

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ПОПРАВКИ К УРОВНЯМ ЭНЕРГИИ СЛАБОСВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ МЕЗОМОЛЕКУЛ $dd\mu$ И $dt\mu$

Д.Д.Бакалов, В.И.Коробов

Выполнены расчеты релятивистских сдвигов и сверхтонкого расщепления энергетических уровней с учетом электромагнитной структуры ядер для слабосвязанных состояний ($J = v = 1$) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$. В вычислениях использовались полученные вариационным методом приближенные волновые функции, которые воспроизводят с погрешностью не более 0,5 мэВ точное значение нерелятивистского уровня энергии. Представленные результаты необходимы для исследования возникающих в мюонном катализе процессов образования мезомолекул.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Relativistic Corrections to Energy Levels of Weakly Bound States of Mesic Molecules $dd\mu$ and $dt\mu$

D.D.Bakalov, V.I.Korobov

Relativistic shift and hyperfine splitting of the energy levels have been calculated with the account of the electromagnetic structure of the nuclei for weakly bound states ($J = v = 1$) of mesic molecules $dd\mu$ and $dt\mu$. There were used the obtained by variational method approximate wave functions which reproduce exact nonrelativistic energy level with no more error than 0.5 meV. The performed results are necessary for the investigation of the mesic molecule formation processes arised in muon catalysed fusion.

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

Резонансный механизм образования мезомолекул через слабосвязанные состояния интенсивно исследуется в последнее время^{1/}. Для правильного определения температурной зависимости скорости протекающей реакции необходимо знать уровни энергии участвующих в ней квантовых систем с точностью до 1 мэВ.

В^{1/2-4/} были получены прецизионные значения нерелятивистских уровней энергии слабосвязанных состояний мезомолекул $dd\mu$

и dt_{μ} . Однако сдвиги уровней, обусловленные такими эффектами, как поляризация вакуума, электромагнитная структура частиц, сверхтонкая структура молекул, имеют величину порядка нескольких десятков мэВ, поэтому учет этих эффектов необходим для корректного описания процесса образования мезомолекул.

До настоящего времени релятивистские поправки к уровням энергии слабосвязанных состояний мезомолекул вычислялись только в рамках адиабатического подхода^{/5/}. В данной работе представлены расчеты, использующие приближенные волновые функции, полученные вариационным методом^{/2/}. Эти приближенные решения с высокой точностью (~ 0,5 мэВ) воспроизводят истинное значение энергии.

1. Постановка задачи и метод вычисления

Для описания взаимодействия частиц в мезомолекуле использовался квазирелятивистский гамильтониан, рассмотренный в работе^{/6/}. Он представляется в виде суммы

$$H = H^{(0)} + H^{(1)}, \quad (1)$$

состоящей из нерелятивистской $H^{(0)}$ и собственно релятивистской $H^{(1)}$ частей. Нерелятивистский член разложения (1) имеет вид

$$H^{(0)} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{ij} U_{ij}^{(0)},$$

где $U_{ij}^{(0)} = Z_i Z_j e^2 / r_{ij} + U_{ij}^{(FSZ)}$, $U^{(FSZ)}$ определяет поправку на конечную электромагнитную структуру неточечных частиц. Член $H^{(1)}$ из (1) описывает эффекты порядка $O(c^{-2})$ во взаимодействии частиц. Он включает в себя взаимодействие Брейта с учетом конечных размеров частиц и взаимодействие с электрон-позитронным полем — поляризацию вакуума.

Релятивистское уравнение Шредингера решалось в первом порядке теории возмущений по c^{-2} . В качестве нулевого приближения рассматривался нерелятивистский гамильтониан с чисто кулоновским взаимодействием. Приближенные решения нерелятивистского уравнения Шредингера, описывающие слабосвязанные состояния мезомолекул, получены в^{/2/} вариационным методом с использованием 1286 опорных функций для $dd\mu$ и 2084 опорных

функций для dt_μ . В представляемых ниже расчетах они брались в качестве решений невозмущенной задачи.

Интегралы, описывающие поправки в первом порядке теории возмущений, оценивались с помощью квадратурных формул^{/7/}. Данный подход позволяет рассчитывать одновременно несколько интегралов, а время счета зависит от числа опорных функций и от количества интегралов линейно. Вследствие сказанного численное интегрирование дает возможность многократно сэкономить время счета по сравнению с точным интегрированием. Для сравнения, время, затраченное на вычисление всех релятивистских интегралов, описывающих поправки к уровню энергии мезомолекулы dt_μ , составляет 10% от времени, необходимого на получение матричных элементов нерелятивистского гамильтониана для опорных функций вариационного метода.

