

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P4-87-706

С.И.Виницкий, И.В.Пузынин

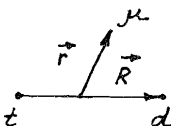
УРОВНИ ЭНЕРГИИ  $\mu$ -МЕЗОМОЛЕКУЛ

Направлено в журнал "J.Muon Catalysed Fusion"

1987

С начала семидесятых годов в ОИЯИ ведутся теоретические исследования и расчеты по квантовомеханической задаче трех тел с кулоновским взаимодействием и ее приложению к проблеме мюонного катализа. Эти работы во многом определили возродившийся в мире интерес к проблеме мезокатализа и его практическим применениям. За прошедшие годы была разработана схема адиабатического представления задачи трех тел. С другой стороны, был создан эффективный численный метод решения многопараметрических спектральных задач с широким кругом применимости в теоретических исследованиях, выходящих за рамки расчета мезомолекулярных систем.

В основе схемы адиабатического представления лежит разложение волновой функции  $\Psi(\vec{r}, \vec{R})$  уравнения Шредингера системы трех кулоновских частиц по полному набору решений задачи двух центров <sup>/1/</sup>



$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_j \Phi_j(\vec{r}; \vec{R}) R^{-1} \chi_j(R). \quad (I)$$

В результате применения метода Л.В.Канторовича <sup>/2/</sup> для редукции многомерного уравнения получена бесконечная система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\left\{ \frac{d^2}{dR^2} + k_i^2 - U_{ii}(R) \right\} \chi_i(R) = \sum_{j \neq i} U_{ij}(R) \chi_j(R) \quad (2)$$

В конкретных расчетах естественно рассматривается  $\mathcal{N}$ -канальное приближение, что соответствует учету  $\mathcal{N}$  первых членов в разложении (I). Потенциалы  $U_{ij}(R)$  системы (2) представляют собой матричные элементы трехчастичного гамильтониана, связывающие различные состояния задачи двух центров. Для их вычисления в достаточно широком

диапазоне изменения  $i, j$  и  $R$  разработан комплекс эффективных методов и программ /3/, позволивший создать в ОИЯИ обширный банк данных для расчета трехчастичных систем.

Для реализации расчетов по адиабатической схеме необходимо было разработать достаточно точную дискретную аппроксимацию  $\mathcal{N}$ -канального приближения и создать эффективный метод решения, хорошо приспособленный также для проведения серии расчетов при увеличивающихся значениях  $\mathcal{N}$ . Последнее обстоятельство необходимо для численного исследования сходимости адиабатического разложения (I). При построении дискретной аппроксимации  $\mathcal{N}$ -канального приближения была выполнена дискретизация интеграла по непрерывному спектру на сетке

$$\omega_{\Delta k} = \{k_{\min}, k_{\max}, \Delta k\}; \quad k_{\min} = 0.1, \Delta k = \{0.1; 0.5\}, k_{\max} = 10$$

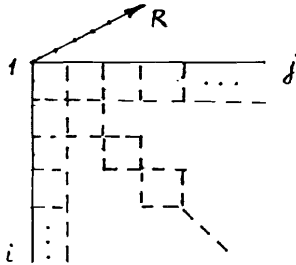
с точностью  $O(\Delta k^2) = O(\Delta k^4)$ . Для аппроксимации дифференциального оператора в (2) использовалась разностная схема на сетке

$$\omega_{\Delta R} = \{0, R_{\max}, \Delta R\}; \quad \Delta R = \{0.1; 1\}, R_{\max} \approx 100$$

точности  $O(\Delta R^4)$ . Аппроксимация условий регулярности и ограниченности волновых функций выполнена путем построения нелинейных граничных условий

$$\left[ f_i(k_i) \frac{d}{dR} + g_i(k_i) \right] \chi_i(R) \Big|_{R=0, R_{\max}} = 0 \quad (3)$$

с помощью асимптотик, полученных в работах /1/. Дискретизация  $\mathcal{N}$ -канального приближения соответствовала структуре банка исходных данных  $\{U_{ij}(R)\}$ :



Была разработана оригинальная постановка задачи рассеяния как задачи на собственные значения, благодаря чему спектральная задача (2)-(3) стала единообразно описывать задачи на связанные состояния и задачи рассеяния, в том числе с учетом закрытых каналов. Таким образом, все эти задачи решаются в рамках единого численного метода /4/.

Метод решения задачи (2)-(3) основан на обобщении непрерывного ньютоновского процесса. Суть непрерывного аналога метода Ньютона /5/ заключается в замене нелинейной стационарной задачи

$$\varphi(z) = 0, \quad (4)$$

где  $\varphi$  - нелинейная функция, определенная в гильбертовом пространстве эволюционным процессом

$$\varphi'(z(t)) \frac{dz}{dt} = -\varphi(z(t)) \quad (5)$$

$$z(0) = z_0. \quad (6)$$

Здесь  $t$  ( $0 \leq t < \infty$ ) - непрерывный параметр,  $\varphi'$  - производная Фреше,  $z_0$  - элемент в окрестности искомого решения  $z^*$  уравнения (4). Процесс (5)-(6) имеет интеграл

