90-541

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

1039/91

Р4-90-541

Цой Нам Чол

УРОВНИ ЭНЕРГИЙ МЕЗОМОЛЕКУЛ $dd\mu$ И $dt\mu$ В ОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

1990

I. Введение

В последнее время выполнен ряд расчетов простейших атомных и молекулярных систем в сильных магнитных полях /I,2,3/. Здесь мы рассмотрим влияние магнитного поля напряженности до 10^8 Гс на спектр уровней мезомолекул изотопов водорода /4,5/.

Известно /2/, что в магнитном поле $10^{-2} \lesssim \gamma \lesssim 10^{-1}$ ($\gamma = B/B_0$, B - интенсивность магнитного поля в Гс, а $B_0 = 2{,}35 \cdot 10^9$ Гс) сдвиг основного состояния атома водорода равен 10^{-4}-10^{-2} в относительных единицах. Поскольку сдвиг основного состояния атома водорода пропорционален γ^2 при полях $\gamma \lesssim 10^{-1}$, следует ожидать, что при $10^{-4} \lesssim \gamma \lesssim 10^{-3}$ этот сдвиг равен 10^{-8}-10^{-6}. Если такая тенденция сохранится и для мезомолекул, то этот эффект уже необходимо учитывать при рассмотрении резонансного образования мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ /6/, так как их уровни энергии должны быть известны с точностью $\sim 10^{-3}$ эВ, что в относительных единицах составляет величину $\sim 10^{-6}$ /4/.

2. Постановка задачи

Запишем уравнение Шредингера для трех кулоновских частиц (мезомолекула) с зарядами и массами (eZ_a, M_a), (eZ_b, M_b) и (eZ_c, M_c) в отсутствие внешнего магнитного поля в системе координат γ, вращающейся вместе с вектором $\vec{R}$ ($e=\hbar=m_a=1$) /4,5/:

$$(\hat{H}-E)\,\Psi(\vec{r};\vec{R})=0 \quad ,$$

$$\hat{H} = \hat{T}_a + \hat{W}_a = \hat{T}_a + \hat{h} + \frac{1}{R},$$
$$\hat{h} = -\frac{1}{2}\Delta_{\vec{r}} - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b},$$
$$m_a^{-1} = M_c^{-1} + M_a^{-1}, \quad \vec{R} = \vec{R}_b - \vec{R}_a, \tag{I}$$
$$R = |\vec{R}|, \quad \vec{r} = \vec{R}_c - (\vec{R}_b + \vec{R}_a)/2,$$
$$r_a = |\vec{r} - \vec{R}/2|, \quad r_b = |\vec{r} + \vec{R}/2|,$$

где вид оператора $\hat{T}_a$ определен в работе /4/. В адиабатическом представлении уравнение (I) для вычисления уровней энергий мезомолекул сводится к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений /4,5/:

$$\left\{\frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon_{J\upsilon} - U_{ii}^J(R)\right\}\chi_i(R) = \sum_{j\neq i} U_{ij}(R)\chi_j(R), \tag{2}$$

где $\varepsilon_{J\upsilon}$ - энергия мезомолекулы в состоянии $(J\upsilon)$ с моментом J и колебательным квантовым числом υ; $i,j \equiv (N\ell m)$ - набор сферических квантовых чисел /4/; $M = M_\circ/m_a$; $M_\circ^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}$ и $\chi_i(R)$ - волновые функции относительного движения ядер в мезомолекуле.

Эффективные потенциалы U_{ij} имеют вид

$$U_{ij}(R) = 2M\{E_i(R) - E_{1S}\}\delta_{ij} + H_{ij}(R) + \frac{d}{dR}Q_{ij}(R) + 2Q_{ij}(R)\frac{d}{dR} + B_{ij}(R), \tag{3}$$

где $E_i(R)$ - решения (термы) задачи двух центров и $E_{1S} = -Z_a^2/2$ - энергия изолированного атома (a,c) в основном состоянии $1S$; $H_{ij}(R)$, $Q_{ij}(R)$ и $B_{ij}(R)$ - матричные элементы задачи трех тел в адиабатическом базисе /4,5/.

