

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



3358/2-78

14/viii-78

17-487

P4 - 11499

В.Н.Покровский, Л.И.Пономарев, Х.Шневли

ОТНОСИТЕЛЬНЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ
КУЛОНОВСКОГО ЗАХВАТА
ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ МЕЗОНОВ
В ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ

1978

P4 - 11499

В.Н.Покровский, Л.И.Пономарев, Х.Шневли*

ОТНОСИТЕЛЬНЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ
КУЛОНОВСКОГО ЗАХВАТА
ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ МЕЗОНОВ
В ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ

Направлено в "Nuclear Physics"

* Институт физики Фрибургского университета,
Швейцария.

Покровский В.Н., Пономарев Л.И., Шневли Х.

P4 - 11499

Относительные вероятности кулоновского захвата отрицательно заряженных мезонов в химических соединениях

Предлагается подход, в рамках которого можно воспроизвести экспериментально измеренные относительные вероятности кулоновского захвата отрицательно заряженных мезонов в химических соединениях. Существенной особенностью этого подхода является предположение о том, что решающую роль в процессе захвата играют не слишком сильно связанные электроны.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Pokrovsky V.N., Ponomarev L.I., Schneuwly H. P4 - 11499

Coulomb Capture Ratios of Negative Mesons in Chemical Compounds

An approach to reproduce experimental ratios of Coulomb capture of negative mesons in chemical compounds is proposed. The essential feature of this approach is an assumption that not too strongly bounded electrons play a decisive part in the capture process.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

В большинстве опубликованных к настоящему времени расчетов процесса кулоновского захвата отрицательно заряженных мезонов (мюонов, пионов, каонов) в веществе исходят из предположения о том, что влияние химической связи на процесс атомного захвата невелико, и может рассматриваться как возмущение^{1-4/}. Лишь в модели больших мезомолекул^{5/}, развитой по преимуществу для объяснения закономерностей захвата отрицательных пионов ядрами водорода в смесях и химических соединениях, а также в работе^{6/}, посвященной захвату отрицательных мюонов в твердых телах, химическая связь серьезно принималась во внимание. Недавние вычисления^{7/} также не исключают наличия такого влияния. Кроме того, вся совокупность экспериментальных фактов свидетельствует о том, что химическая связь существенным образом влияет на процесс кулоновского захвата мезонов, хотя во многих случаях противоречия между экспериментальными данными не позволяют однозначно оценить степень такого влияния.

В данной работе мы предлагаем некоторую схему, которая позволяет воспроизвести измеренные отношения вероятностей кулоновского захвата мезонов атомами элементов, входящих в состав химических соединений. Такая схема вычислений основана на следующих предположениях.

1. Рассмотрим соединение типа $Z_k Z_l^*$ с "нормальной" связью между атомами Z и Z^* . Согласно основной пред-

• посылке модели больших мезомолекул, в процессе кулоновского захвата мезонов участвуют как электроны атомного остова, так и валентные электроны. Пусть n и n^* - эффективные числа электронов остова, участвующих в захвате мезона, а ν и ν^* - валентности атомов Z и Z^* соответственно. При этом вероятности захвата мезонов на мезоатомные или мезомолекулярные орбиты соответственно равны

$$\left. \begin{aligned} a &= \frac{k n}{N}, & a^* &= \frac{l n^*}{N}, \\ a_m &= \frac{k \nu + l \nu^*}{N} = \frac{2 k \nu}{N} = \frac{2 l \nu^*}{N}, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где $N = k(n + \nu) + l(n^* + \nu^*)$ - полное число электронов, принимающих участие в захвате мезонов.

Учтем далее, что с мезомолекулярной орбиты мезон может перейти на мезоатомные орбиты любого из атомов Z или Z^* , и обозначим соответствующие вероятности через ω и $\omega^* = 1 - \omega$. Тогда для отношения вероятностей кулоновского захвата на каждый из атомов Z и Z^* получим

$$A(Z/Z^*) = \frac{k^{-1}(a + a_m \omega)}{l^{-1}(a^* + a_m \omega^*)} = \frac{n + 2\nu \omega}{n^* + 2\nu^* \omega^*} \quad (2)$$

Обратимся сначала к рассмотрению величин ω и ω^* .

