

УДК 517.972.5: 539.189.1

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

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

Выполнены вариационные расчеты уровней энергии ϵ_{II} и γ -факторов слабосвязанных состояний $J = 1$, $v = 1$ мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$, представляющих наибольший интерес для мюонного катализа. В расчетах использовано ~ 1500 опорных функций, что позволило получить наиболее точные, по сравнению с известными, результаты: $\epsilon_{II}(dd\mu) = (-1,9749 \pm 0,0002)$ эВ, $\epsilon_{II}(dt\mu) = (-0,663 \pm 0,002)$ эВ.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Variational Calculation of Characteristics
of Weakly Bound Rotational-Vibrational States
of Mesic Molecules $dd\mu$ and $dt\mu$

S.I.Vinitsky, V.I.Korobov, I.V.Puzynin

Variational calculations of energy levels of ϵ_{II} and γ -factors of weakly bound states ($J = 1$, $V = 1$) of mesic molecules $dd\mu$ and $dt\mu$, which are of main interest for muon-catalysed fusion, are performed. The set of ~ 1500 basic functions has been used in calculations which has enabled us to obtain the most precise results: $\epsilon_{II}(dd\mu) = -1.9749 \pm 0.0002$ eV, $\epsilon_{II}(dt\mu) = -0.663 \pm 0.002$ eV.

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

Явление резонансного образования мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в реакциях $d\mu + D_2 \rightarrow [(dd\mu)dee]^*$, $t\mu + D_2 \rightarrow [(dt\mu)dee]^*$

и т.д. в настоящее время интенсивно изучается как теоретически^{1/}, так и экспериментально^{2/}. Критическим пунктом в расчетах скоростей этих реакций является знание нерелятивистских уровней энергий ϵ_{Jv} слабосвязанных состояний /ССС/ мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ с полным орбитальным моментом $J=1$, с полной четностью $\lambda=-1$ и вибрационным числом $v=1$. Характерные размеры мезомолекул в ССС составляют величину ~ 10 мезоатомных единиц. Энергия связи этих состояний ~ 1 эВ при глубине эффективных потенциалов ~ 600 эВ, тре-

буемая точность вычислений составляет $\sim 10^{-3}$ эВ. Это соответствует относительной точности $\sim 10^{-6}$ и не менее 7 знакам в полной энергии мезомолекулы $E = E_a + \epsilon_{11}$, так как энергии мезоатомов $d\mu$ и $t\mu$ равны $E_a(d\mu) = -2663,2303$ эВ и $E_a(t\mu) = -2711, 2728$ эВ. Такие характеристики ССС $dd\mu$ и $dt\mu$ долгое время не позволяли провести удачные вариационные расчеты. До недавнего времени расчеты этих состояний были проведены лишь в адиабатическом представлении задачи трех тел^{/3,4/}, однако они стимулировали развитие вариационных методов в этой задаче^{/5-9/}. В работах^{/6,7/} было показано, что обычные хиллераасовские функции не являются оптимальными. Для их улучшения было предложено^{/7/} вводить две группы нелинейных параметров, с тем чтобы более аккуратно учитывать делокализованный характер волновой функции /ВФ/. В работе^{/8/} было дано обобщение экспоненциального базиса, который успешно использовался в расчетах состояний мезомолекул с $J = 0$ ^{/5/}. Следует отметить, что экспоненциальный базис хорошо приспособлен для расчета гелиевоподобных систем, при наличии же делокализации и изотопических эффектов /т.е. "разных электронов"/ требуется дополнительная группа вариационных параметров^{/9/}.

