

ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ МЕЗОМОЛЕКУЛ $pt\mu$, $pd\mu$, $tr\mu$ В ВАРИАЦИОННОМ ПОДХОДЕ

В. И. Коробов^{1,2, *}, *А. П. Мартыненко*^{1, **},
В. В. Сорокин^{1, ***}, *А. В. Эскин*^{1, ****}

¹ Самарский национальный исследовательский университет
им. акад. С. П. Королева, Самара, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Выполнен расчет энергий возбужденных связанных состояний мюонных молекул $pt\mu$, $pd\mu$ и $dt\mu$ на основе стохастического вариационного метода. Базисные волновые функции выбраны в гауссовой форме. Матричные элементы гамильтониана вычислены аналитически. Для численного расчета написан компьютерный код в системе MATLAB. Получены численные значения энергии для возбужденных P -состояний мюонных молекул $pt\mu$, $pd\mu$ и $dt\mu$.

The energy spectrum of the excited bound states of muonic molecules $pt\mu$, $pd\mu$ and $dt\mu$ is calculated on the basis of stochastic variational method. The basis wave functions of the muonic molecule are taken in the Gaussian form. The matrix elements of the Hamiltonian are calculated analytically. For numerical calculation, a computer code is written in the MATLAB system. Numerical values of energy levels of excited P -states in muonic molecules $pt\mu$, $pd\mu$ and $dt\mu$ are obtained.

PACS: 36.10.Ee; 31.30.jr; 36.10.Gv

ВВЕДЕНИЕ

Исследование энергетических спектров мезомолекулярных ионов представляет интерес в связи с явлением мюонного катализа ядерных реакций синтеза. Расчет тонкой и сверхтонкой структур мезомолекулярных ионов с учетом различных КЭД-поправок позволяет предсказать скорость реакций их образования и другие параметры μCF -цикла. Энергии слабосвязанных состояний мезомолекулярных ионов $dd\mu$ и $dt\mu$ важны для расчета скорости их резонансного образования.

*E-mail: korobov@theor.jinr.ru

**E-mail: a.p.martynenko@samsu.ru

***E-mail: wws63rus@yandex.ru

****E-mail: eskinalexey1992@gmail.com

В нашей работе мы исследуем P -состояния с $L = 1$. Связанные состояния трехчастичных молекулярных ионов обозначаются парой квантовых чисел J и ν , где J — вращательное квантовое число, ν — колебательное квантовое число [2, 3]. Например, основное состояние в данном подходе обозначается как $(0,0)$, а возбужденное $P^*(L = 1)$ -состояние имеет обозначение $(1,1)$. Помимо состояний с пространственной четностью $(-1)^L$ существуют также состояния $L = 1$ с пространственной четностью $(-1)^{L+1}$ [4]. Такие состояния также рассматриваются нами в данной работе.

ОБЩИЙ ФОРМАЛИЗМ

Для вычисления энергетического спектра возбужденных связанных состояний мюонных молекул $pt\mu$, $pd\mu$ и $dt\mu$ мы используем стохастический вариационный метод [5]. Пробная волновая функция мюонной молекулы в таком подходе имеет гауссову форму. Гауссова базисная функция с ненулевым орбитальным моментом импульса для нетождественных частиц имеет вид

$$\Phi_{LS}(\mathbf{x}, A) = \exp\left(-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}A\mathbf{x}\right)\theta_L(\mathbf{x})\chi_{SM_S}, \quad (1)$$

где $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N-1})$ — координаты Якоби; $A - (N - 1) \times (N - 1)$ — положительно-определенная матрица нелинейных вариационных параметров; χ_{SM_S} — спиновая волновая функция,

$$\theta_L(\mathbf{x}) = [[[[\mathbb{Y}_{l_1}(\mathbf{x}_1)\mathbb{Y}_{l_2}(\mathbf{x}_2)]_{L_{12}}\mathbb{Y}_{l_3}(\mathbf{x}_3)]_{L_{123}} \dots]_{LM}, \quad (2)$$

где $\mathbb{Y}_{l_m}(\mathbf{x}) = r^{l_m}Y_{l_m}(\mathbf{x})$. В случае трех нетождественных частиц в P -состоянии ($L = 1$, где L — полный орбитальный момент импульса частиц) существуют три возможные базисные функции:

$$\phi_{10}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\lambda}, A) = \exp\left\{-\frac{1}{2}[A_{11}\rho^2 + A_{22}\lambda^2 + 2A_{12}(\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\lambda})]\right\}(\epsilon\rho), \quad (3)$$

$$\phi_{01}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\lambda}, A) = \exp\left\{-\frac{1}{2}[A_{11}\rho^2 + A_{22}\lambda^2 + 2A_{12}(\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\lambda})]\right\}(\epsilon\boldsymbol{\lambda}), \quad (4)$$

$$\phi_{11}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\lambda}, A) = \exp\left\{-\frac{1}{2}[A_{11}\rho^2 + A_{22}\lambda^2 + 2A_{12}(\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\lambda})]\right\}(\epsilon[\boldsymbol{\rho} \times \boldsymbol{\lambda}]), \quad (5)$$

где мы используем тензорное представление для угловой части волновых функций, $\boldsymbol{\rho}$ и $\boldsymbol{\lambda}$ — координаты Якоби. Первые две волновые функции имеют пространственную четность $(-1)^L$, а третья волновая функция имеет четность $(-1)^{L+1}$. Для построения базисных функций необходимо взять суперпозиции (3) и (4) для состояния с четностью $(-1)^L$ и (5) — с четностью $(-1)^{L+1}$.

