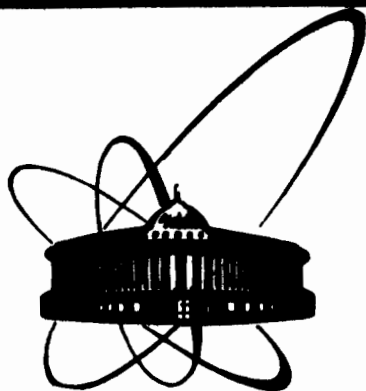


87-225



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р4-87-225

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

ВАРИАЦИОННЫЙ РАСЧЕТ
СЛАБОСВЯЗАННЫХ
ВРАЩАТЕЛЬНО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ
МЕЗОМОЛЕКУЛ $dd\mu$ И $dt\mu$

Направлено в журнал "Physics Letters B"

1987

1. Явление резонансного образования мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в реакциях $d\mu + D_2 \rightarrow [(dd\mu)dee]^*$ и $t\mu + D_2 \rightarrow [(dt\mu)dee]^*$ и т.д. интенсивно изучается как теоретически^{/1/}, так и экспериментально^{/2/}. Критическим пунктом в вычислениях скоростей этих реакций является знание нерелятивистских энергий ϵ_{Jv} слабосвязанных состояний $dd\mu$ и $dt\mu$ с полным угловым моментом $J = 1$ и вибрационным числом $v = 1$. Энергия связи слабосвязанных состояний приблизительно равна 1 эВ при глубине эффективных потенциалов ~ 600 эВ. Требуемая точность составляет 0,001 эВ, т.е. относительная точность составляет 10^{-6} . До недавнего времени вычисления слабосвязанных состояний были выполнены лишь в адиабатическом представлении задачи трех тел^{/3/}. Эти расчеты стимулировали развитие вариационных методов для этой проблемы^{/4/}. В данной статье мы развиваем наш вариационный подход^{/5/} для исследования слабосвязанных состояний с использованием вариационных функций молекулярного типа в сфероидальной системе координат^{/6/}. Мы вводим две группы вариационных параметров, позволяющих лучше аппроксимировать делокализацию волновой функции по сравнению с работой^{/6/}. Мы также используем улучшенное распределение степеней независимых переменных в вариационных функциях по сравнению с работой^{/5/}. Это позволило нам достичь высокой точности в наших оценках и получить следующие экстраполированные значения для уровней энергии $-\epsilon_{11}(dd\mu) = (1,9750 \pm 0,0002)$ эВ, $-\epsilon_{11}(dt\mu) = (0,6604 \pm 0,0002)$ эВ. В работе приводятся также вычисленные значения γ -факторов с использованием вариационных функций.

2. Мы исходим из нерелятивистского уравнения Шредингера для системы трех частиц, состоящей из двух ядер с массами $M_a \geq M_b$ и с положительными единичными зарядами и отрицательного мюона с массой m_μ . Гамильтониан этой системы в сфероидальных координатах $\Omega = \{\xi, \eta, R\}$ имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} \\ H_{10} & H_{11} \end{pmatrix}, \quad /1/$$

где

$$H_{kk} = -\frac{1}{2M} \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{MR^2} \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} [(\xi - \kappa\eta)(\xi^2 - 1) \left(\frac{\partial}{\partial \xi} + R \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial R} \right) +$$

$$\begin{aligned}
& + (\eta - \kappa \xi)(1 - \eta^2) \left(\frac{\partial}{\partial \eta} + R \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial R} \right) + \frac{1 - k}{MR^2} + \\
& + \frac{2k}{R^2} \frac{\{ (1 + (4M)^{-1} [\xi^2 + \eta^2 - 2 - 2\kappa(\xi\eta + 1)]) \}}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} - \\
& - \frac{1}{2} \{ 1 + (4M)^{-1} [\xi^2 + \eta^2 - 2 - 2\kappa(\xi\eta + 1)] \} \frac{4}{R^2} \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \times \\
& \times \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] - \frac{4\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)} + \frac{1}{R}, \quad k = 0, 1 \\
H_{10} & = \frac{1}{MR^2} \frac{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}{\xi^2 - \eta^2} \left[(\eta - \kappa \xi) \frac{\partial}{\partial \xi} - (\xi - \kappa \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} \right], \\
H_{01} & = -H_{10} - \frac{1}{MR^2} \frac{\xi\eta - \kappa}{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}.
\end{aligned}$$

