УДК 539.184

УРОВНИ ЭНЕРГИИ МЕЗОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ВОДОРОДА В ВАРИАЦИОННОМ ПОДХОДЕ

А. П. Мартыненко, Ф. А. Мартыненко, В. В. Сорокин,

О. С. Сухорукова, А. В. Эскин

Выполнен расчет энергий основных и возбужденных состояний мюонных молекулярных ионов $td\mu, dp\mu$ и $tp\mu$ на основе стохастического вариационного метода в квантовой электродинамике. 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 основных и возбужденных состояний.

Ключевые слова: вариационный метод, мюонные молекулярные ионы водорода, квантовая электродинамика.

Начиная с 2000 г., значительно возрос интерес к прецизионной физике мюонов, мюонных атомов и молекул. Измерения аномального магнитного момента (АММ) мюона выявили расхождение теории и эксперимента и дали импульс новым теоретическим исследованиям [1]. В течение длительного времени готовилось измерение лэмбовского сдвига в мюонном водороде коллаборацией CREMA (Charge Radius Experiments with Muonic Atoms) [2], а полученный ими экспериментальный результат для частоты перехода $(2P_{3/2}^{F=2} - 2S_{1/2}^{F=1})$ в мюонном водороде дал более точное значение зарядового радиуса протона $r_p = 0.84184(67)$ фм, которое оказалось меньше значения, рекомендованного CODATA, на 7σ. Недавние исследования частот перехода $(2S$–$4P)$, $(1S$–$3S)$ в атоме электронного водорода дали различные значения зарядового радиуса протона [3–4]. Еще одна важная и интересная проблема в физике мюоных систем связана с мюонными молекулярными ионами водорода $(td\mu, tp\mu, dp\mu$ и др.), после образования которых происходит слияние их ядер за счет сильного взаимодействия (реакции

Самарский университет, 443086 Россия, Самара, Московское шоссе, 34; e-mail: a.p.martynenko@samsu.ru, o.skhrkv@gmail.com.

мюонного катализа [5]). Для теоретического описания протекающих при этом физических процессов, связаных с мезоатомными, мезомолекулярными и ядерными явлениями, необходимо знать структуру уровней энергии мезоатомов и мезомолекул. В случае мезоатомов ($\mu t, \mu d, \mu p$) расчет тонкой и сверхтонкой структуры (СТС) спектра выполнен в последние годы с высокой точностью [6–9]. Использование вариационного метода для трехчастичных систем (мезомолекул) позволило достичь очень высокой точности решения уравнения Шредингера [10, 11] с базовыми членами гамильтониана системы. Однако прецизионное исследование уровней энергии требует учета различных поправок в гамильтониане взаимодействия в рамках квантовой электродинамики. В данной работе мы исследуем уровни энергии мезомолекул с различными частицами в рамках стохастического вариационного метода [12]. Цель работы состоит в расчете уровней энергии основных и возбужденных состояний, а также сверхтонкой структуры спектра с учетом релятивистских поправок и эффектов поляризации вакуума.

Пробная волновая функция мезомолекулы с ненулевым угловым моментом имеет вид суперпозиции базисных волновых функций гауссовского типа:

$$\Phi_{LS}(\mathbf{x}, A) = e^{-1/2\tilde{\mathbf{x}}A\mathbf{x}}\theta_L(\mathbf{x})\chi_{SM_S}, \tag{1}$$

где $\mathbf{x} = (\boldsymbol{\rho},\ \boldsymbol{\lambda})$ – координаты Якоби, A – матрица вариационных параметров 2×2, χ_{SM_S} – спиновая волновая функция, $\theta_L(\mathbf{x})$ – угловая часть волновой функции. В случае S-состояний координатная часть волновой функции для трех различных частиц имеет вид

$$\phi_{00}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\lambda}) = e^{-1/2[A_{11}\rho^2 + A_{22}\lambda^2 + 2A_{12}\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\lambda}]}. \tag{2}$$

