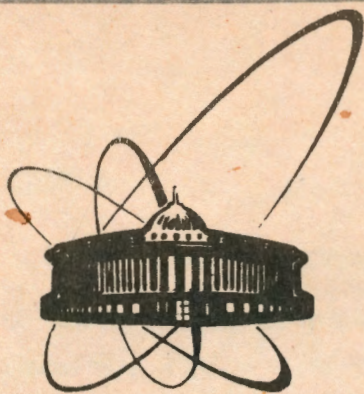


92-152



Объединенный
институт
ядерных
исследований
Дубна

P4-92-152

С.И.Виницкий, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина

ПРОСТОЕ ЭФФЕКТИВНОЕ АДИАБАТИЧЕСКОЕ
ПРЕДСТАВЛЕНИЕ В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕХОДА
КВАЗИСТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ
В СЛАБОСВЯЗАННОЕ ДЛЯ $d\pi$ -МЕЗОМОЛЕКУЛЫ

Направлено в журнал "Ядерная физика"

1992

I. Введение.

Одним из важных результатов в теории мюонного катализа является численное предсказание существования слабосвязанного состояния мезомолекулы $dt\mu$. Это предсказание предшествовало адиабатическим расчетам уровней энергии мезомолекул^{/1/} и было основано на развитой ранее вычислительной схеме расчета характеристик связанных и квазистационарных состояний трехчастичных систем^{/2/}.

В данной работе мы воспроизводим не опубликованные до сих пор результаты, полученные в 1975 году, связывая их с новой трактовкой эффективного двухуровневого адиабатического приближения в геометрических терминах расслоенных гильбертовых пространств^{/3-5/}. Это обстоятельство дает возможность выявить источник различия между вариационными и адиабатическими расчетами^{/6/} и согласовать их.

2. Эффективный адиабатический подход

В эффективном адиабатическом подходе задача рассеяния с закрытыми каналами описывается системой радиальных уравнений Шредингера на полуоси $0 \leq R < \infty$:

$$\left\{ \mathcal{M} \cdot \tilde{\mu}^{-1}(R) \frac{d^2}{dR^2} - \mathcal{M} (2\tilde{Q}(R, M) \frac{d}{dR} + \tilde{V}(R, M)) + \tilde{p}^2 \right\} \tilde{\chi}(R, \tilde{p}) = 0. \quad (1)$$

Здесь $\tilde{p}^2 = 2ME$ - матрица импульсов, $\tilde{Q}(R, M)$ и $\tilde{V}(R, M)$ - новые адиабатические потенциалы, $\mathcal{M} = M/M$ - матрица поправок, учитывающая различие между якобиевскими M и адиабатической M массами в каждом входном и выходном канале реакции, $a, b = t, d, p$:

$$(a\mu)_A + b \rightarrow a + (b\mu)_B, \quad (2)$$

Объяснительный институт
научно-исследовательской
БИБЛИОТЕКА

$\mu(R)$ - эффективная масса, зависящая от расстояния R , удовлетворяющая асимптотическому соотношению

$$\delta M \cdot \mu^{-1}(R) \Big|_{R \rightarrow \infty} \Rightarrow 1 \quad (3)$$

Формирование эффективной массы $\mu(R)$ и новых эффективных потенциалов $\tilde{Q}(R, M)$ и $\tilde{V}(R, M)$:

$$\mu^{-1}(R) = 1 + (2M)^{-1} \Delta \mu^{-1}(R), \quad \tilde{Q}(R, M) = Q(R) + (2M)^{-1} \Delta Q(R),$$

$$\tilde{V}(R, M) = V(R, M) + (2M)^{-1} \Delta V(R), \quad (4)$$

позволяет учесть адиабатические поправки $O(2M)^{-2} \sim 0.01$ к стандартному двухуровневому приближению, определяемому исходными адиабатическими потенциалами $Q(R)$ и $V(R, M)$ с точностью $O(2M)^{-1} \sim 0.1^{1/3}$. Таким образом, эффективный адиабатический подход дает возможность уменьшить погрешность обычного адиабатического приближения до $O(2M)^{-3} \sim 0.001$, не увеличивая число N -уравнений (1), реально соответствующее числу N_0 открытых каналов реакции (2). Этого можно достичь различными способами. Один из них, так называемый простой подход^{/7/}, связан с заменой эффективных потенциалов (4) исходными и выполнением асимптотического соотношения (3) на всей полуоси $0 \leq R < \infty$, т.е. заменой $\mu^{-1}(R)$ его асимптотическим значением $\lim_{R \rightarrow \infty} \mu(R) = \delta M$.