Здесь $M = M_0 / m_a$, $M_0 = M_a M_b / (M_a + M_b)$, $m_a = m_\mu M_a / (M_a + m_\mu)$, $\kappa = (M_b - M_a) / (M_b + M_a)$ и используется система единиц $e = h = m_a = 1$. Сферои-
дальные координаты ξ и η определены соотношениями $\xi = (r_a + r_b) / R$,
 $\eta = (r_a - r_b) / R$, где R - расстояние между ядрами, r_a и r_b - рассто-
яния между ядрами a и b и мноном соответственно. Вариационная
функция молекулярного типа имеет две компоненты σ и π , кото-
рые выбираются в виде $F_0 = F_\sigma = F_{\sigma g} + F_{\sigma u}$ и $F_1 = F_\pi = F_{\pi g} + F_{\pi u}$:

$$\begin{aligned}
F_{\sigma p} & = \sum_{t=1}^2 \sum_{i,j,k(p)} a_{ijk(p)}^{(\sigma tp)} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{k(p)-1} e^{-\alpha^{(tp)} + \beta^{(tp)} \xi} R \\
i, j & = 1, 2, \dots; \quad i > j, \quad k(g) = 2\ell - 1, \quad k(u) = 2\ell, \quad \ell = 1, 2, \dots \\
F_{\pi p} & = \sum_{t=1}^2 \sum_{i,j,k(p)} a_{ijk(p)}^{(\pi tp)} \frac{1}{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{k(p)-1} \times \\
& \times e^{-\gamma^{(tp)} + \nu^{(tp)} \xi} R \\
i, j & = 1, 2, \dots; \quad i > j + 1, \quad k(g) = 2\ell, \quad k(u) = 2\ell - 1, \quad \ell = 1, 2, \dots
\end{aligned}$$

Значения нелинейных параметров даны в табл. 1.

Таблица 1

Значения нелинейных параметров вариационной функции /2/.
/Использовались следующие системы единиц - для dd_μ : $e = h =$
 $= m_\mu = 1$, для dt_μ : $e = h = m_\mu = 1$ /

	ρ	α_1	β_1	α_2	β_2	γ_1	ν_1	γ_2	ν_2
dt_μ g	1,7979	0,7063	0,0005	0,5137	1,7979	0,7192	0,0051	0,5651	
dt_μ g	2,3339	0,6976	0,0005	0,5200	2,0295	0,7103	0,0051	0,6088	
u	1,2177	0,4313	0,0005	0,4313	1,8365	0,6596	0,0507	0,5074	

3. Наша задача состоит в сведении уравнения Шредингера с
гамильтонианом /1/ к алгебраической задаче на собственные зна-
чения

$$Ax = \lambda Bx, \quad x = \{x_1, \dots, x_n\} = \{a_{ijk(p)}^{(\sigma tp)}, a_{ijk(p)}^{(\pi tp)}\}, \quad /3/$$

и решении ее методом обратных итераций с регуляризацией. Мы вы-
полнили аналитическое интегрирование для нахождения матричных
элементов в задаче /3/, используя вариационные функции /2/. За-
метим, что полученная задача на собственные значения плохо обус-
ловлена. Для ее регуляризации мы используем следующее уравнение:

$$Ax = \lambda(B + \delta I)x, \quad /4/$$

где δ - малый параметр. Значение δ варьировалось в диапазоне
 10^{-13} - 10^{-11} . Это позволило нам выполнить вычисления с точностью
 10^{-6} эВ.

Энергия ϵ_{11} каждой мезомолекулы $\epsilon_{11} = (\lambda + \frac{1}{2}) m_a 2R\mu$ была вычис-
лена на серии увеличивающихся наборов базисных функций. Резуль-
таты представлены в табл. 2 и 3. Здесь i - номер серии, p_1 -
число членов в вариационной функции. В вычислениях использовал-
лись следующие значения масс частиц и константы Ридберга:

$$M_t = 5496,918 m_e, \quad M_d = 3670,481 m_e,$$

$$M_\mu = 206,7686 m_e, \quad R\mu = 13,605804 \text{ эВ}.$$

В табл. 2 также представлены наши предыдущие вычисления /5/, вы-
полненные при $m_\mu = 206,769$. Сравнение этих вычислений с предс-
ставленными здесь показывает, что поправка на погрешность в мас-
се m_μ практически не зависит от p и составляет величину 10^{-4} эВ.
Это дало возможность нам не проводить трудоемкий расчет с $p =$
 $= 1286$, а ввести эту поправку в значение, вычисленное ранее.