В данной работе /см. также^{/10/} используются вариационные функции молекулярного типа в сфероидальных координатах $\Omega = \{\xi, \eta, R\}$, которые были предложены для расчета вращательных состояний симметричных мезомолекул в^{/11/}. В отличие от^{/11/} мы ввели две группы вариационных параметров, позволяющие лучше аппроксимировать делокализацию ВФ, а также учли приближенную $p \equiv (g, u)$ симметрию для мезомолекулы $dt\mu$. В молекулярном представлении ВФ имеет две компоненты $F^{1-} = F_{\sigma}^{1-} + F_{\pi}^{1-}$, которые были выбраны в виде $F_{\sigma}^{1-} = F_{\sigma g}^{1-} + F_{\sigma u}^{1-}$ и $F_{\pi}^{1-} = F_{\pi g}^{1-} + F_{\pi u}^{1-}$,

$$F_{\sigma p}^{1-} = \sum_{t=1}^2 \sum_{ijk(p)} a_{ijk(p)}^{(\sigma tp)} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{k(p)-1} e^{-(\alpha tp + \beta tp \xi) R},$$

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

$$F_{\pi p}^{1-} = \sum_{t=1}^2 \sum_{ijk(p)} a_{ijk(p)}^{(\pi tp)} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{\frac{1}{2}} R^{i-1} \xi^{j-1} \eta^{k(p)-1} \times \\ \times e^{-(\gamma tp + \nu tp \xi) R},$$

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

Значения нелинейных параметров приведены в табл.1. Выбирались специальные последовательности опорных функций по индексам i, j, k , улучшающие свойства матриц алгебраической задачи на собственные значения:

$$AX = E_{J\nu} BX, X = \{x_1, \dots, x_n\} = \{a_{ijk(p)}^{(\sigma tp)}, a_{ijk(p)}^{(\pi tp)}\},$$

Таблица 1

Значения нелинейных параметров вариационных функций в единицах - для $dd\mu$: $e=h=m_{d\mu}^{-1}=M_d^{-1}+M_\mu^{-1}$,
 для $dt\mu$: $e=h=m_{t\mu}^{-1}=M_t^{-1}+M_\mu^{-1}$

	p	α_1	β_1	α_2	β_2	γ_1	ν_1	γ_2	ν_2
$dd\mu$	g	1,7979	0,7063	0,0005	0,05137	1,7979	0,7192	0,0051	0,5651
$dt\mu$	g	2,3345	0,6851	0,0051	0,5836	2,0300	0,7105	0,0507	0,6090
	u	1,2180	0,4314	0,0005	0,4314	2,0300	0,7105	0,0507	0,6090

к которой сводится реализация принципа минимакса/12,10/ для энергии исходного уравнения Шредингера на системе n опорных функций. Эта задача решалась на ЭВМ ЕС-1061 методом обратных итераций с регуляризованной матрицей $\tilde{B} = B + \epsilon I$, $0 < \epsilon \ll 1$ в арифметике с четверной точностью. При этом ошибка составила менее 10^{-5} эВ. Расчеты выполнены на увеличивающихся наборах n опорных функций. Экстраполяция результатов проводилась с помощью широко используемой в вариационных расчетах формулы $\epsilon_{11} = \epsilon_{11}(n) + cn^{-\alpha}$.

Таблица 2

Сходимость значений энергии связи - ϵ_{11} (эВ) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ при увеличении числа n опорных функций

- $\epsilon_{11}(dd\mu)$	1,97274	1,97368	1,97431	1,97465	1,9749± ±0,0002
n	449	607	819	1286	экстраполяция
- $\epsilon_{11}(dt\mu)$	0,64772	0,65228	0,65371	0,65889	0,663 ± ± 0,002
n	568	844	982	1495	экстраполяция

Результаты расчетов представлены в табл.2. Были использованы следующие значения масс частиц /в единицах M_e /: $M_t = 5496,918$, $M_d = 3670,481$, $M_\mu = 206,769$, и значение переводного коэффициента /в эВ/: $R_\gamma = 13,605804$ эВ. В табл.3 дано сравнение полученных результатов с результатами лучших адиабатических и вариационных расчетов. Оно свидетельствует о согласованности и более высокой точности проведенных здесь вычислений.

