



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P4-85-917

С.И.Виницкий, В.И.Коробов, И.В.Пузынин

ВАРИАЦИОННЫЙ РАСЧЕТ
УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ
 μ -МЕЗОМОЛЕКУЛ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА

Направлено в "ЖЭТФ"

1985

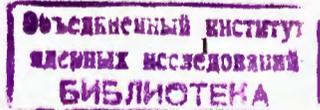
I. Введение

В работе ^{/1/} были приведены значения энергии связи 22 вращательно-колебательных состояний мезомолекул изотопов водорода, вычисленные в адиабатическом представлении задачи трех тел ^{/2/} с точностью 0,1 эВ. Особый интерес представляют уровни энергии $d d \mu$ и $d t \mu$ мезомолекул в состоянии $J=1$, $v=1$, поскольку они определяют резонансный механизм образования этих мезомолекул ^{/3/} и существенны для вычисления скоростей ядерных реакций синтеза ^{/4/}. Для надежных расчетов скоростей и кинетики процессов мюонного катализа, а также для аккуратной интерпретации новейших экспериментов ^{/5/} указанные слабосвязанные уровни должны быть вычислены с ошибкой порядка 0,001 эВ. В цитируемой выше работе ^{/1/} были высказаны пожелания о независимом подтверждении выполненных расчетов методами, отличными от адиабатического подхода, и об увеличении точности вычислений.

Намеченная программа реализуется в двух направлениях. Первое направление, связанное с повышением точности алгоритмов в рамках адиабатического метода, представлено в недавней работе ^{/6/}. Отметим, что только в последнее время появился ряд новых вариационных расчетов ^{/7-10/} уровней энергии мезомолекул, согласующихся в пределах точности с расчетами по адиабатическому методу, но претендующих на более высокую точность.

С целью уточнения результатов работы ^{/1/} и сравнения с результатами работ ^{/6-10/} в данной работе реализована вариационная схема решения уравнения Шредингера для системы трех частиц в сфероиальных координатах ^{/2,11/}, которое решалось и ранее в рамках адиабатического метода. Как отмечено уже в работе ^{/12/}, эта система координат наиболее полно отражает симметрию и динамику трехчастичных взаимодействий в мезомолекулах. Она выбрана еще и потому, что в указанных выше вариационных расчетах ^{/7-10/} используются периметрические координаты и интересно сравнить особенности независимых вычислительных схем.

Первый успех в расчетах вращательных уровней мезомолекул вариационным методом с использованием сфероиальных координат достигнут в работе ^{/13/}. В нашей схеме используется система пробных функций, подобная системе, применяемой в этой работе, но с расширенным набором нелинейных параметров и существенным увеличением количества пробных функций для более правильного описания волновой функции как в области взаимодействия, так и в асимптотической области.



Реализация данной вариационной схемы, наряду с вариационно-разностным методом /14/, является развитием второго направления, относящегося к разработке независимых методов расчета уровней энергии μ -мезомолекул изотопов водорода. В настоящей работе выполнены вариационные расчеты уровней энергии мезомолекул изотопов водорода в состояниях с $J=0$ и $J=1$ с использованием до 1000 опорных функций, что позволило достигнуть точности вычислений $\sim 0,001$ эВ, отвечающей современным требованиям теории и эксперимента.

2. Уравнение Шредингера для вращательных состояний $J=0$ и $J=1$ мезомолекул и выбор вариационных волновых функций

Мезомолекулой принято называть молекулярный ион, состоящий из ядер изотопов водорода p , d и t и отрицательно заряженного мюона μ /15/. Гамильтониан такой системы трех частиц имеет вид ($e = \hbar = m_e = 1$) /1/

$$H = -(2M_0)^{-1} \{ (\nabla_R + \alpha/2 \nabla_r)^2 - [(1+\alpha)/2]^2 \Delta_r \} + h_a + R^{-1} \quad (1)$$

Здесь \vec{R} и \vec{r} - радиус-векторы, соединяющие соответственно ядра с массами $M_a \gg M_b$ и середину отрезка R с мюоном, $M_0 = M_a M_b / (M_a + M_b)$ - приведенная масса ядер, величина $\alpha = (M_b - M_a) / (M_a + M_b)$ характеризует расстояние $\alpha/2 R$ от середины R до центра масс ядер,

$$h_a = -(2m_a)^{-1} \Delta_r - r_a^{-1} - r_b^{-1} \quad (2)$$

гамильтониан мюона в поле закрепленных зарядов ядер, r_a и r_b - расстояния от ядер до мюона, $m_a = m_\mu M_a / (m_\mu + M_a)$ - приведенная масса мюона в мезоатоме ($a\mu$): $a = p, d$ или t . В гамильтониане явно выделена зависимость от приведенной массы мюона, поскольку интерес представляет не полная энергия E мезомолекулы, а ее энергия связи $-\epsilon_{\mu\nu} = (E + 1/2 m_a) 2R\gamma$. Последняя отсчитывается от энергии $E_{a\mu} = -1/2 m_a 2R\gamma$ основного состояния мезоатома ($a\mu$) с массой ядра $M_a \gg M_b$. В расчетах использовались следующие константы: $R\gamma = 13,6058041$ эВ, $M_p = 1836,151527$, $M_d = 3670,481$, $M_t = 5436,918$, $m_\mu = 206,769$.

