

УТОЧНЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ СЛАБОВСЯЗАННЫХ ВРАЩАТЕЛЬНО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ МЕЗОМОЛЕКУЛ dd_μ И dt_μ

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

Выполнены уточненные вариационные расчеты уровней энергии ϵ_{11} слабосвязанных вращательно-колебательных состояний ($J = 1$, $v = 1$) мезомолекул dd_μ и dt_μ . Использованы большее число (до 2000) базисных функций, лучшее распределение степеней независимых переменных, уточненные значения нелинейных параметров, а также более точное значение массы мюона. Получены следующие экстраполированные результаты: $-\epsilon_{11}(dd_\mu) = (1,9750 \pm \pm 0,0002)$ эВ и $-\epsilon_{11}(dt_\mu) = (0,6604 \pm 0,0002)$ эВ.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

More Accurate Calculation of the Energy Levels of Weakly Bound Rotation-Vibrational States of Mesic Molecules dd_μ and dt_μ

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

More accurate variational calculations are performed for energy levels ϵ_{11} of weakly bound rotation-vibrational states ($J = 1$ and $v = 1$) of mesic molecules dd_μ and dt_μ . To this end, use has been made of a great number (up to 2000) of basis functions, a better distribution of powers of independent variables, more accurate values of nonlinear parameters, and of a more accurate value of the muon mass. The results of extrapolation are as follows: $-\epsilon_{11}(dd_\mu) = (1,9750 \pm 0,0002)$ eV, $-\epsilon_{11}(dt_\mu) = (0,6604 \pm 0,0002)$ eV.

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

В нашей предыдущей работе ^{1/} была развита вариационная схема расчета энергии связи системы трех кулоновских частиц с базисными функциями молекулярного типа в сфероидальной системе координат. С ее помощью были проведены вариационные расчеты и получены следующие оценки для уровней энергии мезомолекул dd_μ и dt_μ : $-\epsilon_{11}(dd_\mu) = (1,9749 \pm 0,0002)$ эВ и $-\epsilon_{11}(dt_\mu) = (0,663 \pm 0,002)$ эВ. Отметим, что, несмотря на то, что в расчете для мезомолекулы dt_μ использовалось до 1500

опорных функций, качество расчета и точность экстраполированного результата уступают вычислениям, выполненным для мезомолекулы dd_μ . Это объясняется прежде всего (g, u) асимметрией мезомолекулы dt_μ и сложностью ее учета. Для повышения качества расчета требуется найти оптимальные распределения степеней независимых переменных ξ, η, R в каждом наборе опорных функций. Кроме того, энергия связи dt_μ в три раза меньше, чем dd_μ , т.е. значительно ближе к границе континуума, а это требует также более тщательного подбора нелинейных параметров в вариационной волновой функции. Для проведения обработки последних экспериментов по мюонному катализу ^{/2/} необходимо улучшить точность расчетов для мезомолекулы dt_μ .

В соответствии с вышеизложенным нами выполнена следующая модификация вариационной схемы ^{/1/} для мезомолекулы dt_μ :

1. Найдены лучшие распределения степеней независимых переменных ξ, η, R и нелинейных параметров в вариационных функциях (см. табл. 1). Это позволило улучшить качество вариационных расчетов в смысле достижения более глубокого минимума вариационного функционала на меньшем числе базисных функций.

2. Проведена модификация программы, позволившая увеличить число опорных функций в предельном расчете до 2000.

Анализ прежних расчетов ^{/1/} для мезомолекулы dd_μ с экстраполяционной формулой

$$\epsilon_{11}(n) = \epsilon_{11}(\infty) + c n^{-\alpha}, \quad (1)$$

принятой в вариационных расчетах, показал, что сходимость по числу опорных функций близка к квадратичной, т.е. $\alpha \approx 2$. Это свидетельствует о хорошем качестве данного расчета и полученной

Таблица 1

Значения нелинейных параметров вариационной функции dt_μ
(использовалась следующая система единиц: $e = \hbar = \tilde{m}_\mu = 1$)

$$\tilde{m}_\mu = M_t \tilde{m}_\mu / (M_t + \tilde{m}_\mu) *$$

	α_1	β_1	α_2	β_2	γ_1	ν_1	γ_2	ν_2	
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

* Значения массы мюона $\tilde{m}_\mu = 206,7686 m_e$, значение массы тритона $M_t = 5496,918 m_e$ ^{/3/}.

Таблица 2

Сходимость энергии связи $-\epsilon_{11}$
для мезомолекулы $dd\mu$ (в эВ)

i	n_i	$-\epsilon_{11}(n_i)^{1/1}$ $m_\mu = 206,769 m_e$	$-\epsilon_{11}(n)$ $\tilde{m}_\mu = 206,7686 m_e$
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 *
	∞	$1,9749 \pm 0,0002$	$1,9750 \pm 0,0002$

*Значение было получено с помощью предыдущего расчета с учетом поправки на новую массу мюона \tilde{m} . Значение массы дейтрона $M_d = 3670,481 m_e$, $R_y = 13,605804$ эВ^{3/2}.

экстраполяционной оценки. Однако в этих расчетах использовалось округленное значение массы мюона $m_\mu = 206,769 m_e$, точность задания которого сопоставима с оценкой точности экстраполированного значения $\epsilon_{11}(dd\mu)$.