В случае P-состояний ($L = 1$) имеется три варианта представления волновой функции:

$$\phi_{10}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\lambda}) = e^{-1/2[A_{11}\rho^2 + A_{22}\lambda^2 + 2A_{12}\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\lambda}]}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\rho}), \phi_{01}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\lambda}) = e^{-1/2[A_{11}\rho^2 + A_{22}\lambda^2 + 2A_{12}\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\lambda}]}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\lambda}),$$

$$\phi_{11}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\lambda}) = e^{-1/2[A_{11}\rho^2 + A_{22}\lambda^2 + 2A_{12}\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\lambda}]}(\boldsymbol{\varepsilon}[\boldsymbol{\rho} \times \boldsymbol{\lambda}]), \tag{3}$$

где использовано тензорное представление для угловой части волновой функции. Первые две волновые функции имеют четность $(-1)^L$, а третья – $(-1)^{L+1}$. Мы исследуем далее оба случая. Базисная волновая функция P-состояния определяется суммой функций из (3) в виде $\phi(\boldsymbol{\rho},\ \boldsymbol{\lambda}) = \mathrm{c}_1\phi_{10}(\boldsymbol{\rho},\ \boldsymbol{\lambda}) + \mathrm{c}_2\phi_{01}(\boldsymbol{\rho},\ \boldsymbol{\lambda})$ для состояний с четностью $(-1)^L$ и третьей функцией из (3) для состояний с четностью $(-1)^{L+1}$. Зная базисные волновые функции, мы вычислили аналитически матричные элементы нормировки и гамильтониана. Так в нормировке волновых функций основного состояния имеем:

$$\langle\phi'|\phi\rangle^{00} = \frac{8\pi^3}{(\det B)^{3/2}}, \tag{4}$$

где $B_{kl} = A^i_{kl} + A^j_{kl}$. Для возбужденных состояний матричные элементы имеют вид:

$$\langle\phi'|\phi\rangle^{10} = \int\int d\boldsymbol{\rho}\cdot d\boldsymbol{\lambda}\cdot e^{-1/2[B_{11}\rho^2+B_{22}\lambda^2+2B_{12}(\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\lambda})]}(\boldsymbol{\varepsilon}^*\boldsymbol{\rho})(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\rho}) = \frac{6\pi^2 B_{22}}{(\det B)^{5/2}},$$

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

В координатах Якоби оператор кинетической энергии имеет вид:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\Delta_\rho - \frac{\hbar^2}{2\mu_2}\Delta_\lambda, \tag{6}$$

где $\mu_1 = \dfrac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$, $\mu_2 = \dfrac{(m_1+m_2)m_3}{m_1+m_2+m_3}$. Действуя операторами Лапласа Δ_ρ и Δ_λ на волновые функции (3) и вычисляя соответствующие матричные элементы, получим:

$$\langle\phi'|\hat{T}|\phi\rangle^{00,10,01,11,(01|10)} = -\frac{6\pi^2}{(\det B)^{7/2}}\left[\frac{\hbar^2}{2\mu_1}I_\rho^{00,10,01,11,(01|10)} + \frac{\hbar^2}{2\mu_2}I_\lambda^{00,10,01,11,(01|10)}\right], \tag{7}$$

$$I_\rho^{00} = A_{12}^2 B_{11} - 2A_{11}A_{12}B_{12} + A_{11}(B_{12}^2 + (A_{11}-B_{11})B_{22}), \tag{8}$$

$$I_\lambda^{00} = A_{12}^2 B_{22} - 2A_{22}A_{12}B_{12} + A_{22}(B_{12}^2 + (A_{22}-B_{22})B_{11}), \tag{9}$$

$$I_\rho^{10} = 5A_{11}B_{22}[B_{12}^2 + (A_{11}-B_{11})B_{22}]-$$

$$-2A_{12}B_{12}(B_{12}^2 + 5A_{11}B_{22} - B_{11}B_{22}) + A_{12}^2(2B_{12}^2 + 3B_{11}B_{22}), \tag{10}$$