$$\varphi(z(t)) = e^{-t} \varphi(z_0). \quad (7)$$

В результате мы имеем сходимость непрерывной траектории  $z(t)$  при  $t \rightarrow \infty$  к решению  $z^*$  при дополнительном условии непрерывности  $\varphi$  и  $\varphi'$  и ограниченности оператора  $\varphi'^{-1}$  в окрестности  $z^*$ . Дискретная аппроксимация по параметру  $t$  задачи (5)-(6) на основе метода Эйлера сводит ее к решению последовательности линейных задач

$$\varphi'(z_k) v_k = -\varphi(z_k) \quad (8)$$

$$z_{k+1} = z_k + \tau_k v_k,$$

причем специальным выбором параметра  $\tau_k$  можно оптимизировать скорость и устойчивость сходимости  $z_k \rightarrow z^*$ .

Широкий класс спектральных задач, в том числе и задачу (2)-(3), можно представить в форме (4), где  $z = \{\lambda, X\}$  - пара: собственное значение - собственный элемент, а  $\varphi$  - двухкомпонентная функция

$$\varphi(\lambda, X) = \begin{pmatrix} HX - \lambda X \\ F(\lambda, X) \end{pmatrix} \quad (9)$$

Здесь  $H$  - оператор в гильбертовом пространстве, соответствующий операторам уравнения (2) и граничным условиям (3), а  $F$  - дополнительный функционал, представляющий условие нормировки, например:

- а)  $(X, X) - 1$  для связанных состояний, (10)  
 б)  $(X, (H - \lambda I)X)$  для задачи рассеяния.

Поэтому для решения спектральных задач полностью применима итерационная схема (8). Двухкомпонентная структура функции  $\Psi$  и возможность изменения вида функционала  $F$  в итерациях позволяют получить широкий набор итерационных процессов с регулируемыми свойствами, в том числе и известные - метод обратных итераций, обратные итерации с ралеевским сдвигом и другие /6/.

Дальнейшее обобщение развиваемого метода было дано в работах /7/. Оно позволило:

а) в определенной степени решить проблему задания начального условия (6):  $Z(0) = Z_0$ ;

б) сформулировать новый подход к решению задачи рассеяния как многопараметрической спектральной задаче;

в) повысить точность дискретной аппроксимации без существенного усложнения вычислительных схем. Суть обобщения заключалась в параметризации операторов, входящих в определение  $\Psi(Z)$  с помощью функции управления, зависящей от параметра  $t$  и удовлетворяющей некоторым граничным условиям. Для нахождения оптимального вида функции управления в ходе итерационного процесса (8) в работе /7/ в 1977 г. было предложено добавлять к  $\Psi(Z)$  асимптотическое условие типа (10б), согласованное с указанными граничными условиями.

Простейшая параметризация  $\Psi(Z)$  основана на представлении оператора  $H$  в форме:

$$H = H_0 + g_0 H_1, \quad (11)$$

характерной для теории возмущений, где  $H_0$  - регулярный легко обратимый оператор,  $H_1$  - возмущение,  $g_0$  - константа взаимодействия. Эта форма естественна, например, для интегродифференциальных операторов. Параметризация осуществляется путем введения непрерывной функции  $g(t)$  включения взаимодействия, удовлетворяющей граничным условиям

$$g(0) = \lim_{t \rightarrow \infty} g(t) - 1 = 0, \quad (12)$$

так что

$$H(t) = H_0 + g(t)g_0 H_1. \quad (13)$$

В обобщенном подходе строится эволюционный процесс

$$\frac{d}{dt} \Psi(t; \lambda(t), X(t)) = -\Psi(t; \lambda(t), X(t)) \quad (14)$$

$$\{g(0), \lambda(0), X(0)\} = \{0, \lambda_0, X_0\}$$

$$\Psi(0; \lambda_0, X_0) = \Psi_0(\lambda_0, X_0),$$

где  $g(t)$  либо находится в процессе, либо задается. Этот процесс имеет интеграл, аналогичный (7). В отличие от процесса (5)-(6), в эволюционном уравнении (14) изменяется сам оператор  $\Psi(t; Z(t))$  от начальной простой формы  $\Psi_0$  до заданной асимптотической формы  $\Psi(\infty) = \Psi$ . При этом начальные значения  $\{\lambda_0, X_0\}$  могут быть решениями простой задачи

$$(H_0 - \lambda_0 I) X_0 = 0,$$

что алгоритмизует их нахождение. Дальнейшее обобщение и развитие вычислительных схем было получено, в отличие от метода Эйлера, путем применения трехслойных разностных схем. Они дали возможность, как и в теории возмущений, в ходе итераций обращать простые операторы вида  $H_0 - \tilde{\lambda} I$ , сохраняя при этом достоинства ньютоновского процесса. Данный подход включает как частный случай известный метод эволюции по константе связи, применяемый в задачах ядерной физики /8/.

Последовательное развитие численного метода, алгоритмов и программ /9/ велось параллельно уточнению адиабатической схемы. Совместные исследования в этих направлениях привели к расчету характеристик (уровней энергии связи и волновых функций) 22 вращательно-колебательных состояний мезомолекул изотопов водорода с относительной точностью  $10^{-3} - 10^{-4}$  ( $10^{-1} - 5 \cdot 10^{-2}$  эВ для энергии) /10/.