3. Переход квазистационарного состояния $dt\mu$ в связанное

По сути дела последняя процедура использовалась ранее при анализе зависимости энергии E и ширины Γ квазистационарного состояния ($J=1, v=1$) мезомолекулы $dt\mu$ и моделировании перехода этого состояния при увеличении массы M в соответствующее связанное. Особенности этой процедуры на примере перехода квазистационарного состояния мезомолекулы $dt\mu$ с полным орбитальным моментом $J=2$ в связанное были представлены в цитируемой выше работе^{/2/}.

В обычном адиабатическом подходе мезомолекуле $dt\mu$ соответствует значение приведенной массы ядер $M=10.894$ (в единицах приведен-

ной массы мюона $m^* = 202.024 m_e$). Для этой массы M было найдено квазистационарное состояние с энергией $E = E = 0.68$ эВ и шириной $\Gamma = 10.87$ эВ. На рис.1 изображены соответствующие радиальные волновые функции $\chi_1^{(1)}$ открытого и $\chi_2^{(1)}$ закрытого каналов упругого рассеяния

$$(t\mu)_{n=1} + d \rightarrow (t\mu)_{n=1} + d. \quad (2a)$$

На рис.2 показано изменение энергии E и ширины Γ при увеличении массы M . При значении массы $M \approx 11.01$ получается состояние с нулевыми энергией $E = 0$ и шириной $\Gamma = 0$. Соответствующие радиальные функции представлены на рис.3. Видно, что функция 1 - открытого канала $\chi_1^{(1)}$ затухает значительно медленнее, чем функция $\chi_2^{(1)}$ 2-закрытого канала. При дальнейшем увеличении массы M (см. рис.2) $dt\mu$ - система переходит в связанное состояние, уровень энергии углубляется и при значении $M=11.12$ приобретает "симметричное" значение энергии $E = -0.68$ эВ. Отсюда следует, что при более аккуратном учете неадиабатических поправок $O(2M)^{-2}$ в соответствии с (4) можно ожидать существование слабосвязанного состояния ($J=1, v=1$) мезомолекулы $dt\mu$ с энергией, близкой к указанной. На самом деле вариационные расчеты дают близкое значение энергии $E = -0.66$ эВ^{/8/}, что отвечает в рассмотренном выше простом эффективном адиабатическом подходе массе $M=11.11$. Соответствующие радиальные функции этого слабосвязанного состояния представлены на рис.4, который демонстрирует теперь реальное затухание функции $\chi_1^{(1)}$ на фоне быстрого затухания функции $\chi_2^{(1)}$, учитывающей изотопический эффект $O(2M)^{-1}$. Данный рисунок можно сравнить с графиком недавнего вариационного расчета^{/9/}. В отличие от вариационной функции адиабатическая имеет правильное асимптотическое поведение при $R \rightarrow \infty$. Выполненные расчеты показывают, что изменение адиабатической массы ΔM на $\sim 1\%$ эквивалентно включению ~ 1000 адиабатических состояний^{/10/}, причем изменению энергии ΔE на $\sim 3\%$ отвечает изменение массы ΔM на $\sim 0.1\% = O(2M)^{-3}$.

4. Поправки в эффективном адиабатическом подходе

Как известно, обычный адиабатический подход с какой-либо медленной переменной $X \in B$ сводит исходную многомерную задачу к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов $\chi = \{ \chi_i^{(\nu)}(x, p) \}$, $i = 1, \dots, N$, $\nu = 1, \dots, N_0$:

$$\{ -(I \otimes d_x + A(x))^2 + U(x) - p^2 \} \chi(x, p) = 0 \quad (5)$$

с индуцированным векторным полем $A(x): A_{ij}(x) = \langle i | d_x | j \rangle$, $|j\rangle \in \mathcal{F}_x$. В действительности только первые несколько уравнений $i = 1, \dots, N_0$ соответствуют N_0 -открытым каналам реакции (2), хотя в расчетах необходимо использовать существенно большее число уравнений $N \gg N_0$, например, ^{/II, I2/} Новый адиабатический подход приводит к эффективной системе уравнений

$$\{ -(I \otimes d_x + A(x))^2 + m(x)(V(x) - p^2) + (d_x A(x) + A^2(x)) \} \psi(x, \tilde{p}) = 0 \quad (6)$$

для новых коэффициентов $\psi_i^{(\nu)}(x, \tilde{p})$, $i = 1, \dots, N_0$, связанных с исходными каноническим преобразованием $T = T_x: X \rightarrow \psi$ ^{/3/}.