$$I_\lambda^{10} = 5A_{12}^2B_{22}^2 + A_{22}B_{22}(-10A_{12}B_{12} + 3B_{12}^2 - 3B_{11}B_{22}) + A_{22}^2(2B_{12}^2 + 3B_{11}B_{22}), \tag{11}$$

$$I_\rho^{01} = 5A_{12}^2B_{11}^2 + A_{11}B_{11}(-10A_{12}B_{12} + 3B_{12}^2 - 3B_{22}B_{11}) + A_{11}^2(2B_{12}^2 + 3B_{22}B_{11}), \tag{12}$$

$$I_\lambda^{01} = 5A_{22}B_{11}[B_{12}^2 + (A_{22} - B_{22})B_{11}] -$$

$$-2A_{12}B_{12}(B_{12}^2 + 5A_{22}B_{11} - B_{22}B_{11}) + A_{12}^2(2B_{12}^2 + 3B_{22}B_{11}), \quad (13)$$

$$I_\rho^{11} = A_{12}^2 B_{11} - 2A_{11}A_{12}B_{12} + A_{11}[B_{12}^2 + (A_{11} - B_{11})B_{22}], \quad (14)$$

$$I_\lambda^{11} = A_{12}^2 B_{22} - 2A_{22}A_{12}B_{12} + A_{22}[B_{12}^2 + (A_{22} - B_{22})B_{11}], \quad (15)$$

$$I_\rho^{(01|10)} = -B_{12}[-2A_{12}B_{12}(4A_{11} + B_{11}) + 5A_{11}B_{12}^2 + 5A_{12}^2 B_{11}] -$$

$$-B_{22}(A_{11} - B_{11})(5A_{11}B_{12} - 2A_{12}B_{11}), \quad (16)$$

$$I_\lambda^{(01|10)} = 5A_{12}^2 B_{12}B_{22} - A_{22}(2A_{12}B_{11}B_{22} + 8A_{12}B_{12}^2 + 3B_{11}B_{12}B_{22} - 3B_{12}^3) + 5A_{22}^2 B_{11}B_{12}. \quad (17)$$

Потенциальная энергия кулоновского взаимодействия трех частиц равна

$$\hat{V} = \frac{e_1 e_2}{|\boldsymbol{\rho}|} + \frac{e_1 e_3}{|\boldsymbol{\lambda} + \frac{m_2}{m_{12}}\boldsymbol{\rho}|} + \frac{e_2 e_3}{|\boldsymbol{\lambda} - \frac{m_1}{m_{12}}\boldsymbol{\rho}|}, \quad (18)$$

где радиусы-векторы относительных расстояний выражены через координаты Якоби: $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \boldsymbol{\rho}$, $\mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3 = \boldsymbol{\lambda} + \dfrac{m_2}{m_{12}}\,\boldsymbol{\rho}$, $\mathbf{r}_{23} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 = \boldsymbol{\lambda} - \dfrac{m_1}{m_{12}}\,\boldsymbol{\rho}$, e_1, e_2, e_3 – заряды частиц. После аналитического вычисления интегралов получим следующие выражения для матричных элементов (18):

$$\langle \phi' | \hat{V} | \phi \rangle^{00,10,01,11,(01|10)} = e_1 e_2 I_{12}^{00,10,01,11,(01|10)} + e_1 e_3 I_{13}^{00,10,01,11,(01|10)} +$$

$$+ e_2 e_3 I_{23}^{00,10,01,11,(01|10)}, \quad (19)$$

$$I_{12}^{00} = \frac{8\sqrt{2}\pi^{5/2}}{\sqrt{B_{22}}\det B}, I_{13,23}^{00} = \frac{8\sqrt{2}\pi^{5/2}}{\sqrt{F_1^{13,23}(B_{22}F_1^{13,23} - (F_2^{13,23})^2)}}, I_{12}^{10} = \frac{4\sqrt{2}\pi^{3/2}\sqrt{B_{22}}}{(\det B)^2}, \quad (20)$$