2. Мезоны, находящиеся на мезомолекулярных орбитах, с вероятностями p и $p^* = 1 - p$ локализованы у атомов Z и Z^* соответственно. Эти вероятности равны

плотностям валентных электронов вблизи ядер Z и Z^* и в пренебрежении интегралом перекрытия (см. напр.^{/8/}) составляют

$$p = \frac{1}{2}(1 - \sigma), \quad p^* = \frac{1}{2}(1 + \sigma), \quad (3)$$

где σ - ионность химической связи. Величину σ можно оценить, например, по формуле Полинга^{/9/}, пользуясь значениями электроотрицательностей атома (здесь и в дальнейшем мы приняли для определенности, что атом Z^* более электроотрицателен).

3. В дополнение к "факторам локализации" p и p^* введем "факторы перераспределения" q и $q^* = 1 - q$, зависящие (симметрично) от Z и Z^* . Примем также, что мезоны, попавшие на мезомолекулярную орбиталь и локализовавшиеся вблизи одного из атомов, на следующей стадии могут перейти на мезоатомные уровни лишь "своего" атома, либо опуститься на другую, более низкую, молекулярную орбиталь. Тогда для дальнейшей судьбы мезона можно указать две (в известном смысле, крайние) возможности.

а) Мезон существует на мезомолекулярной орбитали достаточно долго, и его судьба зависит от факторов перераспределения таким образом, что если мезон локализован, например, вблизи атома Z , то с вероятностью q он девозбуждается на мезоатомные уровни атома Z , а с вероятностью q^* остается в валентной области, где вновь проходит стадию п.2. В этом случае имеем

$$\omega = \frac{p q}{p q + p^* q^*} \quad (4a)$$

и аналогичное выражение для ω^* .

б) Мезон довольно быстро исчезает с мезомолекулярной орбитали и успевает пройти стадию п.2 лишь однажды. Кроме того, движение слабосвязанного мезона на высоковозбужденных орбитах во многом аналогично движению мезона с малой кинетической энергией непосредственно перед кулоновским захватом. Поэтому можно принять, что мезоны, локализовавшись вблизи атома Z или Z*, проходят стадию, аналогичную стадии п.1, и с вероятностями

$$\beta = \frac{n}{n+2\nu}, \quad \beta^* = \frac{n^*}{n^*+2\nu^*} \quad (5)$$

перейдут на мезоатомные уровни атомов Z или Z* соответственно, а с вероятностями $1-\beta$ и $1-\beta^*$ останутся в валентной области. В последнем случае мезоны "распределяются" между мезоатомными орбиталями как атома Z, так и атома Z* в соответствии со значениями вероятностей q и q*. Окончательно получим

$$\omega = p\beta + [p(1-\beta) + p^*(1-\beta^*)]q = p\beta + [1-p\beta - p^*\beta^*]q \quad (46)$$

и аналогичное выражение для ω^* .

4. Для нахождения эффективного числа n электронов остова предположим, следуя работе¹⁰, что в процессе кулоновского захвата мезонов заметную роль играют только не слишком сильно связанные электроны. Определим эффективное число n электронов остова следующим образом:

$$n = \sum_j \rho(E_j) n_j(Z), \quad (6)$$

где E_j - энергия связи (ее абсолютное значение),

$n_j(Z)$ - число электронов j-ой подоболочки атома Z, а $\rho(E_j)$ - эффективность их участия в процессе захвата. Естественно принять, что при $E_j \leq E_0$, где E_0 - некоторое граничное значение энергии, $\rho(E_j) = 1$, а при $E_j > E_0$ указать две, по-видимому, простейшие возможности:

$$а) \rho(E_j > E_0) = 1, \quad (7a)$$

$$б) \rho(E_j > E_0) = \exp[-(E_j - E_0)^2 / E_c^2], \quad (7б)$$

соответствующие "резкой" и "плавной" границам эффективности участия электронов в процессе захвата.