Таблица 2.

Сходимость значений энергии связи $-\epsilon_{11}$ для мезомолекулы $dd\mu$ /эВ/

i	n_i	$-\epsilon_{11}(n_i)^5$	$m_\mu = 206,769 m_e$	$-\epsilon_{11}(n_i)$	$m_\mu = 206,768 m_e$
1	304	1,96933		1,96941	
2	449	1,97274		1,97284	
3	607	1,97368		1,97379	
4	819	1,97431		1,97442	
5	1286	1,97465		1,97475*	
∞		1,9749+0,0002		1,9750+0,0002	

*Значение было получено с помощью предыдущего расчета^{/5/} с учетом поправки на новую массу мюона.

Таблица 3

Сходимость значений энергии связи $-\epsilon_{11}$ для мезомолекулы $dt\mu$ /эВ/

i	n_i	$-\epsilon_{11}(n_i)$
1	542	0,65114
2	596	0,65223
3	927	0,65691
4	1483	0,65889
5	1513	0,65923
6	2084	0,65968
∞		0,6604+0,0002

Таким образом, наши вычисления уровней энергии мезомолекул для различных масс мюона показали, что погрешность представленных результатов сравнима с известной сегодня точностью масс частиц.

4. Уточненное значение ϵ_{11} для каждой мезомолекулы было найдено из условия минимизации функционала

$$\Phi(\epsilon_n, c, a) = \sum_{i=1}^m [\epsilon_{11}(n_i) - \epsilon_n - c n_i^{-a}]^2 / (\beta n_i^{-2}),$$

где m - число серий, β - нормировочный множитель. Функционал соответствует экстраполяционной формуле

$$\epsilon_{11} = \epsilon_{11}(n) - c n^{-a}, \quad /4/$$

обычно применяемой в вариационных расчетах^{/4/}. Анализ результатов с помощью формулы /4/ показал, что $a \approx 2$. Экстраполированное значение ϵ_n и значения ошибок также приведены в таблицах. Сравнения с лучшими вычислениями других авторов представлены в табл.4. Видно, что наши расчеты имеют лучшее качество и более точны.

Таблица 4

Сравнение различных расчетов энергии связи $-\epsilon_{11}$ слабосвязанных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ /в эВ/

	Gocheva et al ^{/3/}	Bhatia, Drachman ^{/4/}	Frolov, Efros ^{/4/}	Наша работа ^{/5/}	Наст. статья
	1,956 (844)	1,862 (364)	1,97110 (350)	1,97465 (1286)	1,97475 (1286)
экстра- поляция	-	1,87	1,972+0,001	1,9749+0,0002	1,9750+ +0,0002
	Gocheva et al ^{/3/}	Chi-Yu Hu ^{/4/}	Frolov, Efros ^{/4/}	Наша работа ^{/5/}	Наст. статья
	0,656 (844)	0,628 (440)	0,60719 (400)	0,65889 (1495)	0,65968 (2084)
экстра- поляция	-	-	0,6554+0,0150	0,663+0,002	0,6604+ +0,0002

5. Вычисленные волновые функции были использованы для нахождения γ -факторов^{/8/} мезомолекулы $dd\mu$ ($m_a^{-1} = m_{d\mu}^{-1} = M_d^{-1} + m_\mu^{-1}$)

$$\gamma_{d\mu}^{11} = \frac{1}{2} \int R^2 dR [F_\sigma(dd\mu)(\xi\eta R) |_{\xi=1, \eta=\pm 1}]^2$$

и мезомолекулы $dt\mu$ ($m_a^{-1} = m_{t\mu}^{-1} = M_t^{-1} + m_\mu^{-1}$),

$$\gamma_{t\mu}^{11} = \frac{1}{2} \int R^2 dR [F_\sigma(dt\mu)(\xi\eta R) |_{\xi=1, \eta=-1}]^2,$$

$$\gamma_{d\mu}^{11} = \frac{1}{2} \int R^2 dR [F_\sigma(dt\mu)(\xi\eta R) |_{\xi=1, \eta=+1}]^2.$$

Они определяют отношение вероятностей нахождения мюона в окрестности ядра мезомолекулы и соответствующем мезоатоме. Получены следующие значения γ -факторов:

$$\gamma_{d\mu} = 0,4965 \quad \gamma_{t\mu} = 0,7974, \quad \gamma_{a\mu} = 0,1992,$$

и они хорошо согласуются с полученными в адиабатических расчетах ¹⁸:

$$\gamma_{d\mu} \approx 0,4965 \quad \gamma_{t\mu} = 0,7989, \quad \gamma_{a\mu} = 0,2051.$$

Эти значения могут быть использованы для расчетов сверхтонкой структуры слабосвязанных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ ¹⁹.