Ключевым моментом для обоснования модели резонансного образования мезомолекул и предсказания высокой скорости образования  $dtu$  /11/ явилось обнаружение и вычисление характеристик слабосвязанного состояния мезомолекулы  $dtu$ . Это было впервые выполнено с помощью теории возмущений в работе /11/ и в рамках изложенной выше вычислительной схемы в работе /10/. В дальнейшем точность вычисления энергии и волновых функций этого состояния была доведена /12/ до  $\sim 10^{-3}$  эВ ( $10^{-6}$  - относительная точность), отвечающей потребностям теории и эксперимента.

Для оценки ошибок решения задачи с фиксированной системой потенциалов выполнен многопараметрический анализ аппроксимации исходной

Таблица 1. Энергия связи -  $E_{Jv}$  /эВ/ мезомолекул состояний (Jv) \*

ppm		pdm		p <sub>2</sub> m		
(00)	(10)	(00)	(10)	(00)	(10)	
252.95 (264)	106.95 (264)	221.52 (264)	97.40 (264)	213.97 (264)	99.06 (264)	Адиабатический (1980) /10/
253.15 (50)	-	221.42 (50)		213.65 (50)	-	Адамов, Демков Филинский (1983) /14/
253.15240 (140)	107.26563 (250)	221.54923 (250)	97.42990 (250)	213.83975 (250)	99.10104 (250)	Фролов, Эфрос (1984)
253.153 (125)	107.267 (286)	221.551 (440)	97.66 (440)	213.841 (440)	99.13 (440)	/15a/
253.152 (125)	107.266 (286)	221.54 (440)	97.493 (440)	213.829 (440)	99.119 (440)	Bhatia and Drachman (1984) /16/
253.153 (125)	107.266 (286)	221.561 (440)	97.493 (440)	213.857 (440)	99.119 (440)	
253.15261 (740)	107.26568 (693)	221.54951 (693)	97.49774 (698)	213.84024 (698)	99.12608 (698)	Виницкий, Коробов, Пузинин (1985) /20/
253.1527 (396)	107.2659 (396)	221.5497 (396)	97.4990 (396)	213.8404 (396)	99.1271 (396)	
253.146 (396)	107.203 (396)	221.546 (396)	-	213.838 (396)	-	Hara et al (1986) /18/
253.152615 (300)	107.26583 (350)	221.54953 (350)	97.49611 (350)	213.84026 (350)	99.12507 (350)	Фролов (1986) /15г/
253.152616 (300)	107.26587 (350)	221.54955 (350)	97.498 (350)	213.84028 (350)	99.127 (350)	
-	-	-	97.49822 (450)	-	99.12632 (450)	Фролов (1987)
-	-	-	97.4989	-	99.1270	/15d/

\* /N в скобках представляет число используемых вариационных функций

задачи (2)-(3). Для оценки сходимости адиабатического разложения были проведены серии расчетов при различных  $N \approx 900$ . Использовались интерполяция по параметрам  $N \rightarrow \infty$ ,  $k_{min} \rightarrow 0$  и экстраполяция по параметрам  $R_{max} \rightarrow \infty$ ,  $\Delta R \rightarrow 0$ ,  $k_{max} \rightarrow \infty$ ,  $\Delta k \rightarrow 0$  и др.

Последующий анализ этих расчетов показал, что точность вычисления энергии для слабосвязанного состояния  $ddu$  составляет  $\sim 10^{-2}$  эВ, а для  $dtu \sim 10^{-3}$  эВ. Сравнительно большая ошибка для  $ddu$  связана с недостаточно аккуратным учетом вклада в энергию связи от различных состояний чисто непрерывного спектра задачи двух центров. Потребность в ресурсах ЭВМ в этих расчетах возросла до уровня прямых рас-

Таблица 2. Энергия связи -  $E_{Jv}$  /эВ/ состояний (Jv)

$ddu$ - мезомолекул				
(00)	(01)	(10)	(20)	
325.05 (264)	35.81 (264)	226.61 (264)	86.32 (264)	Адиабатический /10/
325.04 (50)	35.45 (50)	-	-	Адамов, Демков, Филинский (1983) /14/
325.07213 (140)	35.83658 (140)	226.68157 (250)	-	Фролов, Эфрос (1984) /15a/
325.074 (203)	35.9 (161)	226.683 (286)	-	Bhatia and Drachman (1984) /16/
325.070 (203)	35.815 (161)	226.662 (286)	-	
325.083 (408)	35.846 (420)	226.680 (438)	-	Виницкий, Коробов, Пузинин (1985) /20a/
325.0740 (300)	35.8438 (300)	226.6817 (350)	-	
325.07 (396)	35.79 (396)	-	-	Гусев, Касчиев (1985) /30/
325.073 (396)	35.843 (396)	226.670 (396)	-	Hara et al (1986) /18/
325.07398 (300)	35.84421 (300)	226.68176 (350)	86.4341 (400)	Фролов (1986) /15г/
325.07399 (300)	35.84424 (300)	226.68181 (350)	86.45 (400)	

четов трехмерных задач, поскольку перерабатываемые числовые массивы имели общий объем  $\sim 200$  Мбайт.