Мы воспользовались указанной схемой расчета для вычисления отношений $A(Z/O)$ захвата отрицательных мюонов в окислах Z_kO_l различных элементов (с некоторыми очевидными модификациями формул для случая перекисей). Заметим, что до сих пор не было предложено подхода, позволяющего количественно воспроизвести экспериментальные данные по окислам.

Вычисления производились для двух случаев, соответствующих предположениям а) и б) в п.п. 3 и 4, причем брались такие значения параметров:

$$а) E_0 = 60 \text{ эВ},$$

$$б) E_0 = 15 \text{ эВ}, E_c = 70 \text{ эВ при } Z \leq 18 \text{ и } E_c = 100 \text{ эВ при } Z \geq 19.$$

Отметим, что в случае б) значение E_0 близко к энергии связи валентных электронов в атоме кислорода, а для элементов 2 и 3 периодов таблицы Менделеева эффективность электронов предполагается несколько более резко зависящей от энергии связи. Значения энергий брались из таблиц¹¹.

Факторы перераспределения в обоих случаях, упомянутых выше, принимались равными

$$q = Z^2 / (Z^2 + Z^{*2}), \quad q^* = 1 - q. \quad (8)$$

Эти выражения были введены в модели больших мезомолекул при объяснении закономерностей захвата пионов в водородсодержащих соединениях.

Полученные величины можно сопоставить с экспериментальными данными^{/12-19/} и с предсказаниями по формулам, предложенным Даниэлем^{/4/}

$$A(Z/Z^*) = Z^{1/3} \ln(0,57 Z) / Z^{*1/3} \ln(0,57 Z^*) \quad (9)$$

и Петрухиным и Суворовым^{/20/}

$$A(Z/Z^*) = (Z^{1/3} - 1) / (Z^{*1/3} - 1). \quad (10)$$

Подобное сопоставление приведено в табл. 1 и на рисунке.

В табл. 1 приведены значения χ^2 , т.е. суммы взвешенных квадратов разностей между предсказываемыми и наблюдаемыми результатами, для окислов элементов различных периодов таблицы Менделеева (более подробные результаты приведены в табл. 2); минимальные значения χ^2 подчеркнуты. Видно, что наш подход дает лучшее общее согласие с экспериментом, чем подходы^{/4,20/} не учитывающие влияния химической связи.

Это улучшение становится еще более заметным, если исключить из рассмотрения отдельные экспериментальные точки, дающие наибольший вклад в значение χ^2 . (Заметим, что принятые нами значения параметров E_0 и E_c хотя и дают неплохое согласие с экспериментом, но не обязательно являются наилучшими оценками в смысле метода наименьших квадратов).

Аналогичное заключение можно сделать также и на основании рисунка, где изображено большинство экспериментальных отношений $A(Z/O)$. По-видимому, можно утверждать, что наш подход вернее других воспроизводит общий ход экспериментальных значений $A(Z/O)$, даже если не придавать решающего значения величине χ^2 при сравнении моделей, поскольку существуют многочисленные разногласия между экспериментальными