В заключение авторы выражают благодарность профессору Н.Н.Говоруну за поддержку и профессору Л.И.Пономареву за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ponomarev L.I., Fiorentini G. - Invited paper presented at the International Symposium on Muon Catalyzed Fusion. Tokyo, Japan, September 1-3; 1986; Prepr. IFUP-TH 27/86, Pisa, 1986.
2. Bystritsky V.M. et al. - Sov.Phys.JETP Lett., 1980, 31, p.228. Kammel P. et al. - Phys.Lett., 1982, 112B, 319; Phys.Rev., 1983, A28, p.261. Jones S.E. et al. - Phys.Rev.Lett., 1983, 51, p.1757. Balin D.V. et al. - Phys.Lett., 1984, 141B, p.173. Breunlich W.H. et al. - Invited paper presented at the International Symposium on Muon Catalyzed Fusion. Tokyo, Japan, September 1-3, 1986; Preprint LBL-22560, Berkeley, 1986.
3. Vinitzky S.I. et al. - Sov.Phys.JETP, 1980, 52, p.353. Gocheva A.D. et al. - Phys.Lett., 1985, 153B, p.349.
4. Bhatia A.K., Drachman R.J. - Phys.Rev., 1984, A30, p.2138. Chi-Yu Hu. - Phys.Rev., 1985, A32, p.1245. Frolov A.M., Efros V.D. - J.Phys., 1985, B18, p.1265.
5. Vinitzky S.I. et al. - In: JINR Rapid Commun. No.19-86, Dubna: JINR, 1986, p.40.
6. Halpern A. - Phys.Rev.Lett., 1986, 13, p.660.
7. Cohen E.R. - Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1976, 18, p.587. Wapstra A.H., Bos K. - Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1977, 19, p.175.
8. Bakalov D. - Preprint JINR 4-80-409, Dubna, 1980.
9. Bakalov D. et al. - Phys.Lett., 1985, 616B, p.5.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 апреля 1987 года.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

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

Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
Д11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
Д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
Д1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
Д17-Я4-Ясп	Труды VIII Международного симпозиума по проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75 к.
Д10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983	3 р. 50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/	13 р. 50 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75 к.
Д11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.
Д13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна 1985.	4 р. 80 к.
Д3,4,17-86-747	Труды V Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986.	4 р. 50 к.

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

Коробов В.И., Пузынин И.В., Виницкий С.И. P4-87-225
Вариационный расчет слабосвязанных вращательно-колебательных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$

Выполнены вариационные расчеты уровней энергии ϵ_{Jv} и γ -факторов слабосвязанных вращательно-вибрационных состояний ($J = 1, v = 1$) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$, которые представляют большой интерес для новейших экспериментов по мюонному катализу /коллорабация СИН - Беркли - Лос-Аламос - Мюнхен, 1986 г. и гатчинская группа, 1984 г./ . В вычислениях был использован набор до 2000 базисных функций, благодаря чему удалось получить наиболее точные результаты $\epsilon_{11}(dd\mu) = (-1,9750 \pm 0,0002)$ эВ, $\epsilon_{11}(dt\mu) = (-0,6604 \pm 0,0002)$ эВ.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Korobov V.I., Puzynin I.V., Vinitsky S.I. P4-87-225
Variational Calculation of Weakly Bound Rotational-Vibrational States of Mesic Molecules $dd\mu$ and $dt\mu$

Variational calculations of energy levels of ϵ_{Jv} and γ -factors of weakly bound rotational-vibrational states ($J = 1, v = 1$) of mesic molecules $dd\mu$ and $dt\mu$, which are of main interest for last muon-catalysed fusion experiments (SIN - Berkeley - Los-Alamos - Munchen group, 1986 and Gatchina group, 1984) are performed. The set of about 2000 basis functions has been used in calculations which has enabled us to obtain the most precise results: $\epsilon_{11}(dd\mu) = (-1.9750 \pm 0.0002)$ eV and $\epsilon_{11}(dt\mu) = (-0.6604 \pm 0.0002)$ eV.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987