

ТОЧНЫЙ МЕТОД В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ И ЭНЕРГИИ СВЯЗИ МЕЗОМОЛЕКУЛ

А. М. Фролов, В. Д. Эфрос

Предлагается эффективный метод решения трехчастичных атомно-молекулярных задач с высокой точностью. Строго установлено существование слабосвязанных $dd\mu^*$ и $dt\mu^*$ с $L = 1$ и рассчитаны энергии связи этих мезомолекул на уровне точности, требуемой для μ -катализа, а также других μ -молекул изотопов водорода.

Новый интерес к μ -катализу термоядерных реакций вызван обнаружением того, что при определенных температурах скорости образования $dd\mu$ и $dt\mu$ молекул велики¹. Последнее объясняется резонансным механизмом их образования², реализующихся через их предпологаемые слабосвязанные состояния с $L = 1$ ³. Такие состояния найдены в дубненских расчетах⁴, но не были обнаружены в других многочисленных расчетах³. Невариационный метод⁴ содержит тонкие моменты и полно оценить его точность трудно. Желательно решить задачу более прямым путем, что указывалось и в⁴. Для количественного описания температурной зависимости образования $dd\mu$ и $dt\mu$ необходимо предсказать положение их слабосвязанных уровней с точностью $10^{-2} \div 10^{-3}$ эВ. Это отвечает весьма малой величине в характерных единицах задачи, так что требуемая относительная точность ее решения есть 10^{-6} ³, и она существенно не была достигнута в рамках известных методов³.

Пусть r_1, r_2 – координаты ядер, r_3 – μ^- -мезона. Мы предлагаем следующее представление волновой функции трехчастичной системы:

$$\psi = \sum_{l=0}^L \sum_i C_l(i) Y_{LM}^{l, L-l}(r_{13}, r_{23}) \exp(-\alpha_1^{(i)} r_{23} - \alpha_2^{(i)} r_{13} - \alpha_3^{(i)} r_{23}), \quad (1)$$

где :

$$Y_{LM}^{l_1 l_2}(x, y) = x^{l_1} y^{l_2} [Y_{l_1 m_1}(n_x) Y_{l_2 m_2}(n_y)]_{LM}.$$

Четность ψ есть, очевидно, $(-1)^L$, для четности $(-1)^{L+1}$ соответствующее разложение содержит $Y_{LM}^{l, L+1-l}(r_{31}, r_{32})$ с $1 \leq l \leq L$. Разложение (1) обобщает на произвольные состояния подходы, применявшиеся ранее для $L = 0$, а также в специальном случае⁵⁻⁶.

Скорость сходимости разложения (1) для основных состояний весьма высока и фактически выше чем в случае базиса полиномов по r_{ij} хилерасовского типа, а для слабосвязанных состояний по отношению к этому базису еще много выше, поскольку требуемое число экспонент в (1) не растет заметно с ростом кластеризации. Существенно, что подбор показателя

телей экспонент не требуется. Если условно записать:

$$\psi(r) = \int d\alpha \psi(\alpha) \exp(-\alpha r) = \sum_{i=1}^N c_i \exp(-\alpha_i r) \quad (2)$$

то при любом "достаточно разумном" распределении показателей α_i точность результатов быстро растет с ростом N и лишь слабо зависит от деталей их распределения. Мы выбрали показатели так: $\alpha^{(ij)} = t_{ij} A_j$, где в мезоатомных единицах, $A_1 = A_2 = 1,5$; $A_3 = 2$; $t_{ij} = \langle \frac{1}{2} i(i+1) \sqrt{n_j} \rangle$, $\langle \dots \rangle$ - дробная часть числа, $n_1 = 2, n_2 = 3, n_3 = 5$. Для $dt\mu^*$ $A_1 = 1,25$; $A_2 = 1,05$; $A_3 = 1,45$. Выбор такого типа использовался в ⁵, но с излишними усложнениями, и он отвечает некоторому способу дискретизации трехмерного интеграла типа (2).

В базисе (1) получены простые аналитические выражения для всех матричных элементов (МЭ) задачи. Они имеют вид полиномов от величин:

$$X_p = (\alpha_{ql}^{(i)} + \alpha_{rl}^{(i)} + \alpha_{ql}^{(i')} + \alpha_{rl}^{(i')})^{-1},$$

где $p, q, r = 1, 2, 3$. После пространственного усреднения вычисления делались в периметрических координатах. Простых аналитических выражений нельзя получить в традиционных подходах, использующих D -функции от трех частичных углов Эйлера, $Y_{LM}^{l, L-1}, Y_{LM}^{l, L+1-l}$ как и упомянутые D -функции, образуют полную систему угловых функций ⁷. В случае систем $pp\mu, dd\mu$ и $tt\mu$ (анти) симметризация базисных функций из (1) приводит к условию $l \geq L/2$ уменьшая их число.

