедуры:

$$\min_{\{s_k\}} \chi(s_1, \dots, s_n) < \epsilon, \quad /3.30/$$

$$\text{где } \chi(s_1, \dots, s_n) = \frac{\int dk dk' |\tilde{V}_{10}^B(k, k') - \tilde{V}_{10}(k, k'; s_1, \dots, s_n)|^2}{\int dk dk' \tilde{V}_{10}^2(k, k')}.$$

Из условия минимума функции $\chi(s_1, \dots, s_n)$ выбирались значения используемых в решении точек Бейтмана.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ. ВЫВОДЫ

В этом разделе приведены результаты конкретных вычислений энергии связанного состояния $dt\mu$ -молекулы в состоянии с $L = 0$ для набора аппроксимирующих функций $\chi_n(\rho)$ / $n = 2, 3, 4, 5, 6$ / некоторого числа бейтмановских точек (s_1, s_2, s_3) и в зависимости от значения варьируемого параметра α^* .

*Заметим, что вне приведенного в таблице 1 интервала значений параметра α уравнение /3.29/ не имеет решений.

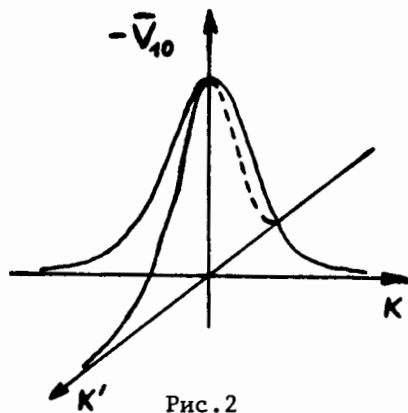


Рис. 2

Таблица 1

Количество кулоновских ВФ $ \chi_{np}\rangle$	Число точек Бейтмана S_n /а.е./	Значение параметра α /Фм/	Энергия связи $dt\mu$ -молекулы E /эВ/
χ_{2p}	$S_0 = 0$	359,8	2820,5
	$S_0 = 0$	348,4	2810,7
	$S_1 = 1,02$	371,6	2850,9
$\sum_{n=2}^4 \chi_{np}$	$S_0 = 0$	402,8	2950,5
	$S_0 = 0$	404,6	2945,4
	$S_1 = 1,02$	412,2	2970,6
$\sum_{n=2}^6 \chi_{np}$	$S_0 = 0$	408,7	2995,3
	$S_0 = 0$	411,1	3015,9
	$S_1 = 1,02$	426,4	3025,2
	$S_0 = 0$	389,5	2748,7
	$S_1 = 1,02$	417,4	3010,9
	$S_2 = 1,2$	439,6	3033,1

Таблица 2

Энергия связи E_{Lv} состояний (Lv) мезомолекулы $dt\mu$ /эВ/		Метод
/00/	/01/	
317,04	32,21	Двухуровневое приближение /5/
319,09	34,70	Теория возмущений ИТЕР /1/
319,15	34,87	
319,15	34,87	ВААР /1/
318,07	32,95	Вариационный расчет /4/
319,1	34,7	Конечномерная аппроксимация /данный расчет/

Табл.1 дает наглядное представление о том, как работают используемые здесь методы аппроксимации потенциала взаимодействия и гамильтониана мишени: метод конечномерной аппроксимации и метод факторизации Бейтмана. Для сравнения полученных результатов с результатами расчетов энергии связи $dt\mu$ -молекулы /при $L = 0$ / других авторов приведем таблицу из работы ^{1/} /все значения энергии связи E отсчитываются в табл.2 от энергии основного состояния гамильтониана мишени, равной $\epsilon_1 = 2714,1$ эВ/.

Таким образом, чтобы получить значения энергии связи, сравнимые с лучшими /на сегодняшний день/ оценками, полученными другими методами /см.табл.2/, оказалось необходимым и достаточным аппроксимировать потенциал оператором первого ранга /в виде гауссовой p -волновой функции/, а гамильтониан мишени - оператором пятого ранга /в виде p -волновой части кулоновских функций точной задачи/. При этом для вторичной факторизации потенциала понадобилось три точки Бейтмана, а сходимость бейтмановской процедуры для этих трех точек оказалась равной $\epsilon = 3 \cdot 10^{-8}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Виницкий С.И. и др. ОИЯИ, Р4-13036, Дубна, 1980.
2. Беляев В.Б., Зубарев А.Л., Картавцев О.И. ОИЯИ, Р4-80-400, Дубна, 1980.
3. Беляев В.Б. и др. ОИЯИ, Р4-81-72, Дубна, 1981.
4. Carter V.P. Phys.Rev., 1965, p.139.
5. Зельдович Я.Б. Герштейн С.С. УФН, 1960, 71, с.581.
6. Ситенко А.Г. Лекции по теории рассеяния, Вища школа, Киев, 1971.
7. Шпольский Э.В. Атомная физика, т.2, "Наука", М., 1974.
8. Варшалович В.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента, Л., "Наука", 1975.
9. Bateman H. Proc. Roy. Soc., A100, p.441, 1922.
10. Беляев В.Б., Вжиционко Е. ОИЯИ, Р4-4144, Дубна, 1968.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 октября 1983 года

Беляев В.Б., Сергеенков С.А.
О спектре $dt\mu$ -мезомолекулы

Р4-83-734

Вычислены низколежащие уровни энергии мезомолекулы $dt\mu$ в состоянии с $L = 0$. Расчеты выполнены при использовании метода конечномерной аппроксимации гамильтониана мишени ψ^- и потенциала взаимодействия V_d . Для вторичной факторизации потенциала \bar{V}_d применяется метод Бейтмана. Сходимость бейтмановской процедуры с точностью до трех точек составила: $\epsilon = 3 \cdot 10^{-8}$. Проводится сравнение с результатами, полученными с использованием других методов расчета.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Belyaev V.B., Sergeenkov S.A.
On the Spectrum of $dt\mu$ -Mesic Molecule

Р4-83-734

Low-lying $dt\mu$ mesic-molecule energy levels with zero total angular momentum are calculated. The finite-rank approximation method for target Hamiltonian and interaction potential is used. The secondary potential factorization is given by the Bateman procedure. Convergence of the latter over three points gives $\epsilon = 3 \cdot 10^{-8}$. Comparison with the results, getting by other calculated schemes, is discussed as well.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983