Гамильтониан (1) в представлении полного орбитального момента J во вращающейся сфероидальной системе координат $\{\vec{R}, \vec{r}\} = \{R \Theta \Phi, \xi \eta \varphi\}$ был получен в работе /16/ и в явном виде выписан

в работах /2, II/x). В последних работах было получено уравнение Шредингера трех частиц в сфероидальной системе координат для $J+1$ -компонентной волновой функции $\{F_m^{J\lambda}(\xi \eta R)\}_{m=0, J}$, заданной в области $\Omega = \{1 \leq \xi < \infty, -1 \leq \eta \leq 1, 0 \leq R < \infty\}$. Здесь $m = 0, 1, \dots, J$ - собственные значения проекции J на R , нумерующие компоненты волновой функции при фиксированном значении J и $\lambda = \epsilon_{\mu\nu} (-1)^J = \pm 1$ - полной четности, которая определяет знак вращательного состояния^{xx}. Указанное уравнение позволяет рассчитать любые вращательно-колебательные состояния ($J\nu$) мезомолекул. При $J=0, \lambda = +1$ и $J=1, \lambda = -1$ оно принимает вид ($e = \hbar = m_a = 1$):

$$J=0: (H_{00}^{0+} - E) F_0^{0+} = 0 \quad (3)$$

$$H_{00}^{0+} = -\frac{1}{2M} \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{MR^2} \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} [(\xi - \alpha \eta)(\xi^2 - 1) \left(\frac{\partial}{\partial \xi} + R \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial R} \right) + (\eta - \alpha \xi)(1 - \eta^2) \left(\frac{\partial}{\partial \eta} + R \frac{\partial^2}{\partial \eta \partial R} \right) - \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{4M} [\xi^2 + \eta^2 - 2 - 2\alpha(\xi\eta + 1)] \right\} \cdot \frac{4}{R^2} \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] - \frac{4}{R} \frac{\xi}{\xi^2 - \eta^2} + \frac{1}{R} \int d\xi d\eta dR \tau (F_0^{0+})^2 = 1, \quad \tau = 1/8 R^5 (\xi^2 - \eta^2)$$

$$J=1: \begin{pmatrix} H_{00}^{1-} - E & H_{01}^{1-} \\ H_{10}^{1-} & H_{11}^{1-} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_0^{1-} \\ F_1^{1-} \end{pmatrix} = 0$$

^{x)} Ядра a и b помещены, соответственно, в фокусы $\{\xi = 1, \eta = -1\}$ и $\{\xi = 1, \eta = 1\}$ сфероидальной системы координат: $\vec{r} = \{\xi \eta \varphi\}$, $\xi = (r_a + r_b)/R$, $\eta = (r_a - r_b)/R$, φ - угол поворота вокруг большой оси эллипса, направленной по $\vec{R} = \{R \Theta \Phi\}$, т.е. ориентация этой оси в лабораторной системе координат задается сферическими углами Θ и Φ .

^{xx)} Следуя молекулярной терминологии, будем называть компоненты с $m = 0, 1$ - σ, π -компонентами; $\epsilon_{\mu\nu} = \pm 1$ - собственное значение оператора отражения в плоскости, образованной сферическими ортами \vec{e}_R и \vec{e}_Φ .

$$H_{00}^{1-} = H_{00}^{0+} + \frac{1}{MR^2} \cdot H_{11}^{1-} = H_{00}^{0+} + \frac{2}{R^2} \frac{\{1+(4M)^{-1}[\xi^2 + \eta^2 - 2 - 2x(\xi\eta+1)]\}}{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}$$

$$H_{01}^{1-} = -H_{10}^{1-} - \frac{1}{MR^2} \frac{\xi\eta - x}{[(\xi^2-1)(1-\eta^2)]^{1/2}}$$

$$H_{10}^{1-} = \frac{1}{MR^2} \frac{[(\xi^2-1)(1-\eta^2)]^{1/2}}{\xi^2 - \eta^2} [(\eta - x\xi) \frac{\partial}{\partial \xi} - (\xi - x\eta) \frac{\partial}{\partial \eta}]$$

$$\int d\xi d\eta dR \tau [(F_0^{1-})^2 + (F_1^{1-})^2] = 1.$$

Здесь $M = M_0/m_a$ — приведенная масса ядер, индекс (\pm) — знак вращательного состояния $\lambda = \pm 1$ ^{x)}. Энергия связи определяется выражением $-\epsilon_{TV} = (E + 1/2) m_a 2R\gamma$.