Заметим, что $\text{diag } A(x) = 1/2 d_x (\ln m^{-1}(x))$

нового оператора связности $A(x)$ согласована с эффективной метрикой $m^{-1}(x)$ на базе B :

$$m_{ii}^{-1}(x) = \delta_{ij} - 4 \sum_{j \neq i} A_{ij}(x) A_{ji}(x) (U_i(x) - U_j(x))^{-1} \quad (7)$$

Принципиальный момент состоит в том, что предлагаемый подход дает правильную вероятностную интерпретацию всех наблюдаемых величин: координаты, импульса, S -матрицы и т.д. Его можно сравнить с известным представлением Фолди-Воутхузена для уравнения Дирака во внешнем поле $A(x)$ ^{/13/}. Представление (6), (7) дает правильную геометрическую интерпретацию эффективных уравнений (I) в терминах расслоенных гильбертовых пространств $\mathcal{H}(\mathcal{F}_x, \pi, B)$. ^{/14/}

В качестве примера проанализируем систему ppm с нулевым орбитальным моментом $J = 0$. На рис. 5 и 6 изображены диагональные эффективная масса $m^{-1}(x)$ и потенциалы $V(x)$ и $U(x)$. В соответствии с обозначениями уравнения (I) здесь приняты следующие переобозначения $X = R$, $m_{ii}^{-1}(x) = \bar{\mu}_{ii}^{-1}(R)$, $V_{ii}(x) = \bar{V}_{ii}(R, M)$, $U_{ii}(x) = V(R, M)$. Отличие между $\bar{\mu}_{ii}^{-1}(R)$ и правильным асимптотическим значением

$$\bar{\mu}_{ii}^{-1}(\infty) = 1 - (2M)^{-1} \cdot 1/2 = 0.95 \quad (8)$$

составляет ~5% на всем интервале изменения $R \in B = \mathbb{R}_+^1$. Эффективный потенциал $\bar{V}_{ii}(R, M)$ глубже исходного $V_{ii}(R, M)$ всего на ~0,05%, а в остальном практически совпадает с ним. Соответствующее ($N_0 = 1$) уравнение (I) дает энергию связи $-\epsilon = 253.0$ эВ, совпадающую с результатами стандартного $N \gg N_0$ -адиабатического приближения типа (5) со стандартной базой $R \in B$ ^{/3/}. Можно ожидать, что замена эффективной массы $M \mu(R)$ ее асимптотическим значением $M \mu(\infty) = \mu$, а эффективного потенциала \bar{V}_{ii} исходным V_{ii} , т.е. так называемый простой подход

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - 5M(2Q(R)) \frac{d}{dr} + V(R, M) + \tilde{p}^2 \right\} \chi(R, \tilde{p}) = 0 \quad (Ia)$$

обеспечит неплохое нулевое приближение $\dot{\chi}$ при $\epsilon = \tilde{p}^2/2\mu$.

Действительно, простой подход для ppm приводит к энергии связи $-\epsilon = 252.5$ эВ ^{/7/}. Этот результат лучше, чем в стандартном двухуровневом приближении 247.8 эВ и достаточно близок к 253.0 эВ, полученному в "полном" $N \gg N_0 = 1$ адиабатическом расчете. Однако известно, что сечения упругого рассеяния $\bar{\sigma}_{ii} = 0.66 \cdot 10^{-21}$ см² процесса $p\mu(\pi) + p \rightarrow p\mu(\pi) + p$ при энергии столкновения $E = 0.04$ эВ изменяются на три порядка при изменении исходной массы $M = 4.940$ (в единицах $e = \hbar = m_a = 1$) в пределах 10%. В частности, уже в простом подходе с массой $M \rightarrow \mu_a = 5.203$ упругое сечение $\bar{\sigma}_{ii}$ равно $35 \cdot 10^{-21}$ см^{2/7/}, что достаточно близко к величине $41 \cdot 10^{-21}$ см², полученной в "полном" ($N \gg N_0 = 1$) адиабатическом расчете, с учетом кинематической связи каналов ^{/II, I2/}. Отметим, что "полный" адиабатический