Современное состояние мезомолекулярных расчетов, начиная с момента получения в 1977 г. первого значения уровня энергии слабосвязанного состояния энергии  $dtu$ , отражено в таблицах I-5. Они не претендуют на полноту, поскольку количество расчетов с каждым годом увеличивается. Видно, что адиабатические расчеты, несмотря на сложность при  $N \approx 900$ , в целом достаточно точны, служили хорошим ориентиром для последующих расчетов и в пределах указанной выше точности совпадают с ними. Основная цель наших расчетов состояла в обнаружении и надежном вычислении характеристик слабосвязанного состояния  $dtu$ , наиболее важного для мезокатализа. В отдельной таблице 5 представлена также эволюция расчетов уровней энергии слабосвязанных

Таблица 3. Энергия связи -  $\epsilon_{\text{TV}}$  /эВ/ состояний (TV)  $d_{\text{TV}}$ - мезомолекулы

(00)	(01)	(10)	(20)	
319.15 (264)	34.87 (264)	232.44 (264)	102.54 (264)	Адиабатический (1980) /18/
318.35 (50)	33.26 (50)	-	-	Адамов и др. (1983) /14/
319.1	34.7	-	-	Беляев, Сергеевко (1983) /13а/
318.13805 (140)	34.82381 (140)	232.42049 (250)	-	Фролов, Эфрос (1984) /15а/
319.140	34.84	232.48	-	
319.062 (440)	34.573 (440)	232.416 (440)	-	Bhatia and Drachman (1984) /16/
319.25	-	232.416	-	
319.117 (380)	34.776 (380)	232.436 (300)	-	Hu (1985) /17а/
-	-	232.4471 (350) 232.4940	-	Frolov, Efros (1985) /15б/
319.14003 (693)	34.83380 (910)	232.47155 (698)	-	Виницкий, Коробов, Пузынин (1985) /20а/
319.1401	34.8342	232.4717	-	
319.1399 (350)	34.8335 (350)	232.4692 (350)	102.6318 (400)	Фролов (1986) /15г/
319.141	34.835	232.474	102.65	
319.13419 (500)	-	232.46867 (740)	-	Hu (1986) *) /17в/
319.139 (396)	34.830 (396)	234.420 (396)	-	Hara et al (1986) /18/
319.14007 (400)	34.83404 (400)	232.47156 (400)	102.64215 (500)	Фролов (1987) /15г/
319.14020	34.83430	232.4719	102.648	
319.140098 (695)	34.8336	-	-	Hu (1987) /17г/
319.1401224 (490)	34.8343	-	-	Szalewicz et.al. (1987) /25/
319.140123				
319.139752161 (1158)	34.834465 (1995)	232.471537 (968)	-	Szalewicz et.al. (1987) *) /25/
319.1395 (1696)	34.8336 (1696)	232.4711 (1696)	102.6426 (1696)	Kamimura (1987) /26/

\*) Вычисления выполнены при  $m_{\text{H}} = 206.7686 \text{ me}$ ,  $M_{\text{T}} = 5496.899 \text{ me}$

Таблица 4. Энергия связи -  $\epsilon_{\text{TU}}$  /эВ/ состояний

$d_{\text{TU}}$ - мезомолекулы

(00)	(01)	(10)	(11)	(20)	(30)	
362.95 (264)	83.87 (264)	289.15 (264)	45.24 (264)	172.65 (264)	48.70 (264)	Адиабатический (1980) /10/
362.79 (50)	83.37 (50)	-	-	-	-	Адамов и др. (1983) /14/
362.90040 (140)	83.72202 (140)	289.13931 (250)	45.19359 (250)	-	-	Фролов, Эфрос (1984), /15а/
362.904	83.78	289.146	45.22			
362.900 (203)	83.630 (161)	289.12 (286)	45.096 (286)	-	-	Bhatia and Drachman (1984) /16/
362.945	83.67	289.12	45.187			
362.91027 (408)	83.77097 (420)	289.14195 (438)	45.20552 (607)	-	-	Виницкий, Ко- робов, (1985) Пузынин /120а/
362.9103	83.7711	289.1420	45.2058			
362.93	83.71	-	-	-	-	Гусев, Касчиев (1985) /30/
362.909 (396)	83.770 (396)	289.137 (396)	45.198 (396)	-	-	Hara et.al. (1986) /18/
362.91029 (300)	83.77109 (300)	289.1419 (350)	45.2057 (350)	172.5264 (400)	-	Фролов (1986) /15г/
362.91031	83.7712	289.1423	45.2059	172.65		
-	-	289.14206 (525)	45.20558 (525)	-	-	Фролов (1987) /15а/
		289.14220	45.20570			

состояний  $dd_{\text{U}}$  и  $dt_{\text{U}}$ . Из нее видно, что адиабатические расчеты решили принципиальную задачу о существовании этих состояний. Изложенные выше универсальные вычислительные схемы и полученные с их помощью количественные результаты послужили основой для разработки модели резонансного образования мезомолекул, хорошо согласующейся с экспериментом и возродившей интерес к мезокатализу.