Трехмерные краевые задачи, подобные (3), (4), можно решать в рамках различных подходов, среди которых выделим метод сведения к обыкновенным дифференциальным уравнениям Канторовича и методы сведения к алгебраическим уравнениям Бубнова-Галеркина и Релея-Ритца ^{/17/}. К последним также сводятся многие вариационные процедуры, и в случае нелинейных параметров, так как эти параметры обычно оптимизируются независимо от линейных. В работе ^{/1/} был принят первый подход, реализованный с помощью разложения $F(\xi\eta R)$ по полному набору решений задачи двух центров (2). В данной работе применена вариационная процедура, основанная на принципе минимакса, с несколькими наборами нелинейных параметров, при выборе которых мы использовали наш предыдущий опыт работы с адиабатическим базисом. Так, при построении опорных функций были учтены особенности для π -компонент, (g, u) -симметрия ^{xx)} и некоторые известные асимптотические свойства решений ^{/2/}. Соответствующие разложения для вариационных \mathcal{G} - и π -функций при $J = 1$ имеют вид

^{x)} Для оператора H_{10}^{1-} возможно более симметричное представление $H_{10}^{1-} = \frac{1}{MR^2} \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} [(\xi^2-1)(1-\eta^2)]^{1/2} (\eta - x\xi) - \frac{\partial}{\partial \eta} [(\xi^2-1)(1-\eta^2)]^{1/2} (\xi - x\eta) \right\} - \frac{1}{MR^2} \frac{\xi\eta - x}{[(\xi^2-1)(1-\eta^2)]^{1/2}}$ которое, как показано в ^{/11/}, приводит к симметричной билинейной форме в вариационном функционале Релея-Ритца.

^{xx)} $p = (g, u) = \pm 1$ — собственные значения оператора инверсии координат мюона $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$.

$$F_0^{1-} = \sum_{s=1}^2 \sum_{ijk} a_{ijk}^{(os)} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{k-1} e^{-\alpha_s R} e^{-\beta_s R \xi} \quad (5b)$$

$i, j, k = 1, 2, \dots; i > j$

$$F_1^{1-} = \sum_{s=1}^2 \sum_{ijk} a_{ijk}^{(1s)} (\xi^2-1)^{1/2} (1-\eta^2)^{1/2} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{k-1} e^{-\gamma_s R} e^{-\nu_s R \xi} \quad (5\pi)$$

$i, j, k = 1, 2, \dots; i > j+1$

Для мезомолекул с тождественными ядрами ($x = 0$) наличие дополнительной (g, u) -симметрии приводит к ограничению на возможные комбинации квантовых чисел $(-1)^{J+I} = p$ при фиксированном полном спине ядер I , к сужению области Ω по переменной $\eta: \{0 \leq \eta < 1\}$ и соответственно к более редкой системе опорных функций

$$F_{0g}^{1-} = \sum_{s=1}^2 \sum_{ijk} a_{ijk}^{(os)} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{2k-2} e^{-\alpha_s R} e^{-\beta_s R \xi} \quad (6b)$$

$i, j, k = 1, 2, \dots; i > j$

$$F_{1g}^{1-} = \sum_{s=1}^2 \sum_{ijk} a_{ijk}^{(1s)} (\xi^2-1)^{1/2} (1-\eta^2)^{1/2} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{2k-1} e^{-\gamma_s R} e^{-\nu_s R \xi} \quad (6\pi)$$

$i, j, k = 1, 2, \dots; i > j+1$.

Для состояний с $J = 0$ имеются разложения только \mathcal{G} -типа с $i=j$. Опорными функциями с первым набором нелинейных параметров $\{\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, \nu_1\}$ аппроксимировалась асимптотика вариационных функций при $R \rightarrow 0$, а со вторым набором $\{\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, \nu_2\}$ — при $R \rightarrow \infty$.

Корректный учет динамики слабосвязанного состояния $J=1, u=1$ мезомолекулы $dt\mu$ был достигнут в результате представления вариационной \mathcal{G} -функции в виде суммы g и u составляющих

$$F_0^{1-} = F_{0g}^{1-} + F_{0u}^{1-}$$

$$F_{0g}^{1-} = \sum_{s=1}^2 \sum_{ijk} a_{ijk}^{(osg)} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{2k-2} e^{-\alpha_{sg} R} e^{-\beta_{sg} R \xi} \quad (7g)$$

$$F_{0u}^{1-} = \sum_{s=1}^2 \sum_{ijk} a_{ijk}^{(osu)} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{2k-1} e^{-\alpha_{su} R} e^{-\beta_{su} R \xi} \quad (7u)$$

Такое представление с одной стороны оправдано малостью параметра $x(2M)^{-1} \sim 0,01$, и, следовательно, приближенным сохранением (g, u) -симметрии. С другой стороны, оно обеспечивает получение правильного предела диссоциации при развале мезомолекулы $dt\mu$ на мезоатом $t\mu$

и ядро d . Отметим, что правильное начало отсчета $E_{t\mu}$ было заложено в гамильтониан (I) и, как показано в работе ^{/12/}, асимптотически воспроизводится в уравнениях (3) и (4).