Параллельно с вычислением интегралов для релятивистских поправок оценивались интегралы от функций $|\psi(\cdot)|^2$, $|\psi(\cdot)|^2/r_{ij}$, $i, j = 1, 2, 3$, $i \neq j$, где $\psi(\cdot)$ — используемое приближение к волновой функции. Точное значение первого интеграла равно единице, а три последних составляют среднее по потенциальной энергии кулоновской системы, и по теореме вириала полученное среднее равно удвоенному значению энергии системы. Указанные величины после численного интегрирования восстанавливались с относительной погрешностью $\sim 10^{-6}$. Эти расчеты показывают, что значения релятивистских поправок, рассчитанные с помощью квадратурных формул^{/7/}, имеют ошибку не более 0,1 мэВ.

Наконец, для вычисления поправки на вакуумную поляризацию использовался потенциал Юлинга^{/8/}:

$$U^{(vp)}(r) = -\frac{2}{3} \frac{\alpha e^2}{\pi} \int_1^\infty \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{2x^4} \right) (x^2 - 1)^{1/2} e^{-\kappa r x} dx,$$

описывающий взаимодействие с точностью $O(c^{-2})$. Известно, что интеграл, стоящий в правой части, не выражается в элементарных функциях. В^{/9/} предложена аппроксимация этого интеграла, удобная для реализации на вычислительной машине в виде подпрограммы. Это позволило вычислять поправку на поляризацию вакуума аналогично тому, как вычислялись другие релятивистские поправки.

2. Результаты

Результаты расчетов релятивистских поправок для слабосвязанных состояний мезомолекул dd_μ и dt_μ представлены в табл.1.

Таблица 1. Релятивистские поправки к уровням энергии мезомолекул $d\mu$ и $d\psi$ (в мэВ)

	$d\mu$		$d\psi$	
	Вариант. расчет	Адиаб. расчет ^{5/}	Вариант. расчет	Адиаб. расчет ^{5/}
Энергия ионизации (нерелятивистская)	-1975,0		-660,2	
Поляризация вакуума	+8,7	+9,8	+16,6	+7,3
Электромагнитная структура ядер	-1,5	-1,6	+13,3	+14,6
Релятивистский сдвиг	+1,4	+1,5	+0,1	+0,8

Таблица 2. Сверхтонкая структура уровней энергии основных состояний мезоатомов $d\mu$ и $d\psi$ (в мэВ)

	Пара-состояние	Орто-состояние
$d\mu$	-32,3 (F = 1/2)	+16,2 (F = 3/2)
$d\psi$	-178,9 (F = 0)	+59,3 (F = 1)

Здесь же приводятся результаты расчетов^{5/}, использующих адиабатическое приближение волновой функции. В графе "Релятивистский сдвиг" стоят величины, определяющие чисто релятивистское смещение в мезомолекуле без учета взаимодействия с электрон-позитронным полем и электромагнитной структуры ядер. Из таблицы видно, что наибольший вклад в смещение уровня дает поправка на поляризацию вакуума. Вместе с тем наибольшее расхождение в значениях вариационного и адиабатического расчетов имеется именно в этом члене. Объяснение мы видим в том, что смещение уровней энергии для мезоатома и мезомолекулы, связанное с поляризацией вакуума, на порядок превышает смещение,

Таблица 3. Сверхтонкая структура слабосвязанного состояния $J = v = 1$ мезомолекулы $dd\mu$, ΔE_{JvSI}^{HFS} (в мэВ) и амплитуды вероятности $\beta_{S'I'}$

$dd\mu (J = v = 1)$						
S	I	j	Вариант. расчет	Адиаб. расчет ^{/5/}	$\beta_{1/2 1}$	$\beta_{3/2 1}$
1/2	1	1/2	-15,9	-15,9	0,9999	-0,0161
1/2	1	3/2	-16,1	-16,1	0,9999	-0,0114
3/2	1	1/2	7,6	7,7	0,0161	0,9999
3/2	1	3/2	7,9	7,9	0,0114	0,9999
3/2	1	5/2	8,2	8,2	0	1