Отметим, что наряду с изложенной адиабатической схемой в ОИЯИ развивались и другие подходы к расчету трехчастичных систем /13/.

Таблица 5. Энергия связи  $\epsilon_{J\nu}$  состояний  $(J=1, \nu=1)$   
 $d_{\text{дн}}$  и  $d_{\text{тн}}$  - мезомолекул

1.96 ± 0.1	0.85 ± 0.1	Теор. возм. (1977) /11/
1.91 ± 0.05 (264)	0.64 ± 0.05 (264)	Адиабатический (1980) /10/
1.94 ± 0.05 (284)	0.68 ± 0.05 (284)	
1.956 ± 0.001 (884)	0.656 ± 0.001 (884)	(1982) /11/
1.78123 (250)	0.5231 (375)	(1984) /12/
1.95 ± 0.05	0.6	Фролов, Эфрос (1984) /15а/
1.862 (364)	0.224 (440)	Bhatia /16/
1.87		Drachman (1984)
1.96998 (350)	-	Фролов, Эфрос (1985) /15б/
1.9725 ± 0.001		
1.9711 (400)	0.60719 (400)	Frolov, Efros
1.972 ± 0.001	0.6554 ± 0.0150	(1985) /15в/
-	0.628 (400)	С.У.Ну(1985) /17а/
1.97431 (819)	0.65371 (982)	Виницкий, Коробов, Пузынин (1985) /20а/
1.9750 ± 0.001	0.657 ± 0.002	
-	0.6496 (600)	С.У.Ну(1985) /17б/
1.97465 (1286)	0.65889 (1495)	Виницкий, Коробов, Пузынин (1986) /20б,в/
1.9749 ± 0.0002	0.663 ± 0.002	
1.955 (380)	-	Нара, (1986) /18/
1.97302 (350)	-	Фролов (1986) /15г/
1.9745 ± 0.001		
1.97425 (450)	-	Фролов (1987) /15д/
1.9745 ± 0.0005		
1.97475 (1286)	0.65968 (2084)	Виницкий, Коробов, Пузынин (1987) /20г,д/
1.9750 ± 0.0002	0.6604 ± 0.0002	
-	0.6580 (1102)	С.У.Ну (1987) /17г/
-	0.65974 (1890)	Szalewicz et.al., (1987) /25/
-	0.661 ± 0.001	
-	0.65933 (1696)	Kamimura (1987) /26/

Однако эти работы носят скорее методический характер, и расчеты слабосвязанного состояния  $d_{\text{дн}}$  и  $d_{\text{тн}}$  с требуемой точностью в них проведены не были.

Возвращаясь к излагаемому циклу исследований, отметим, что он стимулировал развитие прямых вариационных /14-18/ монте-карловских расчетов /19/. Накопленный опыт расчетов сложных спектральных задач и всесторонний анализ полученных в адиабатическом представлении результатов позволили нам в короткий срок также создать эффективные вариационные схемы расчета мезомолекул /20/. В них используется вариационная постановка спектральной задачи в сферических координатах  $\{\xi, \eta, \zeta\}$  /21/

$$\begin{pmatrix} H_{gg} & H_{g\pi} \\ H_{\pi g} & H_{\pi\pi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_g \\ F_{\pi} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} F_g \\ F_{\pi} \end{pmatrix} \quad (15)$$

с вариационными функциями молекулярного типа, наиболее полно отражающими симметрию и динамику адиабатических трехчастичных систем. На целесообразность расчетов систем, близких к адиабатическим в обобщенных эллипсоидальных координатах (частным случаем которых являются сферические) указывалось также в работе /22/ (стр.1591). Мы использовали вариационные функции молекулярного типа с расширенным по сравнению с /23/ набором линейных и нелинейных параметров:

$$F_g = F_{gq} + F_{gu}, \quad F_{\pi} = (F_{\pi q} + F_{\pi u}) [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}$$

$$F_{gq} = \sum_{t=1}^2 \sum_{ijk(p)} a_{ijk(p)}^{(gtp)} R^{i-1} \xi^{j-1} \zeta^{k(p)-1} e^{-(\alpha_{tp} + \beta_{tp} \xi) R} \quad (16)$$

$$i, j = 1, 2, \dots; i > j, \quad k(q) = 2k-1, \quad k(u) = 2k, \quad k = 1, 2, \dots$$

$$F_{\pi q} = \sum_{t=1}^2 \sum_{ijk(p)} a_{ijk(p)}^{(\pi tp)} R^{i-1} \xi^{j-1} \zeta^{k(p)-1} e^{-(\delta_{tp} + \nu_{tp} \xi) R}$$

$$i, j = 1, 2, \dots; i > j+1, \quad k(q) = 2k, \quad k(u) = 2k+1, \quad k = 1, 2, \dots$$

дающих возможность лучше аппроксимировать поведение волновой функции. В расчетах использовались значения масс и постоянной Ридберга:

$$M_t = 5496,918 m_e, \quad M_d = 3670,481 m_e, \quad M_p = 1836,151527 m_e,$$

$$m_{\mu} = 206,7686 m_e, \quad R_y = 13,6058041 \text{ эВ}$$

и значения нелинейных параметров /20г,д/:

	$\rho$	$\alpha_1$	$\beta_1$	$\alpha_2$	$\beta_2$	$\gamma_1$	$\nu_1$	$\gamma_2$	$\nu_2$
$ddu$	1,7979	0,7063	0,0005	0,5137	1,7979	0,7192	0,0091	0,5651	
$dtu$	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	0,5079	

Была выбрана система единиц  $e = \hbar = m_0 = 1$ ,  $m_0 = M_a m_\mu / (M_a + m_\mu)$ .

