объединенный институт ядерных исследований дубна

Р4-85-386

М.Касчиев, А.В.Матвеенко, Я.Реваи*

ДИНАМИЧЕСКАЯ ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ ДЛЯ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ТРЕХ ЧАСТИЦ И МОДЕЛЬ КЛАССИЧЕСКОГО РОТАТОРА: РАСЧЕТ РЕЗОНАНСА В $tt\mu^-$ СИСТЕМЕ

Направлено в журнал "Physics Letters"

* ЦИФИ, Будапешт

1985

В работах[1,2] был получен асимптотически корректный гамильтониан для простейшей двухатомной молекулы. В нем происходит переопределение традиционного для метода Борна-Оппенгеймера разбиения полной динамической системы на быструю и медленную подсистемы, в частности, ось квантования движения легкой частицы совпадает с одной из главных осей тензора инерции системы.

Ниже проведен парциальный анализ /отделение угловых переменных/ нового гамильтониана. Он приводит к динамической задаче двух центров с точными квантовыми числами: четности и полного углового момента J, которая оказывается $(J+1)$-мерной системой уравнений Шредингера от двух переменных. Далее вводится модель классического ротатора, с помощью которой система уравнений редуцируется к уравнению для компоненты волновой функции с проекцией углового момента на главную ось тензора инерции $m=0$. Рассмотрение проведено на примере $J = 2$ состояния $tt\mu^-$ -мезомолекулы с нормальной $p=(-1)^J$ четностью.

Гамильтониан задачи имеет вид

$$H_{\Lambda\Omega} = h_{\Lambda\Omega} - \frac{1}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial R_\Lambda^2} + \frac{5}{R_\Lambda}\frac{\partial}{\partial R_\Lambda}\right) + T_{\text{вр}} - \frac{3}{2MR_\Lambda^2} + \frac{1}{2MR_\Lambda^2}\frac{1}{1-\Delta}\{\Delta J_1^2 + iJ_1[4\mathfrak{L}_1 + 2\rho\Delta(\mathfrak{L} + \frac{u}{2})]\}. \qquad /1/$$

Здесь гамильтониан динамической задачи двух центров

$$h_{\Lambda\Omega} = -\frac{1}{2m}\rho^2\Delta_{\xi\eta} + \sqrt{\rho}\,V, \qquad /2/$$

оператор классического волчка

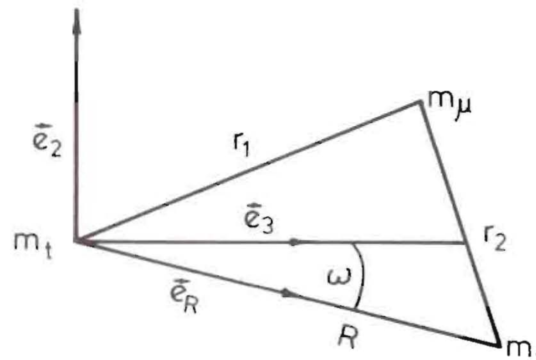
$$T_{\text{вр}} = \frac{1}{2}\left(\frac{J_1^2}{I_1} + \frac{J_2^2}{I_2} + \frac{J_3^2}{I_3}\right). \qquad /3/$$

Оператор орбитального момента системы

$$\vec{J} = \vec{e}_1 J_1 + \vec{e}_2 J_2 + \vec{e}_3 J_3 \qquad /4/$$

в подвижных ортах, которые задают мгновенное положение главных осей тензора инерции системы трех частиц /см. рисунок/. Кориолисово взаимодействие определяется операторами

$$\mathfrak{L} = \frac{s}{\xi^2-\eta^2}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\xi} - \xi\frac{\partial}{\partial\eta}\right), \quad \mathfrak{L}_1 = \frac{s}{\xi^2-\eta^2}\left[\eta(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi} - + \xi(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}\right]. \qquad /5/$$



Частицы находятся в вершинах треугольника, плоскость которого определяется ортами e_2 и e_3. Эти орты задают мгновенное направление главных осей тензора инерции системы. Движение мезона квантуется на ось e_3, которая составляет угол ω с прямой, соединяющей ядра – осью квантования в традиционном методе Борна-Оппенгеймера. Ось e_1 перпендикулярна плоскости рисунка.