С целью улучшения сходимости разложений (5)-(7) было выполнено прореживание последовательности опорных функций. Последнее возможно ввиду того, что приведенные в (5)-(7) последовательности не являются минимальными согласно определению работы ^{/18/}. С помощью численного эксперимента были выбраны некоторые подпоследовательности опорных функций в (5)-(7), которые наиболее удачно аппроксимируют искомое решение. В представленных расчетах использовались следующие подпоследовательности опорных функций:

При $J=1, \alpha \neq 0$:

$$j=1,2,3,\dots; i=j+S_i, S_i=1,2,3,5,7,9,\dots; k=1,2,3,4,5,6,9,10,13,14,\dots \quad (5'б)$$

$$j=1,2,3,\dots; i=j+S_i+1, S_i=1,2,4,6,\dots; k=1,2,3,4,7,8,11,12,\dots \quad (5'п)$$

При $J=1, \alpha=0$:

$$j=1,2,3,4,6,8,10,\dots; i=j+S_i, S_i=1,2,3,5,7,9,11,\dots; k=1,2,3,5,7,9,\dots \quad (6'б)$$

$$j=1,2,3,5,7,\dots; i=j+S_i+1, S_i=1,2,4,6,8,\dots; k=1,2,4,8,\dots \quad (6'п)$$

Соответствующие варианты представлены в таблицах I,2, где индексы N_R, N_ξ и N_η означают, соответственно, количество опорных функций по координатам R, ξ и η , выбранных согласно (5') и (6').

3. Методы расчета

В рассматриваемой вычислительной схеме реализуется известный минимальный принцип ^{/18/}, согласно которому в n -мерном пространстве, описываемом конечным набором n -опорных функций $\{\psi_j\}$, $j=1,\dots,n$ приближенное значение уровня энергии с номером дается выражением:

$$E_V^{(n)} = \min_{X_V^{(n)}(\omega)} \max_{\Psi^{(n)}} \left\{ \frac{(\Psi^{(n)}, H \Psi^{(n)})}{(\Psi^{(n)}, \Psi^{(n)})} \right\} \quad (8)$$

Здесь $\Psi^{(n)}$ - произвольная линейная комбинация опорных функций, которые могут зависеть также от набора нелинейных параметров ω , а $X_V^{(n)}(\omega)$ - V -мерное подпространство на системе опорных

Таблица I. ВАРИАНТЫ РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ СВЯЗИ МЕЗОМОЛЕКУЛ С ОРБИТАЛЬНЫМ МОМЕНТОМ $J=0$

МЕЗОМОЛЕКУЛА	1 вариант			2 вариант			3 вариант			4 вариант*		
	N_R	N_ξ	N_η	N_R	N_ξ	N_η	N_R	N_ξ	N_η	N_R	N_ξ	N_η
pp $\mu, dd\mu$	6	4	4	7	4	6	8	5	6	10	6	7
tt μ ($v=0$)	6	3	4	6	4	5	7	4	6	8	5	8
	всего:168			всего:288			всего:408			всего:740		
dd $\mu, tt\mu$ ($v=1$)	6	3	4	6	5	4	7	5	5	6	3	6
	всего:180			всего:288			всего:420					
pd $\mu, pt\mu$ dt μ ($v=0$)	6	3	7	7	4	9	7	5	II	6	3	7
	всего:252			всего:468			всего:693					
dt μ ($v=1$)	6	3	7	6	4	7	7	4	9	7	5	IO
	всего:288			всего:448			всего:637			всего:910		

*) только для pp μ основного и dt μ возбужденного состояния.

функций. Как известно ^{/19/}, при фиксированном наборе нелинейных параметров ω имеет место оценка $E_V \leq E_V^{(n)}(\omega)$, и дополнительная минимизация $E_V^{(n)}(\omega)$ по набору ω сохраняет эту оценку.

Рассматриваемая вычислительная схема реализуется следующим образом. Сначала при некотором заданном наборе ω вычисляется значение $E_V^{(n)}(\omega)$ в соответствии с выражением (8). Нахождение коэффициентов в разложениях (5)-(7), реализующих условие (8), сводится к решению алгебраической задачи на собственные значения

$$A(\omega)X = E_V^{(n)}(\omega) B(\omega)X, \quad (9)$$

где

$$A(\omega) = \{a_{ij}\} = \{(\varphi_i(\omega), H \varphi_j(\omega))\},$$

$$B(\omega) = \{b_{ij}\} = \{(\varphi_i(\omega), \varphi_j(\omega))\}.$$

При этом опорные функции нормированы на единицу.