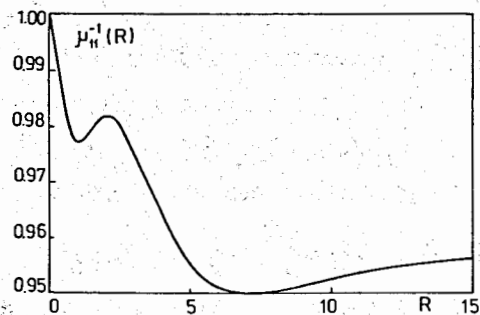


Рис.5. Эффективная масса $\mu_n^{-1}(R)$ мезомолекулы ppm ($J=0$)

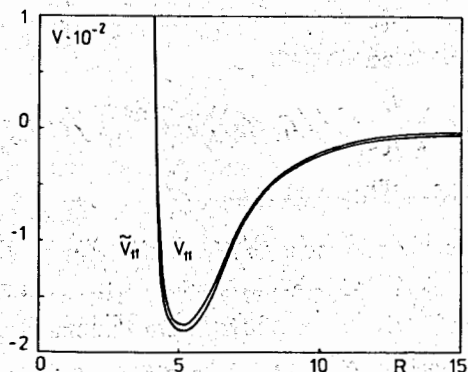


Рис.6. Эффективный \tilde{V} и адиабатический V потенциалы мезомолекулы ppm ($J=0$)

расчет включает ~ 52 состояния дискретного (д) и ~ 300 состояний непрерывного (н) спектров задачи двух центров. Известно, что $\sim 56\%$ от асимптотического значения $1/2$, которое дает правило сумм Томаса-Рейхе-Куна

$$4 \sum_{j \neq i} q_{ij}^0 q_{ji}^0 (E_i^0 - E_j^0)^{-1} = \sum_j \langle i | \partial_z | j \rangle \langle j | z | i \rangle = \frac{1}{2} \quad (9)$$

в приведенную массу (8), приходится на долю д-состояний и $\sim 44\%$ - на долю н-состояний задачи двух центров. Как следует из асимптотик матричных элементов д-спектра, асимптотическое значение ~ 0.28 насыщается с точностью $\sim 7\%$ при учете первых четырех оболочек ($n=4$) разьединенного атома. Однако остаток ~ 0.22 н-спектра насыщается локально, т.е. необходимое число состояний н-спектра задачи двух центров растет с ростом R в соответствии с очевидным соотношением $l = kR$, что видно, например, на рис.5. При фиксированном числе базисных функций ~ 352 их достаточно для насыщения правила сумм типа (9) в области действия эффективного потенциала $\tilde{V}(R, M)$: $4 \leq R \leq 12 \approx R_0$ (см. рис.6), но недостаточно для насыщения в асимптотической области $R_0 < R_m < R < \infty$. Теперь становится ясным смысл процедуры перехода от p^2 к $\tilde{p}^2 = \mu(\infty) p^2$, которая обеспечивает хорошее приближение для S -матрицы рассеяния и позволяет избежать зависимости эффективной массы $\mu(R)$ и соответственно эффективного импульса \tilde{p} от точки сшивки $R = R_m$, в локально полном адиабатическом базисе.