Решение алгебраической задачи

$$Ax - \lambda Bx = 0, \quad x = \{x_1, \dots, x_N\} \quad (17)$$

с выбранными нелинейными параметрами осуществлялось на основе метода обратных итераций с регуляризацией. Регуляризованная задача имеет вид

$$Ax - \lambda(B + \xi I)x = 0,$$

где  $\xi$  - малый параметр. Процедура регуляризации необходима, поскольку использование неортогонального набора  $N \approx 2000$  базисных функций (16) приводит к плохой обусловленности матрицы  $B$ , даже при представлении чисел с четверной точностью на ЭВМ ЕС-1061. Разработанные вычислительные схемы и программы позволили провести расчеты в случае мезомолекул  $ddu$  и  $dtu$ , наиболее важных в теории мю-катализа, с точностью порядка  $\sim 10^{-6}$  эВ для фиксированных  $N$ .

В вариационных расчетах широко используется <sup>15/</sup> экстраполяционная формула

$$E(N) = E(\infty) + C N^{-\alpha} \quad (18)$$

с помощью которой можно дать некоторое предсказание ожидаемого результата  $E(\infty)$ . Отметим, однако, что эта формула математически не обоснована. О правомерности ее применимости можно судить лишь при достаточно большом количестве расчетов, выполненных для больших  $N$ . Сами расчеты должны быть выполнены с хорошим качеством в смысле достижения минимума вариационного функционала. В противном случае можно получить искаженную картину. Процедура нахождения параметров  $E(\infty)$ ,  $C$  и  $\alpha$  по трем расчетам при близких  $N$ , принятая <sup>15/</sup>, является, вообще говоря, некорректной, поскольку зависит от того, как сильно отличается в расчетах количество  $N$  пробных функций. В этом смысле такая экстраполяция аналогична экстраполяции по Ричардсону <sup>24/</sup>. Известно, что для нее существует оптимальный набор шагов  $h = h_0/2k$  сгущающихся  $k$ -сеток. В вариационных расчетах аналогом  $h$  является

ее величина  $1/N$ . Поэтому наиболее корректной процедурой нахождения параметров  $E(\infty)$ ,  $C$  и  $\alpha$  является обработка результатов вычислений по методу наименьших квадратов при достаточно больших и отличающихся  $N$ . Анализ ситуации, когда экстраполяция дает огрубленную оценку, вызванную плохим качеством расчета (при показателе  $\alpha < 2$ ), дан в работе <sup>20 г/</sup>. Отметим, что сравнение первых и последующих результатов работ <sup>15,16/</sup> показывает огрубление экстраполяционных оценок при малом числе  $N$  пробных функций и их несоответствие объявленной высокой сходимости (см. например, расчеты <sup>15/</sup> мезомолекулы  $dtu$  ( $J=1, v=0$ ), приведенные в таблице 3). Таким образом, экстраполяционные оценки на малом числе пробных функций могут существенно отличаться от результата, полученного в отдельном расчете с большим числом пробных функций <sup>20/</sup>. Последующее уточнение на большем числе пробных функций приводит авторов работ <sup>15/</sup> к нашим результатам.

Экстраполированные значения энергии, полученные в наших последних расчетах <sup>20 г/</sup> с  $N = 2084$ , имеют точность  $\sim 10^{-4}$  эВ. Было выполнено также исследование зависимости результата от погрешности в задании масс частиц. Оно показало, что точность результатов сравнима с этой погрешностью. Поэтому дальнейшее увеличение точности вариационных расчетов энергии имеет смысл, если значения масс частиц будут известны с меньшей погрешностью. Отметим, что наши результаты для  $dtu$  подтверждены недавно двумя независимыми вариационными расчетами <sup>25,26/</sup>, выполненными на суперкомпьютерах. Для контроля мы выполнили вариационные расчеты уровней энергии и других мезомолекул <sup>20 а, б/</sup>. Получено совпадение в пределах точности с результатами адиабатических расчетов и других вариационных расчетов. Эти результаты, а также вычисления уровней энергии мезомолекулярных комплексов <sup>27/</sup> с помощью указанных вычислительных схем послужили основой для уточнения теоретических моделей мюонного катализа (см. <sup>28/</sup>).