Таблица 2. ВАРИАНТЫ РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ СВЯЗИ МЕЗОМОЛЕКУЛ С ОРБИТАЛЬНЫМ МОМЕНТОМ $J = 1$.

МЕЗОМОЛЕКУЛА	1 вариант		2 вариант		3 вариант		4 вариант		5 вариант*	
	ψ	π								
	$N_a N_b N_c$									
pp μ , dd μ tt μ ($\nu=0$)	6 4 4	4 2 2	7 4 6	4 2 3	7 5 6	4 3 3	-	-	-	-
	6 3 4	4 2 2	6 4 4	4 2 2	7 4 6	4 2 3	-	-	-	-
	всего: 200	всего: 304	всего: 438							
dd μ , tt μ ($\nu=1$)	6 3 4	3 2 2	6 4 4	4 2 2	7 4 5	4 2 2	7 5 5	4 3 3	7 6 6	5 3 3
	6 3 6	3 2 3	7 4 6	4 2 3	7 5 7	4 3 4	7 6 8	5 3 4	8 6 9	6 3 5
	всего: 210	всего: 304	всего: 449							
pd μ , pt μ dt μ , ($\nu=0$)	6 3 7	3 2 4	7 4 9	4 2 6	7 5 10	4 3 7	-	-	-	-
	6 3 7	3 2 4	6 4 7	4 2 4	6 4 9	4 2 6	-	-	-	-
	всего: 300	всего: 500	всего: 698							
dt μ ($\nu=1$)	6 3 4	3 2 4	6 4 4	4 2 4	7 4 5	4 3 4	7 5 5	4 3 5	-	-
	6 3 5	3 2 4	7 4 6	4 2 6	7 5 7	5 3 7	8 6 7	5 3 7	-	-
	5 3 3		5 4 4		6 4 4		6 4 4		-	-
	5 3 5		6 4 6	6 5 7		6 5 7			-	-
	всего: 330	всего: 568	всего: 844	всего: 982						

* ТОЛЬКО ДЛЯ dd μ ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ ($J=1, \nu=1$).

Таблица 3. НЕЛИНЕЙНЫЕ ПАРАМЕТРЫ, ИСПОЛЬЗОВАВШИЕСЯ ПРИ РАСЧЕТАХ

J	ν		d_1	β_1	γ_1	ν_1	d_2	β_2	γ_2	ν_2
0	pp μ		5.8	1.65	-	-	2.2.	1.3	-	-
0	dd μ		6.8	1.6	-	-	2.9	1.2	-	-
0	tt μ		7.25	1.6	-	-	3.9	1.2	-	-
1	dd μ		3.0	1.45	-	-	0.8	1.2	-	-
0 1	tt μ		5.8	1.45	-	-	1.9	1.2	-	-
0	pd μ		5.7	1.65	-	-	2.2	1.3	-	-
0	pt μ		5.6	1.65	-	-	2.2	1.3	-	-
0	dt μ		5.4	1.65	-	-	2.8	1.3	-	-
1	dt μ		3.1	1.45	-	-	1.0	1.2	-	-
0	pp μ		3.2	1.45	3.2	1.4	1.3	1.1	1.3	1.1
0	dd μ		4.0	1.45	3.6	1.4	1.6	1.1	1.5	1.1
0	tt μ		4.8	1.45	4.4	1.4	3.8	1.1	3.4	1.1
1	dd μ		3.5	1.375	3.5	1.4	0.001	1.0	0.01	1.1
1 1	tt μ		4.6	1.375	3.9	1.4	1.4	1.15	1.4	1.1
0	pd μ		3.6	1.45	3.7	1.4	1.4	1.1	1.5	1.1
0	pt μ		3.7	1.45	3.7	1.4	1.4	1.1	1.4	1.1
0	dt μ		4.3	1.45	4.1	1.4	2.2	1.1	2.1	1.1
	четн.		4.6	1.35			0.01	1.15		
1	dt μ				4.0	1.4			0.1	1.2
	нечетн.		2.4	0.85			0.001	0.85		

Примечание: ($J=1, \nu=1$) состояние имеет четную и нечетную составляющие для ψ - функции.

Были использованы два метода решения задачи (9). Первый метод заключается в сведении задачи (9) к стандартному виду ^{120/}. При этом использовалась следующая регуляризирующая процедура. Если при каком-либо наборе d_{ij} выполняется $\| \Phi_i - \sum_{j < i} d_{ij} \Phi_j \| < \epsilon$, где ϵ - параметр регуляризации, то столбцы и строки, содержащие эти элементы матриц A и B, вычеркивались, и решалась задача (9) меньшей размерности. Данная процедура была встроена в алгоритм разложения матрицы B по схеме Холецкого, что позволило получить устойчивый алгоритм не хуже по эффективности, чем стандартная процедура работы ^{120/}.