Представляет интерес узнать, насколько изменится значение энергии связи $dd\mu$ при использовании массы мюона с большим числом знаков $\tilde{m}_\mu = 206,7686 m_e^{3/2}$. Результаты такого исследования приведены в табл. 2. Из таблицы видно, что значения уровней энергии, вычисленные при разных массах m_μ и \tilde{m}_μ для $n = 304, 449, 607, 819$, отличаются на величину $\sim 10^{-4}$ эВ, и это отличие практически не зависит от n . Поэтому мы не проводили трудоемкий расчет с $n = 1286$, а ввели необходимую поправку в значение энергии $\epsilon_{11}(1286)$, вычисленное при прежнем m_μ . Таким образом, погрешность в вычисленном значении $-\epsilon_{11}$ энергии связи $dd\mu$ сравнима с известной на сегодняшний день точностью масс частиц.

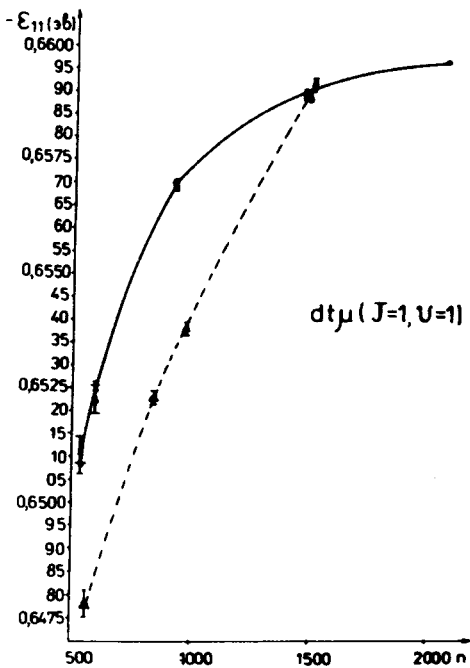
В табл. 3 приведены результаты уточненных расчетов энергии связи $-\epsilon_{11}$ мезомолекулы $dt\mu$. В ней же для сравнения даны значения энергии, полученные ранее^{1/1}. Сравнение показывает, что новые результаты являются лучшими, в смысле достижения более глубокого минимума вариационного функционала. Экстраполированное значение ϵ_{11} для новой массы мюона \tilde{m}_μ было найдено из условия минимума функционала

$$\Phi(\epsilon_{11}, C, \alpha) = \sum_{i=1}^m [\epsilon_{11}(n_i) - \epsilon_{11} - C n_i^{-\alpha}]^2 / (\beta n_i^{-2}), \quad (2)$$

Значения энергии связи $-\epsilon_{11}$ (эВ)
для мезомолекулы $dt\mu$

n	$-\epsilon_{11}(n) / 1/$	$-\epsilon_{11}(n)$	$-\epsilon_{11}(n, \alpha, C, \epsilon_{11}(\infty))$	Δ
542	—	0,65114	0,65085	0,00029
568	0,64772	—	—	—
596	—	0,65223	0,65245	-0,00022
844	0,65228	—	—	—
927	—	0,65691	0,65702	-0,00011
982	0,65371	—	—	—
1483	—	0,65889	0,65903	-0,00014
1495	0,65889	—	—	—
1513	—	0,65923	0,65908	0,00015
2084	—	0,65968	0,65969	-0,00001
∞	$0,663 \pm 0,002$	$0,6604 \pm 0,0002$		

где m — число серий, β — нормировочный множитель. Этот функционал соответствует экстраполяционной формуле (1), при этом значение показателя $\alpha \approx 2$.



Для наглядности эти результаты представлены на графике (см. рис.). Теоретическая кривая (1) проведена также при значениях параметров ϵ_{11} , C и α , найденных из условия минимума функционала (2). Вычисленные точки хорошо ложатся на эту кривую. Тем самым мы достигли такого же качества вариационного расчета, как в мезомолекуле $dd\mu$. Экст-

Результаты вариационных расчетов энергии связи $-\epsilon_{11}(n)$ $dt\mu$: \circ — расчет данной работы, \bullet — точки кривой (1) при значениях параметров $-\epsilon_{11}(\infty) = 0,6604$ эВ, $C = -1869,2$ эВ, $\alpha = 1,9355$; \blacktriangle — расчет работы $1/1/$.

раполированное значение энергии равно $-\epsilon_{11}(dt\mu) = (0,6604 \pm \pm 0,0002) \text{ эВ}$, что соответствует точности расчетов для $dd\mu$ -мезомолекулы.

Полученные в данной работе экстраполированные значения уровней энергии ϵ_{11} слабосвязанных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ являются основой для обработки экспериментов по измерению скорости резонансного образования этих молекул ^{/4/}.

В заключение авторы благодарят Н.Н.Говоруна за поддержку работы и Л.И.Пономарева за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Веницкий С.И., Коробов В.И., Пузынин И.В. — ЖЭТФ, 1986, т.91, с.705; Краткие сообщения ОИЯИ № 19-86, Дубна, 1986, с.40.
2. Balin D.V. et al. — Phys. Lett., 1984, 141B, p.173;
Breunlich W.N. et al. — Invited paper presented at the International Symposium on Muon Catalized Fusion, Tokyo, Japan, Sept. 1-3, 1986; Preprint LBL-22560, Berkley, 1986.
3. Cohen E.R. — Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1976, v.18, p.587; Wapstra A.N., Bos K. — Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1977, v.19, p.175.
4. Веницкий С.И. и др. — ЖЭТФ, 1978, т.74, с.849; Ponomarev L.I., Fiorentini G. — Invited paper presented at the International Symposium on Muon Catalized Fusion, Tokyo, Japan, September 1-3, 1986; Preprint IFUP-TH 27/86, Pisa, 1986.

Рукопись поступила 31 марта 1987 года.