Следует отметить эффективный вариационно-разностный метод расчета трехчастичных систем в трехмерной постановке <sup>21,29/</sup> на основе нового метода итерации альтернирующих подпространств <sup>30/</sup>. Полученные в этом подходе результаты также согласуются с адиабатическими и вариационными расчетами в пределах декларируемой точности. В отличие от <sup>21/</sup>, постановка <sup>29/</sup> в гиперсферических координатах является более перспективной, поскольку сводит исходную задачу для  $J=1$  к системе двух уравнений в конечной по двум переменным трехмерной области. Кроме того, в данной постановке возможно введение двумерного гиперсферического базиса в конечной области на плоскости <sup>31/</sup>. Необходимые асимптотики волновых функций исследованы в работах <sup>32/</sup>.



Разработанные вычислительные схемы помимо моделей мю-катализа нашли широкое применение в целом ряде областей теоретической физики. Только в последние годы с их помощью был решен широкий круг задач теории полярона и биэкситона, джозефсоновских переходов с микро-неоднородностями, гидродинамики, акустических волноводов, электромагнитных резонаторов и элементов ускоряющих структур, теории ядра, теории поля Янга-Миллса<sup>33/</sup>. Это также свидетельствует о высокой эффективности численных методов, применяемых нами при исследовании математических моделей мю-катализа.

В настоящее время явление мю-катализа широко изучается как теоретически, так и экспериментально во многих физических центрах (СИН, Лос-Аламос, Триумф, КЕК и др). Качественно новые требования к точности в теоретических предсказаниях, диктуемые потребностями современных экспериментов, приводят к разработке новых многомерных и многопараметрических моделей. Это приводит к необходимости дальнейшего развития методов численного анализа. При этом резко возрастают объем вычислений и, следовательно, роль новых мощных вычислительных систем.

#### Л и т е р а т у р а

1. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев. ЭЧАЯ т.13, 1982, с.1336.  
L.Bracci and G.Fiorentini. Phys.Rep. 86, 1982,169.
2. Л.В.Канторович, В.И.Крылов. Приближенные методы высшего анализа. Гостехиздат, Москва, 1952.
3. Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. ЖФМ и МФ, т.8, 1968, 1256;  
L.I.Ponomarev, T.P.Puzynina and N.F.Truskova. J.Phys.B11,1978,3861;  
L.I.Ponomarev, T.P.Puzynina and L.N.Somov. J.Phys.B10,1977,p.1335.  
Д.И.Абрамов, В.В.Гусев.Препринты ИФВЭ-84-148, ИФВЭ-84-149, Протвино, 1984.
4. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina and L.N.Somov. Ann.Phys. 110, 1978, с.274;  
V.S.Melezhhik, J.Comput.Phys. 65 (1986) 1.
5. М.К.Гавурин. Известия вузов.Мат. т.5(6), 1958, стр.18  
Е.П.Жидков, Г.И.Макаренко, И.В.Пузынин. ЭЧАЯ, т.4, 1973, с.127.
6. B.N.Parlett The Symmetric Eigenvalue Problem (Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, N.J. 07632, 1980).
7. С.И.Виницкий,Л.И.Пономарев,И.В.Пузынин,Т.П.Пузынина. Препринт ОИЯИ, Р5-12787,Дубна,1977; С.И.Виницкий,А.Д.Гочева,И.В.Пузынин. Препринт ОИЯИ Р11-81-387 Дубна,1981; Р11-82-314; Р11-82-315 Дубна, 1982.

8. Д.А.Киржиц, Н.Г.Талимбаев. ЯФ 25, 1977, с.700.
9. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. J.Comput. Phys 13(1973)1.  
J.Comput.Phys.22(1976) 125; V.S.Melezhhik, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina and L.N.Somov. J.Comput. Phys.54 (1984)221.  
С.И.Виницкий, А.Д.Гочева, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина в "Математические модели и мат.методы решения физических задач". ОИЯИ Д10-П1-84-818, Дубна, 1984, с.178.
10. С.И.Виницкий и др. ЖЭТФ т.79, 1980, 698.  
П.С.И.Виницкий и др.Препринт ОИЯИ Р4-10929 Дубна,1977; ЖЭТФ, т.74,1978,849.
12. A.D.Gocheva et.al. Препринт ОИЯИ, Р4-84-642 Дубна, 1984; Phys. Lett. B 153, 1985, с.349.
13. а) В.Б.Беляев, С.А.Сергеевков. Препринт ОИЯИ Р4-83-734, Дубна,1983  
б) М.С.Касчиев, А.В.Матвеевко. Препринт ОИЯИ Р4-85-100,Дубна 1985  
A.V.Matveenko, JINR, E4-86-568 (Dubna, 1986).
14. М.Н.Адамов, Ю.Н.Демков, А.В.Филинский.Вестник ЛГУ 22, 1983,с.112.
15. а) А.М.Фролов, В.Д.Эфрос. Письма в ЖЭТФ, т.39, 1984, с.449;  
б) ЯФ т.41, 1985, 828;  
в) J.Phys. B 18, 1985, 1265;  
г) А.М.Фролов. Препринт ИАЭ-4274/12 Москва, 1986; ЯФ т.44, 1986, с.1367;  
д) А.М.Фролов. Препринт ИАЭ-4409/1 Москва 1987.
16. A.K.Bhatia and R.J.Drachman. Phys.Rev. 30(1984) 2138.
17. а) Chi-Ju Hu Phys.Rev. 32 (1985) 1245;  
б) Contribution to the MCF workshop, Los Alamos, December, LAMPF, 1985;  
в) Phys.Rev. A34 (1986) 2536;  
г) Phys.Rev A36 (1987) 2739.
18. S.Hara, T.Ishihara and N.Toshima. Contribution to the International Conference on Muon Catalyzed Fusion, MCF-86, September, Tokio, 1986, p.29.
19. D.Ceperley, B.J.Alder. Phys.Rev A.31(1985) 1999.
20. С.И.Виницкий, В.И.Коробов, И.В.Пузынин  
а)Препринт ОИЯИ Р4-85-917, Дубна, 1985;  
б) ЖЭТФ 91 1986, 714;  
в) ОИЯИ. Краткие сообщения №19-86, Дубна, 1986;  
г) ОИЯИ. Краткие сообщения 23-87, Дубна, 1987;  
д) Препринт ОИЯИ Р4-87-225, Дубна, 1987.
21. М.С.Касчиев, С.И.Виницкий. Препринт ОИЯИ Е4-85-467, ЯФ т.44, 1986 386.
22. R.C.Whitten, J.S.Sims. Phys.Rev. A9 (1974) 1588.