Второй метод включал регуляризацию матрицы B :

$$\tilde{B} = B + \epsilon E,$$

где E - единичная матрица, а ϵ - параметр регуляризации. Решение задачи (9) с регуляризованной матрицей B осуществлялось методом обратной итерации /19/. Начальные приближения к собственным значениям брались из работы /1/, сходимость приближений с требуемым числом знаков достигалась за 3-4 итерации. Для решения системы алгебраических уравнений на каждой итерации использовался эффективный алгоритм Банча. Была применена симметричная форма хранения матриц, что позволило работать с заполненными матрицами размерности 1000 в оперативной памяти ЭВМ.

Оценка вычислительной погрешности метода обратной итерации при решении регуляризованной задачи (9) (с размерностью матриц до 500) контролировалась сравнением с гарантированными по точности результатами решения задачи (9), полученными стандартным методом приведения. Эта погрешность составила менее 10^{-5} эВ при значении параметра регуляризации 10^{-12} . На больших размерностях ($n > 500$) оценка погрешности в задаче (9) производилась путем сравнения расчетов по методу обратной итерации с различными значениями параметра регуляризации ($\epsilon = 10^{-11}$ и $\epsilon = 10^{-12}$). При этом ошибка составила менее 10^{-4} эВ.

Вычисления выполнялись при нескольких наборах нелинейных параметров. В результате были найдены оптимальные значения этих параметров и минимальные значения $E_V^{(n)}(\omega)$. Оптимальные значения нелинейных параметров для мезомолекул с $J = 0$ и $J = 1$ приведены в таблице 3.

4. Результаты

В таблицах 4 и 5 приведены результаты расчетов энергии связи $-E_{JV}$ мезомолекул изотопов водорода для основных ($V = 0$) и возбужденных ($V = 1$) вибрационных состояний с орбитальными моментами $J = 0$ и $J = 1$, соответственно. Там же приведены лучшие результаты адиабатических /1,6/ и вариационных /7-10/ расчетов. В круглых скобках под каждым значением $-E_{JV}^{(n)}$ указано количество n опорных функций, использованных при его вычислении.

Результаты, относящиеся к данной работе, были получены на последовательности до пяти увеличивающихся наборов опорных функций с $n = n_1 < n_2 < \dots < n_5, 3 \leq 5$, что позволило проследить их сходимость. Информация о наборах опорных функций (5), (6) для каждого состояния (JV) мезомолекулы содержится в таблицах 1 и 2.

Остановимся на вопросах экстраполяции значений энергии $E_{JV}^{(n)}$ при $n \rightarrow \infty$. В данной работе использовалась принятая в вариационных расчетах экстраполяционная формула

$$E_{JV} = E_{JV}^{(n)} + C n^{-\alpha} \quad (10)$$

Уточненное значение энергии E_{JV} , а также параметры C и α могут быть найдены с помощью трех подходящим образом выбранных расчетов из имеющейся последовательности с $n = n_1, \dots, n_5$, как это делается, например, в работах /7,10/. Эту же задачу можно решить с помощью обработки всей последовательности расчетов с $n = n_1, \dots, n_5$ по методу наименьших квадратов. В данной работе использовались оба указанных подхода, которые дали согласованные между собой значения

E_{JV} . Анализ приведенных в таблицах 4,5 результатов и выполненные исследования по экстраполяционной формуле (10) показали, что уточненные значения E_{JV} содержат ошибку не более 0,001 эВ. Исключение составляет слабосвязанное состояние ($J = 1, V = 1$) мезомолекулы $d\mu$, для которого уточненное значение энергии определено с ошибкой 0,002 эВ.

Все расчеты были выполнены на ЭВМ ЕС-1061 в арифметике с двойной точностью. Наиболее трудоемкий расчет ($n = 982$) занял 1 час 30 мин процессорного времени. На вычисление одного варианта с меньшей размерностью $n = 200$ было затрачено менее 2 мин.

5. Обсуждение результатов

Интерес к вариационным расчетам мезомолекул, которые практически прекратились после 1976 г., был возрожден работами /21/. В них для мезомолекул с $J = 0$ были построены три типа вариационных функций в периметрических координатах с нетрадиционными опорными элементами: полиномами Лагера, дробными степенями и экспонентами. Разложение по экспонентам было распространено на случай $J \neq 0$ в работах /8,10/. Ориентация этих работ на вычисления с высокой точностью привела к использованию большого количества опорных функций. Известно, однако, что увеличение числа неортогональных базисных функций ведет к плохой обусловленности соответствующих алгебраических систем и не дает без регуляризирующих процедур /22/ улучшения точности результата. В наших расчетах необходимая регуляризация была выполнена, что гарантирует близость найденных решений к точным.

Отметим далее, что при большом числе базисных функций результаты разных вариационных расчетов слабо чувствительны к их виду.