$$I_{13,23}^{10} = \frac{2\sqrt{2}\pi^{3/2}(3B_{22}F_1^{13,23} - (F_2^{13,23})^2)}{(F_1^{13,23})^{3/2}[B_{22}F_1^{13,23} - (F_2^{13,23})^2]^2}, I_{12}^{01} = \frac{2\sqrt{2}\pi^{3/2}(3B_{11}B_{22} - B_{12}^2)}{(B_{22})^{3/2}(\det B)^2}, \quad (21)$$

$$I^{01}_{13,23} = \frac{2\sqrt{2}\pi^{3/2}}{[B_{22}F_1^{13,23} - (F_2^{13,23})^2]^2}\times$$

$$\times\left\{2\sqrt{F_1^{13,23}} + \frac{(3B_{22}F_1^{13,23} - (F_2^{13,23})^2)}{(F_1^{13,23})^{3/2}}\frac{(m_{2,1}^{13,23})^2}{m_{12}^2} \pm \frac{4F_2^{13,23}}{\sqrt{F_1^{13,23}}}\frac{m_{2,1}^{13,23}}{m_{12}}\right\},$$

$$I^{11}_{12} = \frac{8\sqrt{2}\pi^{3/2}}{\sqrt{B_{22}}(\det B)^2},\ \ I^{11}_{13,23} = \frac{8\sqrt{2}\pi^{3/2}}{\sqrt{F_1^{13,23}}[B_{22}F_1^{13,23} - (F_2^{13,23})^2]^2},$$

$$I^{(01|10)}_{12} = -\frac{4\sqrt{2}\pi^{3/2}B_{12}}{\sqrt{B_{22}(\det B)^2}}, \tag{22}$$

$$I^{(01|10)}_{13,23} = -\frac{2\sqrt{2}\pi^{3/2}}{[B_{22}F_1^{13,23} - (F_2^{13,23})^2]^2}\times$$

$$\times\left\{2\frac{F_2^{13,23}}{\sqrt{F_1^{13,23}}} \mp \frac{m_{2,1}^{13,23}}{m_{12}}\frac{(3B_{22}F_1^{13,23} - (F_2^{13,23})^2)}{(F_1^{13,23})^{3/2}}\right\}, \tag{23}$$

$$F_1^{13,23} = B_{11} + B_{22}\frac{(m_{2,1}^{13,23})^2}{m_{12}^2} \mp 2B_{12}\frac{m_{2,1}^{13,23}}{m_{12}},\ F_2^{13,23} = B_{12} \mp B_{22}\frac{m_{2,1}^{13,23}}{m_{12}}. \tag{24}$$

Для увеличения точности расчетов уровней энергии мы включили в гамильтониан системы следующие поправки [6–9]:

$$\Delta V = -\frac{\alpha^2}{8}\sum_{i=1}^{3}\frac{\mathbf{p}_i^4}{m_i^3} - \frac{\pi\alpha^2}{2}\sum_{i,j=1;i\neq j}^{3} e_ie_j\left(\frac{1}{m_i^2}+\frac{1}{m_j^2}\right)\delta(\mathbf{r}_{ij}) -$$

$$-\frac{\alpha^2}{2}\sum_{i,j=1;i\neq j}^{3}\frac{e_ie_j\left(\mathbf{p}_i\mathbf{p}_j + \frac{\mathbf{r}_{ij}(\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{p}_i)\mathbf{p}_j}{r_{ij}^2}\right)}{m_im_jr_{ij}} +$$

$$+\frac{\alpha}{3\pi}\sum_{i,j=1;i\neq j}^{3}\frac{e_ie_j}{r_{ij}}\int_1^\infty d\xi\frac{\sqrt{\xi^2-1}(2\xi^2+1)}{\xi^4}e^{-2m_e/m_\mu\alpha\xi r_{ij}}. \tag{25}$$