Таблица 3

Сравнение значений энергии связи - ϵ_{11} (эВ)
мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ в различных расчетах

работа	/4/	/5/	/8/	данная работа
- $\epsilon_{11}(dd)$	1,956	1,862	1,97110	1,97465
n	844	364	350	1286
экстрапол.	-	1,87	1,972±0,001	1,9749±0,0002
работа	/4/	/7/	/8/	данная работа
- $\epsilon_{11}(dt\mu)$	0,656	0,628	0,60719	0,65889
n	844	440	400	1495
экстрапол.	-	-	0,6554±0,0150	0,663±0,002

Найденные ВФ были использованы для вычислений γ -факторов^{/13/} мезомолекулы $dd\mu$

$$2\gamma_{d\mu}^{11} = \int R^2 dR [F_{\sigma}^{1-}(dd\mu)(\xi, n, R) \Big|_{\substack{\xi=1 \\ \eta=\pm 1}}]^2, (e=\hbar=m_{d\mu}=1, m_{d\mu}^{-1}=m_d^{-1}+m_{\mu}^{-1})$$

и мезомолекулы $dt\mu$

$$2\gamma_{t\mu}^{11} = \int R^2 dR [F_{\sigma}^{1-}(dt\mu)(\xi, n, R) \Big|_{\substack{\xi=1 \\ \eta=-1}}]^2, (e=\hbar=m_{t\mu}=1, m_{t\mu}^{-1}=m_t^{-1}+m_{\mu}^{-1})$$

$$2\gamma_{d\mu}^{11} = (m_{t\mu}/m_{d\mu})^3 \int R^2 dR [F_{\sigma}^{1-}(dt\mu)(\xi, n, R) \Big|_{\eta=+1}]^2,$$

которые определяют отношение вероятностей нахождения мюона в окрестности ядра рассматриваемой мезомолекулы и соответствующем мезоатоме. Получены следующие значения γ -факторов: $dd\mu - \gamma_{d\mu}^{11} = 0,4965$; $dt\mu - \gamma_{t\mu}^{11} = 0,798$, $\gamma_{d\mu}^{11} = 0,199$. Они могут быть использованы для вычисления сверхтонкой структуры слабосвязанных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ ^{/14/}.

В заключение авторы выражают благодарность Н.Н.Говоруну за поддержку и Л.И.Пономареву за обсуждение работы.

Литература

1. Веницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1978, 74, с.849;
Leon M.Phys.Rev.Lett., 1984, 42, p.605;
Меньшиков Л.И. ЯФ, 1985, 42, с.1184.
2. Быстрицкий В.М. и др. ЖЭТФ, 1979, т.76, с.460;
Jones S.E. et al. Phys.Rev.Lett., 1983, 51, p.1757.
3. Веницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1980, 79, с.698.
4. Gocheva A.D. et al. Phys.Lett.B., 1985, 153, p.349.
5. Демков Ю.Н., Филинский А.В. В кн.: Тезисы Всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров. Изд-во АН БССР, Минск, 1983, с.22.
6. Bhatia A.K., Drachman R.J. Phys.Rev., 1984, 30, p.2138.
7. Chi-Ju Hu. Phys.Rev., 1985, 32, p.1245.
8. Frolov A.M., Efros V.D. J.Phys.B., 1985, 18, p.1265.
9. Эфрос В.Д. ЖЭТФ, 1986, 90, с.10.
10. Веницкий С.И., Коробов В.И., Пузынин И.В. ОИЯИ, Р4-85-917, Дубна, 1985.
11. Halpern A. Phys.Rev.Lett., 1964, 13, p.660.
12. Михлин С.Г. Численная реализация вариационных методов. "Наука", М., 1966.
13. Бакалов Д. ОИЯИ, 4-80-409, Дубна, 1980.
14. Bakalov D. et al. Phys.Lett.B., 1985, 161, p.5.

Рукопись поступила 21 июля 1986 года.