В таблице даны рассчитанные изложенным методом энергии связи $-\epsilon_L(N_i)$ в эВ основных и возбужденных состояний мезомолекул с $L = 0$ и с $L = 1$, N_i - число учтенных базисных функций из (1). Последние образуют полную систему и при $N \rightarrow \infty$ величины $-\epsilon_L(N)$ сколь угодно точно приближаются к истинным. Скорость сходимости видна из таблицы. Для гомоядерных систем с $L = 0, N_1 = 100, N_2 = 125, N_3 = 140$. Для $dt\mu^*$ с $L = 1, N_1 = 250, N_2 = 300, N_3 = 375$. В остальных случаях $N_1 = 125, N_2 = 200, N_3 = 250$. Результаты $-\epsilon_L(N)$ ложатся на гладкие кривые, позволяя экстраполировать их к $-\epsilon_L(\infty)$, также приведенным в таблице. Для $-\epsilon_L(\infty)$ оставлены те знаки, которые можно считать верными. Использовались константы: $Ry = 13,6058041$ эВ, $m_p = 1836,151527$; $m_{d, t, \mu}$ - из ^{3, 4}, $E(p\mu) = -2528,52171$ эВ, $E(d\mu) = -2663,23087$ эВ; $E(t\mu) = -2711,27278$ эВ.

В качестве теста решалась задача об основном состоянии атома ${}^\infty\text{He}$. Результат: $E(139) = -2,9037243135$ ат. ед., $E(\infty) = -2,90372437$ ат. ед., что совпадает с известным точным ответом во всех приведенных знаках.

Вариационные результаты $-\epsilon_L(N_i)$, представленные в таблице, получены диагонализацией матрицы гамильтониана, так что, согласно известным теоремам ⁸, все они являются нижними границами истинных. Поэтому положительность полученных $-\epsilon_{L=1}(N_i)$ для $dd\mu^*$ и $dt\mu^*$ дает строгое доказательство существования этих важных состояний. Результаты для этих систем удовлетворительно согласуются с полученными в ⁴. (Последние не являются нижними границами истинных).

Приведенные мезомолекулярные результаты - наиболее точные из опубликованных (число верных знаков в таблице - наибольшее, см. ³. Для вариационных расчетов, кроме того, критерием точности является абсолютная величина минимума энергии ⁸). Построенные волновые функции весьма простой структуры (1) удобны для применений, а для решения широкого круга трехчастичных задач описанный метод наиболее эффективен.

Авторы выражают благодарность А.Л.Зубереву, Л.И.Пономареву и А.В.Филинскому.

	$pp\mu$	$dd\mu$	$tt\mu$	$dd\mu^*$	$tt\mu^*$	$dp\mu$	$tp\mu$	$dt\mu$	$dt\mu^*$
- $\epsilon_{L=0}(N_1)$	253,15040	325,06695	362,87101	35,69446	83,54017	221,53393	213,82847	319,04991	34,34204
- $\epsilon_{L=0}(N_2)$	253,15205	325,07124	362,89558	35,81093	83,68414	221,54781	213,83896	319,13451	34,79112
- $\epsilon_{L=0}(N_3)$	253,15240	325,07213	362,90040	35,83658	83,72202	221,54923	213,83975	319,13805	34,82381
- $\epsilon_{L=0}(\infty)$	253,153	325,074	362,904	35,9	83,78	221,551	213,841	319,140	34,84
- $\epsilon_{L=1}(N_1)$	107,24811	226,66621	289,10278	-0,02433	44,99089	96,70044	98,28906	231,56104	0,26650
- $\epsilon_{L=1}(N_2)$	107,26398	226,68014	289,13344	1,64231	45,16918	97,32169	99,05239	232,34977	0,45129
- $\epsilon_{L=1}(N_3)$	107,26563	226,68157	289,13931	1,78123	45,19359	97,42990	99,10104	232,42049	0,52310
- $\epsilon_{L=1}(\infty)$	107,267	226,683	289,146	1,95 ± 0,05	45,22	97,66	99,13	232,48	0,6

Литература

1. Джелепов В.П., Ермолов П.Ф., Москалев В.И., Фильченков В.В. ЖЭТФ, 1966, 50, 1235; Быстрицкий В.М., Жделепов В.П., Оганесян К.О., Омеляненко М.Н., Пороховой С.Ю., Руденко А.И., Фильченков В.В. ЖЭТФ, 1974, 66, 61; Быстрицкий В.М., Джелепов В.П., Ершова З.В., Зинов В.Г., Капышев В.А., Мухамет-Галеева С.М., Надеждин В.С., Ривкис Л.А., Руденко А.И., Сатаров В.И. и др. Письма в ЖЭТФ, 1980, 31, 249; Jones S.E. et al. Phys. Rev. Lett., 1983, 51, 1757.
2. Весман Э.А. Письма в ЖЭТФ, 1967, 5, 113.
3. Винницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, 13, 1336.
4. Винницкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Трускова Н.Ф. ЖЭТФ, 1980, 79, 698.
5. Thakkar A.J., Smith V.H. Phys. Rev., 1977, A15, 1, 15; Демков Ю.Н., Филинский А.В. Тезисы Всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров. Минск, 1983, стр. 22.
6. Фролов А.М., Эфрос В.Д., Колесников Н.Н., Копылов В.А., Препринт ИАЭ-3990, 1984.
7. Schwartz C.L. Phys. Rev., 1961, 123, 1700.
8. Гулд С. Вариационные методы в задачах о собственных значениях. М.: Мир, 1970.