Выбор базисных функций в гауссовой форме позволяет выполнить аналитический расчет матричных элементов гамильтониана. Матричный элемент нормировки для функций (3) имеет вид

$$\langle \phi' | \phi \rangle^{10} = \frac{6\pi^2 B_{22}}{(\det B)^{5/2}}, \quad \langle \phi' | \phi \rangle^{01} = \frac{6\pi^2 B_{11}}{(\det B)^{5/2}}, \quad \langle \phi' | \phi \rangle^{11} = \frac{12\pi^2}{(\det B)^{5/2}}, \quad (6)$$

где $B_{kl} = A'_{kl} + A_{kl}$. В нерелятивистском приближении гамильтониан мезомолекулы в координатах Якоби имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \Delta_\rho - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \Delta_\lambda + \frac{e_1 e_2}{|\rho|} + \frac{e_1 e_3}{\left| \lambda + \frac{m_2}{m_{12}} \rho \right|} + \frac{e_2 e_3}{\left| \lambda - \frac{m_1}{m_{12}} \rho \right|}, \quad (7)$$

где $\mu_1 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, $\mu_2 = \frac{(m_1 + m_2) m_3}{m_1 + m_2 + m_3}$, $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \boldsymbol{\rho}$, $\mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3 = \boldsymbol{\lambda} + (m_2/m_{12})\boldsymbol{\rho}$, $\mathbf{r}_{23} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 = \boldsymbol{\lambda} - (m_1/m_{12})\boldsymbol{\rho}$, e_1, e_2, e_3 — заряды частиц. Матричные элементы кинетической и потенциальной энергии вычисляются аналитически.

Для численного расчета энергетического спектра был написан компьютерный код в системе MATLAB для решения кулоновской задачи трех тел. За основу была взята программа на языке ФОРТРАН из [5]. В программу были внесены аналитические выражения для матричных элементов, изменена генерация случайных параметров. Для вариационных параметров используется процедура стохастической оптимизации. В результате получены численные значения энергетических уровней возбужденных состояний $pt\mu$, $pd\mu$ и $dt\mu$ в мюонных атомных единицах: $E^{pd\mu}(1,0) = -0,490664161$, $E^{pt\mu}(1,0) = -0,499492022$, $E^{dt\mu}(1,0) = -0,523191450$, $E^{dt\mu}(1,1) = -0,481970439$, $E^{pd\mu}((-1)^{L+1}) = -0,118989450$, $E^{pt\mu}((-1)^{L+1}) = -0,120749575$, $E^{dt\mu}((-1)^{L+1}) = -0,123867812$.

Наряду с полной энергией E конкретного состояния мезомолекулярного иона введем также энергию связи $\epsilon_{\text{bind}} = -2R_y (E + m_r / (2m_\mu n^2))$ (в эВ), где m_r — приведенная масса двухчастичной системы из мюона и самого тяжелого изотопа водорода (в случае молекулы $dt\mu$ это $t\mu$), n — главное квантовое число такой системы. Для состояний (1,0) и (1,1) $n = 1$, для метастабильного P -состояния с четностью $(-1)^{L+1}$ $n = 2$ [3, 4]. Для конкретного уровня энергии мезомолекулярного иона знак ϵ_{bind} определяет, является ли состояние двух кластеров связанным или нет.

Все полученные энергии находятся в согласии с [2, 3]. Заметное расхождение для состояния (1,1) связано с меньшим размером базиса в наших вычислениях, а также с необходимостью более тщательной оптимизации вариационных параметров. Результаты расчета для состояний с четностью $(-1)^{L+1}$ согласуются с [4]. Важно отметить, что мы используем двойную точность,

в то время как в [2] используется четверная точность, что также влияет на различия в результатах.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант 18-12-00128).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Gershtein S. S., Petrov Yu. V., Ponomarev L. I.* Muon Catalysis and Nuclear Breeding // Usp. Fiz. Nauk. 1990. V. 33, No. 8. P. 3–46.
2. *Frolov A. M., Wardlaw D. M.* Bound State Spectra of Three-Body Muonic Molecular Ions // Eur. Phys. J. D. 2011. V. 63. P. 339–350.
3. *Korobov V. I., Puzynin I. V., Vinitzky S. I.* A Variational Calculation of Weakly Bound Rotational-Vibrational States of the Mesic Molecules $dd\mu$ and $dt\mu$ // Phys. Lett. B. 1987. V. 196. P. 272–276.
4. *Korobov V. I., Vinitzky S. I.* Variational Calculation of Muonic Molecule Bound States with Orbital Momentum $J = 1$ and Spatial Parity $\lambda = +1$ // Phys. Lett. B. 1989. V. 228. P. 21–23.
5. *Varga K., Suzuki Y.* Solution of Few-Body Problems with the Stochastic Variational Method. I. Central Forces with Zero Orbital Momentum // Comp. Phys. Commun. 1997. V. 106. P. 157–168.