Представим здесь матричные элементы ΔV с дельта-функциями, которые дают также СТС спектра энергии:

$$\langle\phi_i|\delta(\mathbf{r}_{12})|\phi_j\rangle = \frac{(2\pi)^{3/2}}{(B_{22})^{3/2}},\ \langle\phi_i|\delta(\mathbf{r}_{13})|\phi_j\rangle = \frac{(2\pi)^{3/2}}{\left(B_{11} - 2B_{12}\frac{m_2}{m_{12}} + B_{22}\left(\frac{m_2}{m_{12}}\right)^2\right)^{3/2}}, \tag{26}$$

$$\langle \phi_i | \delta(\mathbf{r}_{23}) | \phi_j \rangle = \frac{(2\pi)^{3/2}}{\left(B_{11} + 2B_{12}\frac{m_1}{m_{12}} + B_{22}\left(\frac{m_1}{m_{12}}\right)^2 \right)^{3/2}}. \tag{27}$$

В рамках стохастического вариационного метода [12] написан компьютерный код для решения уравнения Шредингера в системе MATLAB. В этом подходе матрица вариационных параметров генерируется случайным образом. Для вариационных параметров использована процедура стохастической оптимизации. В компьютерную программу введены матричные элементы нормировки волновой функции и гамильтониана для основного и возбужденных состояний. Изменена функция генерации случайных чисел по сравнению с [12]. В результате численного расчета получены значения энергии основного и возбужденного состояний мезомолекул в мюонных атомных единицах. В случае мезомолекулы $(td\mu)$ результаты имеют вид: $E^{td\mu}_{\rm tot}(0,0) = -0.538594971$, $E^{td\mu}_{\rm tot}(0,1) = -0.488056287$, $E^{td\mu}_{\rm tot}(1,0) = -0.523191450$, $E^{td\mu}_{\rm tot}(1,1) = -0.481772186$, $E^{td\mu}_{\rm tot}((-1)^{L+1})) = -0.123867812$. Индекс “tot” означает учёт всех поправок. Полученные результаты хорошо согласуются с предыдущими вычислениями в [10, 11]. Некоторое различие в результатах для состояний (0,1) и (1,1) связано с меньшим размером базиса, который мы используем, а также с выбором оптимальных областей для генерации случайных параметров. Расчет дельта-членов потенциала дал оценку сверхтонких расщеплений уровней энергии. В случае молекулы $(tp\mu)$ имеем: $\Delta\nu^{(1)} = 1.31 \cdot 10^7$ МГц, $\Delta\nu^{(2)} = 3.32 \cdot 10^7$ МГц.

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

Л И Т Е Р А Т У Р А

[1] F. Jegerlehner and A. Nyffeler, Phys. Rep. **477**, 1 (2009).

[2] R. Pohl, A. Antognini, F. Nez, et al., Nature **466**, 213 (2010).

[3] A. Beyer et al., Science **358**, 79 (2017).

[4] H. Fleurbaey, S. Galtier, S. Thomas, et al., Phys. Rev. Lett. **120**, 183001 (2018).

[5] С. С. Герштейн, Ю. В. Петров, Л. И. Пономарев, УФН **160**(8), 3 (1990).

[6] A. E. Dorokhov, N. I. Kochelev, A. P. Martynenko, et al., Eur. Phys. J. A **54**, 131 (2018).

[7] R. N. Faustov et al., Phys. Rev. A **92**(5), 052512 (2015).

[8] А. П. Мартыненко, Ф. А. Мартыненко, Р. Н. Фаустов, ЖЭТФ **151**(6), 1052 (2017).

[9] R. N. Faustov et al., Phys. Rev. A **90**(1), 012520 (2014).

[10] A. M. Frolov and D. M. Wardlaw, Eur. Phys. J. D **63**, 339 (2011).

[11] V. I. Korobov, I. V. Puzynin and S. I. Vinitsky, Phys. Lett. B **196**, 272 (1987).

[12] K. Varga and Y. Suzuki, Comp. Phys. Comm. **106**, 157 (1997).

Поступила в редакцию 29 декабря 2018 г.

После доработки 3 апреля 2019 г.

Принята к публикации 4 апреля 2019 г.

Публикуется по результатам XVI Всероссийского молодежного Самарского конкурса-конференции по оптике и лазерной физике (Самара).