Рассмотрим случай, когда мезомолекула находится в постоянном внешнем магнитном поле $\vec{\gamma}$, направление которого совпадает с направлением вектора $\vec{R}$. Поскольку магнитное поле в этом случае не влияет на движение ядер, в гамильтониане мезомолекулы (1) учтем лишь взаимодействие мюона с внешним полем. Включим это взаимодействие $\frac{1}{8}[\vec{\gamma}\times\vec{r}]^2$ в гамильтониан задачи двух центров:

$$\hat{h}_\gamma = -\frac{1}{2}\Delta_{\vec{r}} - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b} + \frac{1}{8}[\vec{\gamma}\times\vec{r}]^2 = \hat{h} + \frac{1}{8}[\vec{\gamma}\times\vec{r}]^2. \tag{4}$$

Тогда для решения задачи (1) можно использовать адиабатическое представление с новым базисом

$$\hat{h}_\gamma \phi_i^\gamma(\vec{r};R) = E_i^\gamma(R)\,\phi_i^\gamma(\vec{r};R), \tag{5}$$

где $\hat{h}_\gamma$ описывает движение мюона в кулоновском поле двух закрепленных на определенное расстояние R ядер и в постоянном внешнем магнитном поле $\vec{\gamma}$, направленном по межъядерной оси $\vec{R}$.

Переход к новому базису (5) означает замену

$$\begin{aligned} E_i(R) &\to E_i^\gamma(R), \\ E_{1S} &\to E_{1S}^\gamma, \\ H_{ij}(R) &\to H_{ij}^\gamma(R), \\ Q_{ij}(R) &\to Q_{ij}^\gamma(R), \\ B_{ij}(R) &\to B_{ij}^\gamma(R) \end{aligned} \tag{5.a}$$

в формуле (3). Здесь мы ограничимся лишь заменой $E_i(R)\to E_i^\gamma(R)$ и $E_{1S}\to E_{1S}^\gamma$, при этом магнитное взаимодействие учитывается с точностью $\sim 1/2M$, поскольку остальные матричные элементы в (3) имеют порядок малости $1/2M$ по сравнению с членом $2M(E_i(R) - E_{1s})$.

3. Изменения энергий уровней $1S\sigma$ и $2P\sigma$ задачи двух центров в постоянном магнитном поле

Здесь для исследования влияния магнитного поля на энергии мезомолекул используем так называемый простой подход /9/. Этот подход достаточно легко реализуем, поскольку в нем учитываются лишь первые два состояния $1S\sigma$ и $2P\sigma$ в адиабатическом разложении искомой волновой функции мезомолекулы (а матрица (3) имеет размерность 2х2), и дает достаточно хорошие приближения к уровням энергий мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$, полученным с высокой точностью в многоуровневом адиабатическом приближении /4/.

В сферических координатах $\vec{r}=\vec{r}(r,\theta,\varphi)$ уравнение Шредингера (5) имеет вид:

$$\begin{aligned}
&\{\hat{h}_\gamma - E_i^\gamma(R)\} f_i(r,x;R) = 0 \quad ; \\
&\hat{h}_\gamma = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{2r^2}\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx} - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b} \\
&\qquad + \frac{r^2\gamma^2}{8}(1-x^2) \quad ; \qquad\qquad (6) \\
&f_i(r,x;R) = r\phi_i^\gamma(\vec{r};R)\exp(-im\varphi) \quad ; \\
&r_a = \left(\frac{R^2}{4} + r^2 - Rrx\right)^{1/2} ; \; r_b = \left(\frac{R^2}{4} + r^2 + Rrx\right)^{1/2},
\end{aligned}$$

где $x = \cos\theta$. Дополнив это уравнение граничными условиями

$$\lim_{r\to 0} f_i(r,x;R) = \lim_{r\to\infty} f_i(r,x;R) = 0 \qquad (6.а)$$

и условием нормировки

$$\int d\vec{r}\, \frac{f_i^*(r,x;R)\, f_i(r,x;R)}{r^2}, \qquad (6.б)$$

для каждого набора фиксированных значений γ и R получаем двумерную задачу на собственные значения (6), (6.а), (6.б) с неразделяющимися переменными $\{r, x\}$.

Для решения этой задачи использовался предложенный в работах /7,8/ метод многомерного уравнения Шредингера. Известно, что задача двух центров (6) хорошо описывается в координатах $\{r, x\}$ в пределе $R\to 0$ (при $R=0$ эти переменные разделяются). Ее решение в таких координатах при больших R существенно усложняется. Тем не менее метод /7,8/ дает достаточно хорошие результаты для $E_i(R)$ и $E_i^\gamma(R)$ во всей области изменения $0 \leqslant R \leqslant 50$, $0 \leqslant \gamma \leqslant 10^{-1}$ для $N \sim 30$-50 узловых точек по переменной x /7/. Естественно, сходимость метода замедляется с ростом R.