Переменными быстрой подсистемы являются $\xi = (r_1 + r_2)/R$ и $\eta = (r_1 - r_2)/R$, поворот от лабораторных осей координат к ортам $\{e_1, e_2, e_3\}$ осуществляется при помощи углов Эйлера $\{\alpha, \beta, \gamma\}$, которые связаны со сферическими углами оси $e_R\{\Theta, \Phi\}$ и углом поворота плоскости, в которой находится система, относительно оси $e_R - \phi$ /эти углы являются стандартными переменными в теории Борна-Оппенгеймера/ следующими формулами:

$$\operatorname{ctg}(\alpha - \Phi) = \cos\Theta\operatorname{ctg}\phi + \operatorname{ctg}\omega\frac{\sin\Theta}{\sin\phi},$$

$$\cos\beta = \cos\Theta\cos\omega - \sin\Theta\sin\omega\cos\phi, \qquad /6/$$

$$\operatorname{tg}\gamma = -\cos\omega\operatorname{ctg}\phi - \operatorname{ctg}\Theta\frac{\sin\omega}{\sin\phi}.$$

Наконец, $R = R_\Lambda/\sqrt{\rho}$, где ρ, а также компоненты тензора инерции I_i и величины ω, Δ, s, u являются функциями координат:

$$\rho = 1 + \frac{m}{4M}(\xi^2 + \eta^2 - 1), \qquad I_1 = I_2 + I_3 = MR_\Lambda^2,$$

$$I_2 = \frac{1}{2}MR_\Lambda^2(1 + \sqrt{1-\Delta}), \qquad s = \sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}, \qquad /7/$$

$$u = \xi\eta/s, \quad \Delta = \frac{m}{M}\left(\frac{s}{\rho}\right)^2, \quad \sin 2\omega = \frac{m}{2M}\frac{s}{\rho}\frac{\xi\eta}{\sqrt{1-\Delta}}.$$

Приведенные массы M и m имеют вид $M = m_t/2$, $1/m = 1/m_\mu + 1/2m_t$ /см. рисунок/, а оператор $\Delta_{\xi\eta}$ является $\{\xi, \eta\}$ частью оператора Лапласа в сфероидальных координатах $\{\xi, \eta, \phi\}$.

Индексы Λ, Ω, которые возникли в работах[1,2] при построении гамильтониана $H_{\Lambda\Omega}$ из стандартного гамильтониана Борна-Оппенгеймера, в дальнейшем будем опускать. Действуя обычным способом[3], будем искать состояния системы с полным угловым моментом J, полной четностью p и четностью по координатам мезона q в виде

$$\Psi_M^{Jpq}(r,R) = \sum_{m=0}^{J} B_{Mm}^{Jp}(\alpha,\beta,\gamma)\,\psi^{Jmq}(\xi,\eta,R). \qquad /8/$$

Здесь суммирование производится по значениям проекции полного углового момента на подвижную ось. Квантовое число M есть проекция полного углового момента на неподвижную ось. Угловая часть волновой функции имеет вид

$$B_{Mm}^{Jp} = D_{Mm}^{J} + p(-1)^{J+m} D_{M-m}^{J}, \qquad /8а/$$

она содержит D-функции Вигнера[4] и обеспечивает квантовые числа J и p, а ее радиальная часть ищется в виде

$$\psi^{Jmq}(\xi,\eta,R) = \tilde{\psi}^{Jm}(\xi,\eta,R) + q(-1)^m\tilde{\psi}^{Jm}(\xi,-\eta,R), \qquad /8б/$$

который учитывает тождественность ядер /квантовое число q /. Число слагаемых в разложении /8/ равно $(J+1)$, следовательно,после усреднения по угловым переменным $\{\alpha,\beta,\gamma\}$ мы придем в общем случае к системе $(J+1)$ уравнений Шредингера с матричным гамильтонианом

$$H^{Jpq} = h^{Jpq} - \frac{1}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{5}{R}\frac{\partial}{\partial R}\right) - \frac{3}{2MR^2}, \qquad /9/$$

в составе которого выделен матричный оператор динамической задачи двух центров для вращательных состояний

$$h^{Jpq} = h_{\Lambda\Omega} + T_{вр} + \frac{1}{2MR^2}\,\frac{1}{1-\Delta}\{\Delta J_1^2 + iJ_1[4\mathcal{L}_1 + 2\rho\Delta(\mathcal{L} + \frac{u}{2})]\}. \qquad /10/$$

Следовательно, в этом случае мы приходим к системе уравнений Шредингера для быстрой подсистемы

$$h^{Jpq}\phi(\xi,\eta;R) = \epsilon^{Jpq}(R)\,\phi(\xi,\eta;R), \qquad /10а/$$

решением которой является вектор-столбец $||\phi||$ с компонентами $\phi_m(\xi,\eta;R)$ $(0 \le m \le J)$. Одноуровневое приближение Борна-Оппенгеймера в этом случае имеет вид

$$\Psi^{Jpq}(\xi,\eta,R) = \sum_{m=0}^{J}\chi_m(R)\,\phi_m(\xi,\eta;R), \qquad /11/$$

где $||\phi||$ есть решение уравнения /10а/ для основного состояния. Усреднение по "быстрым" переменным $\{\xi,\eta\}$ приведет к системе уравнений Шредингера для $\chi_m(R)$, которая будет описывать движение медленной подсистемы.