23. A. Halpern. Phys. Rev. Lett. 13 (1964) 660.
24. Г.И.Марчук, В.В.Найдуров. Повышение точности решений разностных схем, Наука, Москва, 1979.
25. K. Szalewicz, H. J. Monkhorst, W. Kolos, A. Scrinzi. Contribution to the International Symposium on Muon-Catalyred Fusion (MCF-87), Leningrad May 26-29, LINF, 1987.
26. M. Kamimura. Contribution to the International Symposium on Muon-Catalyred Fusion (MCF-87), Leningrad, May 26-29. LINF, 1987.
27. M. P. Faifman, L. I. Menshikov, L. I. Ponomarev, T. A. Strizh, Z. Phys. D2 (1986) 79.
28. Book of Abstracts. Tenth Internat. Conf. on Atomic Phys. Tokyo, August 25-29, 1986 Eda; H. Nurume, I. Shimamura; Internat. Symp. in muon-catalyzes fusion, Sept. 1-3, 1986, Abstract of Papers. University Tokyo, 1986.
29. С.И.Виницкий, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин. Препринт ОИЯИ Р4-87-8, Дубна, 1987.
30. В.В.Гусев, М.С.Касчиев. Препринт ОИЯИ Р11-85-758, Дубна, 1985.
31. А.Г.Абрашкевич и др. Международное совещание по теории малочастичных и кварк-адронных систем, 16-20 июня 1987, Дубна, Д4-87-237, с33; Препринт ОИЯИ, Р11-87-749, 1987.
32. С.И.Виницкий, Ф.Р.Вукайлович, М.Б.Кадоццев. Препринт ОИЯИ, Р4-86-439 Дубна 1986; С.И.Виницкий, М.Б.Кадоццев. Препринт ОИЯИ Р4-86-696 Дубна 1986.
33. И.В.Амирханов и др. Препринт ОИЯИ Р11-85-445 Дубна 1985; Filipov A. T. et al. Phys. Lett. A, 1987, 120, 47.  
С.П.Радев и др. ОИЯИ Р5-86-402, Р5-86-653, Р5-86-699 Дубна, 1986;  
С.И.Виницкий и др. Акустический журнал т.6 1985 с787;  
M. S. Kaschiev et al Nucl. Instr. and Meth. A. 1984, 227, 6411;  
М.С.Касчиев и др. Препринт ОИЯИ Р4-85-319 Дубна, 1985;  
Вестник ЛГУ т.1 1986, с.63.  
В.А.Касчиева и др. Препринт ОИЯИ Р5-87-231, Р5-87-232 Дубна 1987;  
И.В.Пузынин и др. Препринт ОИЯИ Р11-87-332 Дубна 1987,  
F. R. Vukajlovich, S. I. Vinitzky. Phys. Lett A 118 (1986) 185.

Рукопись поступила в издательский отдел  
12 октября 1987 года.

Виницкий С.И., Пузынин И.В.  
Уровни энергии  $\mu$ -мезомолекул

Р4-87-706

Дан обзор методов и результатов расчетов уровней энергии и волновых функций мезомолекул изотопов водорода. В обзор включены материалы, начиная с 1977 г. — момента обнаружения и надежного вычисления характеристик слабосвязанного состояния ( $J=V=1$ ) мезомолекулы  $d\mu$ , возродивших интерес к мюонному катализу. Особое внимание уделено созданию методов и высокоточным расчетам, выполненным в ОИЯИ.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Vinitzky S. I., Puzynin I. V.  
Energy Levels of Mesic Molecules

Р4-87-706

A review is given for the methods and results of calculations of energy levels and wave functions of mesic molecules of hydrogen isotopes. The review includes the results since 1977 when characteristics of a weakly bound state ( $J = V = 1$ ) of mesic molecule  $d\mu$  were determined and reliably calculated, thus inspiring a renewed interest in the muon catalysis. Particular attention has been given to the construction of methods and high-precision calculations performed at the JINR.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987