Термы $E_i(R)$ в отсутствие магнитного поля вычислены с высокой точностью в работе /10/. Для вычисления $E_i^\gamma(R)$ здесь была использована следующая процедура. Термы $E_i^\gamma(R)$ и $E_i(R)$ были вычислены с помощью алгоритма /7/ для трех значений N = 32, 40, 48 для R = 0,1-50. Поскольку в области больших R сходимость метода /7/ по N замедляется, для уточнения искомой величины $E_i^{\gamma}(R)$ мы проводили экстраполяцию разности

$$\Delta E_N^{\gamma} = E_N^{\gamma}(R) - E_N(R) \qquad (7)$$

к пределу $N \to \infty$ по этим трем точкам N = 32, 40, 48. Экстраполяция выполнялась по формуле

$$\Delta E_N^{\gamma}(R) = \Delta E_0^{\gamma}(R) + A(R) \cdot N^{-\alpha(R)}. \qquad (8)$$

Как показывает численное исследование, в области магнитных полей $0 \leqslant \gamma \leqslant 10^{-1}$ зависимостью $\Delta E_0^{\gamma}(R)$, A и α от γ можно пренебречь и представить $\Delta E_N^{\gamma}(R)$ в виде

$$\Delta E_N^{\gamma}(R) = \gamma^2 \left\{ \Delta E_0(R) + A(R) \cdot N^{-\alpha(R)} \right\}. \qquad (9)$$

На рис. I представлены графики $A(R)$ и $\alpha(R)$ для состояния $1S\sigma$, а на рис. 2 поправки $\Delta E_0(R)$ для состояний $1S\sigma$ и $2P\sigma$. В табл. 1 показаны изменения энергии основного состояния мезоатомов $d\mu$ и $t\mu$ (в единицах задачи) $\Delta E_{1S}^{\gamma} = E_{1S}^{\gamma} - E_{1S}$ в магнитном поле γ. Из сравнения асимптотик $\Delta E_0(R)$ при $R \to \infty$ с данными табл. 1 следует, что таким образом вычисленные изменения энергий задачи двух центров в магнитном поле при $R \to \infty$ хорошо совпадают с соответствующими поправками для атомов. Найденные в данной работе решения $E_{1S}^{\gamma}(R)$ и $E_{2P}^{\gamma}(R)$ согласуются также с результатами предыдущих работ /I,I3/ для одинаковых γ и R.

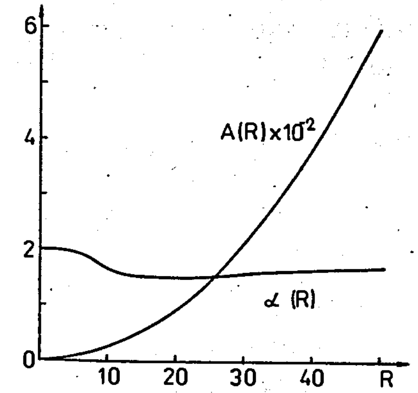

Рис. I. Функции $A(R)$ и $\alpha(R)$.

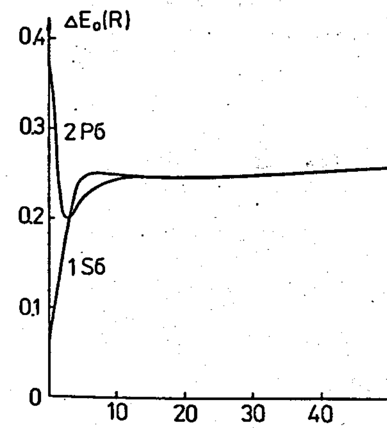

Рис. 2. Поправки к энергии состояний $1S\sigma$ и $2P\sigma$ задачи двух центров.

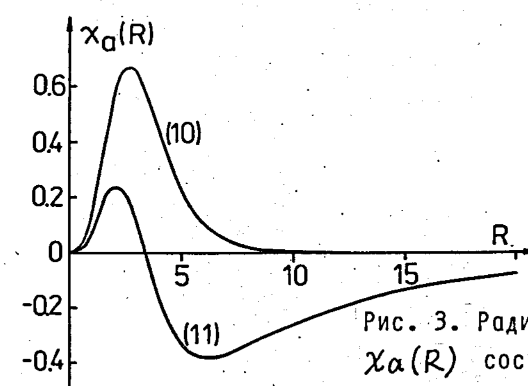

Рис. 3. Радиальные волновые функции $\chi_a(R)$ состояний (I0), (II) мезомолекулы $dd\mu$ при $\gamma = 10^{-4}$.

Таблица 1. Изменения энергии основного состояния мезоатомов в единицах $e = \hbar = m_\mu = 1$.

γ	E^{γ}	/2/*
10^{-4}	$0,25 \times 10^{-8}$	-
10^{-3}	$0,251 \times 10^{-6}$	-
10^{-2}	$0,251 \times 10^{-4}$	$0,25 \times 10^{-4}$
10^{-1}	$0,248 \times 10^{-2}$	$0,245 \times 10^{-2}$

* Эти данные взяты из результатов /2/, где вычислены энергии связи.