Поскольку решение системы уравнений Шредингера в плоскости $\{\xi,\eta\}$ остается довольно сложной задачей, мы отбросим в гамильтониане быстрой подсистемы /10/ последнее слагаемое /модель классического ротатора/. Тогда

$$h_R^{Jpq} = h_{\Lambda\Omega} + T_{вр}, \qquad /12/$$

где $T_{вр}$ /3/ является оператором асимметричного волчка, соответствующего системе трех частиц /в данном случае $tt\mu^-$ /. Составляющие тензора инерции, входящие в /3/, зависят от координат, давая, таким образом, вклад в потенциальную энергию задачи двух центров. Сделаем еще одно упрощение, ограничиваясь в разложении /11/ членом с $m = 0$. В результате этих двух упрощений мы приходим к одноуровневому приближению Борна-Оппенгеймера стандартного типа[5]

$$\left[-\frac{1}{2M}\left(\frac{1}{R} + \frac{\partial}{\partial R}\right)^2 + \epsilon^J(R) + \frac{1}{2M}\left\langle\frac{\partial\phi}{\partial R},\frac{\partial\phi}{\partial R}\right\rangle - \frac{3}{4MR^2} - E_R\right]\chi(R) = 0. \qquad /13/$$

В уравнении /13/ $\epsilon^J(R)$ и ϕ являются собственным значением и волновой функцией задачи двух центров с гамильтонианом /12/ и проекцией J-вектора на подвижную ось $m = 0$.

У $tt\mu^-$-мезомолекулы существует / $J = 2$, $p = 1$, $q = 1$/ уровень энергии. Метод Борна-Оппенгеймера, основанный на уравнении с классическим гамильтонианом[6], дает значение энергии связи $E = 172{,}7$ эВ. В нашем подходе уравнение /13/ приводит к величине $E = 175$ эВ. Более интересным представляется вычисление положения резонанса в рассеянии $t\mu^-$-мезоатома на t, который в ранних расчетах[7] находился при $E^{рез} = 4{,}5$ эВ. Уравнение /13/ дает в этом случае значение $E_R^{рез} = 2{,}95$ эВ для положения резонанса и величину порядка 0,5 эВ для его ширины. Модель классического ротатора в одноуровневом приближении $m = 0$ приводит к значительному понижению положения / $J = 2$/ резонанса в $tt\mu^-$-системе.

До настоящего времени особое внимание уделялось расчету слабосвязанных состояний с $J = 1$ в $dd\mu^-$ и $dt\mu^-$-мезомолекулах[8]. Наличие узкого резонанса в $tt\mu^-$-системе свидетельствует о возможности резонансного механизма в образовании $tt\mu^-$-мезомолекулы. Это, в свою очередь, может внести заметный вклад в кинетику μ-катализа ядерной реакции в смеси $\mu^- + D_2 + T_2$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Матвеенко А.В. Письма в ЖЭТФ, 1984, 40, с.493.
2. Matveenko A.V. Phys.Lett., 1983, 129B, p.11.
3. Revai J., Matveenko A.V. Nucl.Phys., 1980, A339, p.448.
4. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. "Наука", Л., 1975.
5. Касчиев М., Матвеенко А.В. ОИЯИ, Р4-85-100, Дубна, 1985.
6. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, 13, с.1336.
7. Матвеенко А.В., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1970, 58, с.1640.
8. Gocheva A.D. et al. Phys.Lett., 1985, 153B, p.349.

Рукопись поступила в издательский отдел
23 мая 1985 года.

Касчиев М., Матвеенко А.В., Реваи Я.

Р4-85-386

Динамическая задача двух центров для вращательных состояний трех частиц и модель классического ротатора: расчет резонанса в $tt\mu^-$-системе

Используется асимптотически корректный гамильтониан для молекулярных состояний в системе трех частиц, ранее полученный одним из авторов. Проводится парциальный анализ этого гамильтониана и формулируется модель классического ротатора для системы трех частиц. Сделанные предположения позволяют рассчитать положение $J = 2$ резонанса в $tt\mu^-$-мезомолекуле.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод Г.Г.Сандуковской

Kaschiev M., Matveenko A.V., Revai J.

P4-85-386

The Dynamic Two-Center Problem for Rotational States and the Classical Rotator Model: Calculation of J=2 Resonance in the $tt\mu^-$ System

The partial wave analysis is performed for the Hamiltonian obtained earlier for a three-particle system of the molecular type. The Hamiltonian of the two-center problem with exact quantum numbers of the angular momentum and parity is introduced. Finally, the classical rotator model is suggested for the calculation of $J = 2$ resonance in the $tt\mu^-$ system. It testifies to a possible resonance mechanism of the $tt\mu^-$ mesomolecule production.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985