Таблица 4. Сверхтонкая структура слабосвязанного состояния $J = v = 1$ мезомолекулы $d\mu$, ΔE_{JvSI}^{HFS} (в мэВ) и амплитуды вероятности $\beta_{S'I'}$

$d\mu$								
S	I	j	Вариант. расчет	Адиаб. расчет ^{/5/}	$\beta_{0,1/2}$	$\beta_{1,1/2}$	$\beta_{1,3/2}$	$\beta_{2,3/2}$
0	1/2	1	+40,8	+40,8	0,9954	-0,0657	0,0453	-0,0525
1	1/2	0	+44,5	+44,6	0	0,8288	-0,5596	0
1	1/2	1	+43,9	+44,0	0,0841	0,8242	-0,5534	0,0855
1	1/2	2	+44,3	+44,4	0	0,8308	-0,5565	-0,0073
1	3/2	0	-142,1	-142,6	0	0,5596	0,8288	0
1	3/2	1	-142,0	-142,4	-0,0011	0,5576	0,8301	-0,0023
1	3/2	2	-142,1	-142,5	0	0,5565	0,8309	-0,0012
2	3/2	1	+49,9	+50,2	0,0453	-0,0730	0,0518	0,9950
2	3/2	2	+50,9	+51,1	0	0,0068	-0,0030	0,9999
2	3/2	3	+50,6	+50,8	0	0	0	1

определяемое остальными поправками, и в результате взаимной аннигиляции при вычитании уровней мезоатома и мезомолекулы оно очень чувствительно к погрешности вычислений.

В табл. 2 приведены величины ΔE_F^{HFS} , представляющие сверхтонкое расщепление уровней энергии основных состояний мезоато-

мов $d\mu$ и $t_{\mu}^{/10/}$. В табл. 3 и 4 представлены значения спиновых поправок ΔE_{JvjSI}^{HFS} к уровням энергии мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ (сверхтонкая структура). Относительно квантовых чисел, определяющих состояние системы $|JvjSI\rangle$, сделаем необходимые пояснения. Числа J (квантовое число полного орбитального момента) и ν (вибрационное квантовое число) описывают состояние нерелятивистской системы бесспиновых частиц. Квантовые числа I и S отвечают операторам суммарного спина ядер и молекулы ($\vec{I} = \vec{S}_a + \vec{S}_b$, $\vec{S} = \vec{I} + \vec{S}_\mu$). Наконец, волновые функции, инвариантные относительно оператора полного углового момента системы ($\vec{J} = \vec{S} + \vec{J}$), представляются квантовым числом j . Коэффициенты β_{SI} , приведенные в табл. 3 и 4, определяют соответствующие уровням сверхтонкого расщепления состояния системы: $|Jvj\rangle = \sum \beta_{SI} |JvjSI\rangle$. Эффекты конечных размеров ядер оказывают заметное влияние на значения поправок сверхтонкой структуры^{/6/} и учитываются в расчетах.

Авторы выражают благодарность Л.И.Пономареву за поддержку в работе.

В работе^{/4/} приводится (со ссылкой на частное сообщение) значение поправки на вакуумную поляризацию 16,7 мэВ, которое хорошо согласуется с соответствующим результатом нашей работы.

Л и т е р а т у р а

1. Fiorentini G., Ponomarev L.I. — Muon Catalysed Fusion, 1987, v.1, p.3.
2. Korobov V.I., Puzynin I.V., Vinitsky S.I. — Phys. Lett. B, 1987, v.196, p.272.
3. Alexander S.A., Monkhorst H.J. — Phys. Rev. A, 1988, v.38, p.26.
4. Kamimura M. — Phys. Rev. A, 1988, v.38, p.621.
5. Bakalov D.D. et al. — Phys. Lett. B, 1985, v.161, p.5.
6. Бакалов Д.Д. — Препринт ОИЯИ Р4-87-616, Дубна, 1987.
7. Бакалов Д.Д. — Сообщение ОИЯИ 11-83-875, Дубна, 1983.
8. Uehling E.A. — Phys. Rev., 1935, v.48, p.55.
9. Fullerton L.W., Rinker C.A. — Phys. Rev. A, 1976, v.13, p.1283.
10. Bakalov D.D. — Phys. Lett. B, 1980, v.93, p.265.

Рукопись поступила 20 марта 1989 года.