Таблица 2. Изменения энергии мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в магнитном поле $-\mathcal{E}_{J\upsilon}$.

γ	$(J\upsilon)$=(00)	(01)	(10)	(11)	(20)
0	331,0090	36,8192	232,6780	2,3891	91,3298
10^{-4}	331,0090	36,8192	232,6780	2,3891	91,3298
10^{-3}	331,0093	36,8193	232,6783	2,3892	91,3300
10^{-2}	331,0418	36,8317	232,7063	2,3973	91,3512
10^{-1}	333,9624	37,8027	235,1866	2,9535	93,1541
0	318,7925	34,3593	232,8308	0,53387	103,5668
10^{-4}	318,7925	34,3593	232,8308	0,53387	103,5668
10^{-3}	318,7928	34,3595	232,8311	0,53396	103,5670
10^{-2}	318,8254	34,3737	232,8599	0,54328	103,5900
10^{-1}	321,7571	35,5192	235,4152	1,21510	105,5699

4. Энергии мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в магнитном поле

В табл. 2 представлены энергии $\mathcal{E}_{J\upsilon}$ всех известных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в магнитном поле $0 \leqslant \gamma \leqslant 10^{-1}$, вычисленные при решении (2) с эффективным потенциалом (5.а) на интервале изменения R = 0,1(0,1)8(0,5)20(1)50 в простом подходе /9/, где входящие в состав эффективного потенциала матричные элементы $H_{ij}(R)$, $Q_{ij}(R)$ и $E_i(R)$ взяты из работы /10/. На рис. 3 показаны графики функции $\chi_a(R)$ относительного движения ядер для состояния (10) и (11) мезомолекулы $dd\mu$ при $\gamma = 10^{-4}$ (для $dd\mu$ $\chi_a(R) = \chi_b(R)$, где смысл индексов а,в объясняется в работах /4,5/).

Из графика волновых функций следует, для возбужденного состояния (11) мезомолекулы $dd\mu$ вероятность двух ядер находиться близко друг к другу меньше, чем у возбужденного состояния (10), и поэтому в одинаковом магнитном поле энергия $|\mathcal{E}_{10}|$ увеличивается в 2-3 раза по сравнению с энергией $|\mathcal{E}_{11}|$. Тот же эффект наблюдается и для $dt\mu$.

В табл. 2 вычисленные значения $\mathcal{E}_{J\upsilon}$ представлены с точностью 10^{-5}эВ для того, чтобы проследить влияние магнитного поля на эти уровни энергии, но абсолютная точность вычисления, конечно, хуже. При $\gamma = 10^{-3}$ ($2,35 \cdot 10^{6}$ Гс) изменения энергии всех состояний $dd\mu$ и $dt\mu$ составляют $\lesssim$ 0,1 мэВ. Отсюда следует, что при $\gamma < 10^{-3}$ магнитное поле практически не влияет на резонансное образование мезомолекул.

Автор глубоко благодарен В.С.Мележику за постановку задачи и помощь в работе.

Литература

I. U.Wille, Phys.Rev. A38, 32I0 (I988).

2. J.Shertzer, L.R.Ram-Mohan, D.Dossa. Phys.Rev. A40, 4777 (I989).

3. J.Ozaki, Y.Tomishima. J.Phys.Soc.Jap. 49 (I980) I497.

4. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, ЭЧАЯ, I982, т.I3, с. I336.

5. С.И.Виницкий и др. ЖЭТФ, I980, т. 79, с. 698.

6. M.P.Faifman, L.I.Menshikov, L.I.Ponomarev. Muon Catalyzed Fusion 2 (I988) 285.

7. В.С.Мележик, Препринт ОИЯИ, Д4-89-24I, Дубна, I989; V.S.Melezhik, J.Comp. Phys. 9I (I990).

8. Melezhik V.S. - JINR Preprint, E4-90-294, Dubna, I990.

9. Л.И.Пономарев, Л.Н.Сомов, М.П.Файфман. ЯФ, I979, т.29, с.I33.

I0. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. - JINR Preprint, E4-83-778, Dubna, I983.

II. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, М., Физматгиз, I963

I2. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. ЖЭТФ, I973, т. 65, с. 28.

I3. Виницкий С.И., Вукайлович Ф.Р., Касчиев М.С. - ОИЯИ, Р4-I2842, Дубна, I979.

V.S.Kaschiev, S.I.Vinitsky, F.R.Vukajlovic. Phys.Rev. A22, 557 (I980)

Рукопись поступила в издательский отдел
4 декабря I990 года.