Это видно из сравнения результатов разных расчетов, представленных в таблицах 4 и 5, которые были получены на разных системах опорных функций. Принятым критерием лучшего качества вариационного расчета является достижение более глубокого значения минимума вариационного функционала. Сравнение по этому критерию показывает, что опорные функции в различных координатах все-таки с разной точ-

Таблица 4. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ - ϵ_{Jv} (эВ) МЕЗОМОЛЕКУЛ ВОДОРОДА С ОРБИТАЛЬНЫМ МОМЕНТОМ $J = 0$.

	$pp\mu$ $v=0$	$dd\mu$ $v=0$	$tt\mu$ $v=0$	$dd\kappa$ $v=1$	$tt\mu$ $v=1$	$pd\mu$ $v=0$	$pt\mu$ $v=0$	$dt\mu$ $v=0$	$dt\mu$ $v=1$
работа/1/	252.95 (264)	325.05 (264)	362.95 (264)	35.80 (264)	83.87 (264)	221.52 (264)	213.97 (264)	319.15 (264)	34.87 (264)
работа/7/	253.152 (125)	325.070 (203)	362.900 (203)	35.815 (161)	83.630 (161)	221.541 (440)	213.829 (440)	319.117* (380)	34.776* (380)
экстр.	253.153	325.083	362.945	35.846	83.67	221.561	213.857
работа/8/	253.15240 (140)	325.07213 (140)	362.90040 (140)	35.83658 (140)	83.72202 (140)	221.54923 (250)	213.83975 (250)	319.13805 (250)	34.82381 (250)
экстр.	253.153	325.074	362.904	35.9	83.78	221.551	213.841	319.140	34.84
данная работа	253.15071 (168)	325.07320 (168)	362.90998 (168)	35.83997 (180)	83.76754 (180)	221.54583 (252)	213.83604 (252)	319.13931 (252)	34.82754 (288)
	253.15175 (286)	325.07381 (286)	362.91022 (286)	35.84293 (286)	83.77080 (286)	221.54918 (468)	213.83994 (468)	319.13999 (468)	34.83140 (448)
	253.15255 (408)	325.07392 (408)	362.91027 (408)	35.84349 (420)	83.77097 (420)	221.54951 (693)	213.84024 (693)	319.14003 (693)	34.83343 (637)
	253.15261 (740)								34.83380 (910)
экстра- полюция	253.1527	325.0740	362.9103	35.8438	83.7711	221.5497	213.8404	319.1401	34.8342

*) Результаты работы/9/.

Таблица 5. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ - ϵ_{Jv} (эВ) МЕЗОМОЛЕКУЛ ВОДОРОДА С ОРБИТАЛЬНЫМ МОМЕНТОМ $J = 1$.

	$pp\mu$ $v=0$	$dd\mu$ $v=0$	$tt\mu$ $v=0$	$dd\mu$ $v=1$	$tt\mu$ $v=1$	$pd\mu$ $v=0$	$pt\mu$ $v=0$	$dt\mu$ $v=0$	$dt\mu$ $v=1$
работа/1/	106.96 (264)	226.61 (264)	289.15 (264)	1.956*** (844)	45.24 (264)	97.40 (264)	99.01 (264)	232.44 (264)	0.656*** (844)
работа/7/	107.266 (286)	226.662 (286)	289.12 (286)	1.862 (364)	45.096 (286)	97.493 (440)	99.119 (440)	232.436* (300)	0.628* (500)
экстр.	107.266	226.680	289.12	1.87	45.187	97.493	99.119
работа/8/	107.26563 (250)	226.68157 (250)	289.13931 (250)	1.97110*** (350)	45.19359 (250)	97.42990 (250)	99.10104 (250)	232.42049 (250)	0.60719*** (400)
экстр.	107.267	226.683	289.146	1.972±0.001	45.22	97.66	99.13	232.48	0.6554±0.0150
данная работа	107.26364 (200)	226.68106 (200)	289.14142 (200)	1.96015 (210)	45.20093 (210)	97.49232 (300)	99.12044 (300)	232.47020 (300)	0.60304 (330)
	107.26533 (304)	226.68160 (304)	289.14191 (304)	1.96933 (304)	45.20451 (304)	97.49624 (500)	99.12471 (500)	232.47142 (500)	0.64772 (568)
	107.26568 (438)	226.68164 (438)	289.14195 (438)	1.97274 (449)	45.20524 (449)	97.49774 (698)	99.12608 (698)	232.47155 (698)	0.65228 (844)
				1.97368 (607)	45.20552 (607)				0.65371 (982)
				1.97431 (819)					
экстра- полюция	107.2659	226.6817	289.1420	1.9750	45.2058	97.4990	99.1271	232.4717	0.657±0.002

*) Результаты работы/9/. **) Результаты работы/6/. ***) Результаты работы /106/.