При формировании граничных условий для системы N -адиабатических уравнений на интервале $0 \leq R \leq R_m$ в стандартном адиабатическом базисе с помощью известных асимптотик в точке сшивки $R = R_m$ для каждого $i = \overline{1, N}$ канала вместо точных значений вибрационной $\mu(\infty)$ и ротационной масс $\nu(\infty)$ можно использовать также их приближенные значения на границе $R_0 \leq R \leq R_m$ области действия эффективного потенциала, т.е. ^{13/}

$$M_{ii}^{-1} = \delta_{ij} - \begin{pmatrix} Ma^2 & 0 \\ 0 & Mb^{-1}b^2 \end{pmatrix} \cdot 8 \sum_{j \neq i} \frac{q_{ij} q_{ji}}{E_i - E_j} \quad (10)$$

$$y_{ii}^{-1} = \delta_{ij} + \begin{pmatrix} Ma^2 & 0 \\ 0 & M\delta^{-1}b^2 \end{pmatrix} \sum_{j \neq i}^N \frac{\langle i|p+ij\rangle \langle j|p-ii\rangle}{E_i - E_j}$$

Тогда необходимо учесть вклад от соответствующего эффективного потенциала $\Delta V(R, M)$ на интервале $R_0 < R < \infty$ помощью теории возмущений или какой-либо иной итерационно-вариационной процедуры, обеспечивающей односторонние оценки для S -матрицы реакции^{/14/}. На самом деле подстановка приближенных значений эффективных масс в точке сшивки $R = R_m$ использовалась в работе^{/11/}, а в точке $R = R_0 < R_m$ в работе^{/12/}. Последний выбор оказывается практически более удобным, поскольку позволяет избежать зависимости от точки сшивки R_m , которая сдвигается в сторону больших R при уменьшении \tilde{p}_i^2 . Поведение упругого сечения $p\mu(1+) + p \rightarrow p\mu(1+) + p$, вычисленное с учетом и без учета соответствующей эффективной поправки $\Delta V(R, M)$ в работе^{/12/}, позволяет убедиться в том, что свойство локальной полноты адиабатического базиса, как части геометрической конструкции соответствующего гильбертова расслоения $\mathcal{H}(F_x, \pi, B)$, необходимо учитывать в практических расчетах при конечном числе состояний $N = N(R_0)$.

Свойство локальной полноты состояний непрерывного спектра задачи двух центров следует учитывать и при расчете слабосвязанных состояний подобных $dd\mu$ и $dt\mu$ мезомолекул, для которых уже простой подход дает неплохие оценки связи 2.3 эВ и 0.58 эВ соответственно^{/7/}. Отметим, что для таких состояний область действия эффективного потенциала за счет включения центробежного потенциала увеличивается по сравнению с состояниями с нулевым орбитальным моментом. В качестве примера укажем величины средних расстояний -10 м.а.е. в мезомолекулах $dd\mu$ и $dt\mu$. Поэтому описанную выше процедуру, позволяющую уточнять асимптотическое поведение эффективных потенциалов $\tilde{V}(R, M)$ на интервале $R_0 < R < \infty$, можно использовать для уточнения адиабатических оценок уровней энергии слабосвязанных состояний $dd\mu$ и $dt\mu$, выполненных в стандартном базисе при фиксированном числе состояний.

Аналогичное утверждение было сформулировано при сравнительном анализе вариационных и адиабатических расчетов в обзоре^{/6/}. Напомним, что для оценки ошибок решения задачи с фиксированной системой эффективных потенциалов в оригинальной работе^{/10/} был выполнен многопараметрический анализ точности решения исходной задачи. Так для оценки сходимости адиабатического разложения были проведены серии расчетов при различных $N \leq 884$. Использовались экстраполяции по параметрам $N \rightarrow \infty$, $k_{min} \rightarrow 0$ и по параметрам $R_{max} \rightarrow \infty$, $\Delta R \rightarrow 0$, $k_{max} \rightarrow \infty$, $\Delta k \rightarrow 0$. Однако экстраполяция энергии слабосвязанных состояний $dd\mu$ и $dt\mu$ от $S_{max} = (\ell, m)$ проводилась при значениях $R_m \gg R_0$ границы области действия эффективного потенциала, где свойство локальной полноты стандартного базиса при выбранных значениях $S_{max} \sim kR$ не выполнялось. Значение S_{max} выбиралось из условия локальной полноты в области $R \leq R_0$ действия эффективного потенциала $V(R, M)$ ^{/15/}. Для того, чтобы грубо оценить допущенную погрешность с помощью изложенной выше схемы уточнения, достаточно принять во внимание отличие в эффективной массе $\sim 1\%$ в области $R_0 \leq R < \infty$. Тогда мы можем оценить соответствующие погрешности $-\epsilon_{ii}(dd\mu) = 0.019$ эВ и $-\epsilon_{ii}(dt\mu) = 0.006$ эВ, которые составляют $\sim 1\%$ от полученных ранее^{/10/}. Это замечание a posteriori подтверждает приведенные выше оценки точности адиабатических расчетов.

5. Заключение

Представленный подход обобщает различные адиабатические представления в задаче трех тел. В его рамках интерпретировано предсказание существования слабосвязанного состояния $dt\mu$ -мезомолекулы, и устранено расхождение между вариационными и адиабатическими расчетами. Перспективы применения связаны с расчетами процессов рассеяния и перезарядки мезоатомов на ядрах изотопов водорода. В сравнении со стандартными громоздкими многоканальными адиабатическими расчетами с $N \gg N_0$ даже эффективное двухуровневое приближение $N = N_0 = 2$ на стандартной базе $R \in B$ может обеспечить точность расчетов сечений мезоатомных процессов $\sim 10\%$, вполне достаточную для описания экспериментальных данных.

Литература

1. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов, М.П.Файфман. ЖЭТФ, 1978, т.74, с.849.
2. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. JINR Report P4-3884, Dubna, 1975; J.Comput.Phys. 1976, v.22, p.125.
3. L.I.Ponomarev, S.I.Vinitsky, F.R.Vukajlovich. JINR Report P4-I2018 Dubna, 1978; J.Phys.B. 1980, v.13, p.847.
4. K.A.Makarov, Yu.A.Kuperin, B.S.Pavlov, V.M.Dubovik, B.L.Markovski, S.I.Vinitsky. FUB-HEP/87-11, Report Frien Universitat, Berlin, Germany, 1987.
5. Ю.А.Куперин, Ю.Б.Мельников. Математические заметки, 1990. Т. 182, N 2, с.236.
6. I.V.Puzynin, S.I.Vinitsky. Muon Catalyzed Fusion, 1988, v.3, p.307.
7. Л.И.Пономарев, Л.Н.Сомов, М.П.Файфман. ЯФ, 1979, т.29, вып.1, с.133.
8. V.I.Korobov, I.V.Puzynin, S.I.Vinitsky. Phys. Lett. B., 1987, v.96, p.272; JINR Report E4-91-288, Dubna, 1991.
9. G.A.Aissing, H.J.Monkhorst, Yu.V.Petrov. Phys.Rev. A. 1990, v.42, N 11, p.6894.
10. A.D.Gocheva, V.V.Gusev, V.S.Melezhhik, L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina, L.N.Somov, S.I.Vinitsky. Phys. Lett. B, 1985, v.153, N 6, p.349.
11. В.С.Мележик, Л.И.Пономарев, М.П.Файфман. ЖЭТФ, 1983, т.58, 254.
12. L.Bracci, C.Chiccoli, P.Pasini, G.Fiorentini, V.S.Melezhhik, J.Wozniak. Nuovo Cimento B, 1990, v.195. N 4, p.459.
13. L.Foldy and S.Wouthysen. Phys.Rev. 1950, v.78, p.29.
14. С.И.Виницкий, И.В.Пузынин, Ю.С.Смирнов. ЯФ 1990, т.52, вып.4(10), с.1176.
15. С.И.Виницкий, В.С.Мележик, Л.И.Пономарев. ЖЭТФ, 1982, т.79, вып. 3(9), с.698.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 апреля 1992 года.

Виницкий С.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. P4-92-152
Простое эффективное адиабатическое представление
в задаче трех тел и моделирование перехода
квазистационарного состояния
в слабосвязанное для $dt\mu$ -мезомолекулы

Представлен эффективный адиабатический подход к анализу трехчастичных взаимодействий, позволяющий даже в простом двухуровневом приближении отразить все качественные особенности мезоатомных резонансных реакций и получить хорошее количественное согласие с различными трудоемкими расчетами.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Vinitsky S.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. P4-92-152
Simple Effective Adiabatic Representation
for Three-Body Problem and Modelling the
Transition of Quasistationary State in
Weakly Bound State for $dt\mu$ Mesic Molecule

The effective adiabatic approach to analysis of three-particle interaction is presented. It gives possibility to represent even in a simple two-level approximation all quality peculiarities of mesic atomic resonance reactions and to obtain good quantitative agreement with different cumbersome calculations.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1992