ностью описывают волновые функции системы трех частиц в зависимости от соотношения их масс. В мезомолекулах $d d \mu$ и $d t \mu$, слабо связанные состояния которых представляют наибольший интерес, приведенная масса ядер велика, и выбранные в настоящей работе опорные функции в сферических координатах являются более оптимальными.

Отметим, что для мезомолекулы $d t \mu$ ($J = 1$, $v = 1$) найденное значение $-\epsilon_{Jv}$ хорошо согласуется с результатом, полученным в адиабатическом подходе ^{16/}.

В заключение авторы благодарят Н.Н.Говоруна, М.Г.Мещерякова и Г.Н.Флерова за поддержку, Л.И.Пономарева за инициирование работы и полезные обсуждения, Г.А.Коробову и Т.П.Пузынину за помощь в работе.

Литература

1. Виницкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Трускова Н.Ф. ЖЭТФ, 1980, 79, с.698.
2. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, 13, с.556.
3. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1978, 74, с.849.
4. Богданова Л.Н., Маркушин В.Е. Мележик В.С. ЖЭТФ, 1981, 81, с.829.
5. Jones S.E., Anderson A.N., Caffrey A.J., Walter J.B., Watts K.D., Bradbury J.N., Gram P.A., Leon M., Maltrud H.R., Paciotti M.A. Phys.Rev.Lett., 1983, 51, p.1757.
6. Gocheva A.D., Gusev B.B., Melezhik V.S., Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Somov L.N., Vinitsky S.I. Phys.Lett. B, 1985, 153, p.349.
7. Bhattia A.K., Drachman R.J. Phys.Rev., 1984, 30, p.2138.
8. Фролов А.М., Эфрос В.Г. Письма в ЖЭТФ, 1984, 39, с.449.
9. Ни С.У. Phys.Rev., 1985, 32, p.1245.
10. Фролов А.М., Эфрос В.Д. а) ЖФ, 1985, 41, с.828. б) J.Phys. B., 1985, 18, p. L265.
11. Kaschiev M., Vinitsky S.I. Preprint JINR, E4-85-467, Dubna, 1985.
12. Whitten R.C., Sims J.S. Phys.Rev., 1974, A9, p.1588.
13. Halpern A. Phys.Rev.Lett., 1964, 13, p.660.
14. Гусев В.В., Касчиев М.С. Препринт ОИЯИ, ПИ-85-758, Дубна, 1985.
15. Зельдович Я.Б., Герштейн С.С. УФН, 1960, 71, 561.
16. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЖФ, 1974, 20, с.576.
17. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа. М.-Л. Физматгиз, 1962.

18. Михлин С.Г. Численная реализация вариационных методов, М., "Наука", 1966.
19. Парлет Б. Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. М., "Мир", 1983.
20. Уилкинсон Дж., Райнш Г. Справочник алгоритмов на языке Алгол. Линейная алгебра, М., Машиностроение, 1976.
21. Демков Ю.Н., Филинский А.В. Тезисы Всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров. Минск, 27-29 сентября 1983, Изд. АН БССР, Минск, 1983, с.22; Тезисы конференции по квантовой химии, Днепрпетровск, 20-22 сент. 1983, Изд. Днепрпетровского госуд.ун-та, Днепрпетровск, 1983, с.12.
22. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М., "Наука", 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 декабря 1985 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
D2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30
D1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50
D17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75
D10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983	3 р. 50
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/	13 р. 50
D4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Виницкий С.И., Коробов В.И., Пузынин И.В. P4-85-917
Вариационный расчет уровней энергии μ -мезомолекул изотопов водорода

Выполнены вариационные расчеты уровней энергии ϵ_{Jv} 18 вращательно-колебательных состояний / Jv мезомолекул изотопов водорода с орбитальными моментами $J=0$ и $J=1$. В расчетах использовано до 1000 опорных функций, что позволило достигнуть точности вычислений энергии связи 0,001 эВ. Для слабосвязанных состояний / $J=1, v=1$ мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$, представляющих наибольший интерес для мюонного катализа, получены следующие значения $\epsilon_{11}(dd\mu) = 1,975 \pm 0,001$ эВ и $\epsilon_{11}(dt\mu) = 0,657 \pm 0,002$ эВ.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С.Виноградовой

Vinitsky S.I., Korobov V.I., Puzynin I.V. P4-85-917
Variational calculation of energy levels of mesic molecules of hydrogen isotopes

Variational calculations of energy levels ϵ_{Jv} of 18 rotational-vibrational states (Jv) of mesic molecules of hydrogen isotopes with the total angular - momenta $J=0$ and $J=1$ are performed. The set 1000 basis functions has been used, which has permitted us to calculate the binding energy with an accuracy 0.001 eV. For weakly bound states ($J=1, v=1$) of the $dd\mu$ and $dt\mu$ mesic molecules the values $\epsilon_{11}(dd\mu) = 1.975 \pm 0.001$ eV and $\epsilon_{11}(dt\mu) = 0.657 \pm 0.002$ eV are obtained.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985