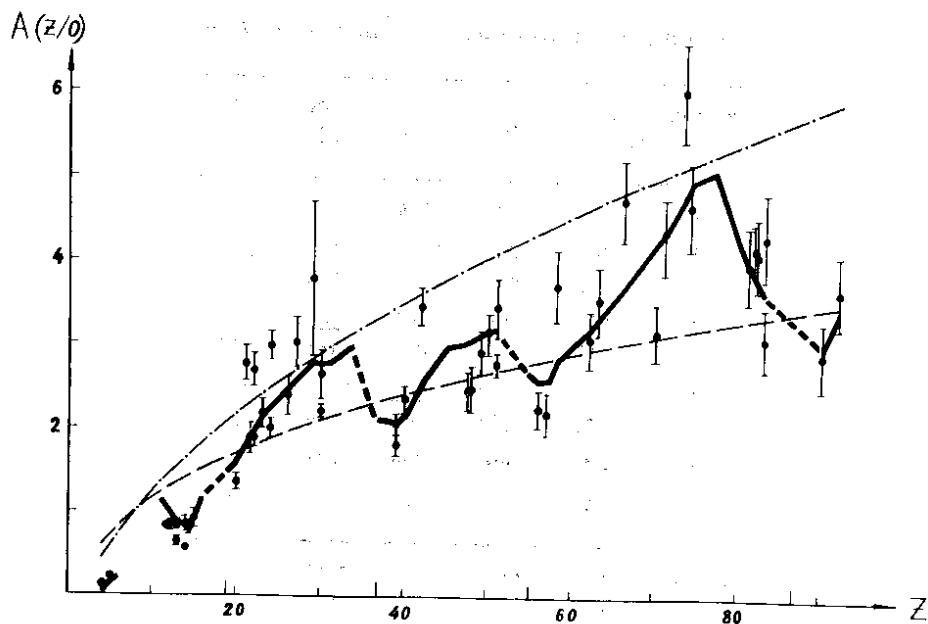
Таблица 1. Значения χ^2 для окислов

Период	Число точек			Наст. раб.		
		/4/	/20/	а)	б)	
2	2	115	234	10	<u>3</u>	
3	10	2479	1476	358	<u>351</u>	
		•) 1638	916	152	<u>95</u>	
4	19	331	260	<u>180</u>	204	
		•) 234	258	133	<u>133</u>	
5	12	1258	<u>184</u>	1216	367	
		•) 553	65	234	<u>51</u>	
6	21	690	174	213	<u>98</u>	
7	4	99	28	<u>20</u>	26	
Всего		68	4972	2356	1997	<u>1049</u>
		65	3329	1675	762	<u>406</u>

* Исключена одна точка, вносящая наибольший вклад в значение χ^2 .

данными. Вероятно, стоит указать также, что отмеченное согласие вычисленных нами значений $A(Z/O)$ с экспериментом в широкой области изменения атомных номеров Z достигнуто с помощью всего лишь двух параметров, E_0 и E_c . В заключение заметим, что с помощью "простого подхода" типа а) одним из нас (Х.Ш.) было получено обнадеживающее согласие и для других типов соединений^{/10/}.

В описанной феноменологической схеме расчетов отношения $A(Z/Z^*)$ подразумевается, что значительная часть мезонов попадает на мезомолекулярные уровни. Для объяснения отсутствия прямых радиационных переходов на основные состояния отдельных мезоатомов было высказано предположение^{/5/}, что преобладающую роль играют оже-переходы на высоковозбужденные



Зависимость $A(Z/O)$ для окислов Z . Точки - экспериментальные данные, штриховая линия - предсказания работы /20/, штрих-пунктирная - работы /4/, сплошная линия - наст. работы, случай б).

уровни мезоатомов. Сделанные нами допущения (см. выше, п. 3б) вполне согласуются с этим предположением.

Очевидно, что предлагаемую схему вычислений можно уточнить. Однако при существующем положении дел с экспериментальными данными, вероятно, преждевременно было бы вносить дальнейшие уточнения в модель. Новые и более точные эксперименты могли бы помочь в развитии этого подхода.

Авторы выражают искреннюю признательность И.А.Югланову за полезные обсуждения, Г.Пиллер и Л.Н.Никитюк за помощь в вычислениях. Один из нас (Л.И.П.) хотел бы поблагодарить СИН (Швейцария) за гостеприимство.

Таблица 2.

Отношения $A(Z/O)$ вероятностей захвата отрицательных мюонов в окислах

Период	$Z_k O_l$	Лит.	Эксперим.		/4/	/20/	Наст. раб.	
			A	B_A			а)	б)
2	BeO	12	0,12	0,04	0,43	0,59	0,03	0,09
	B_2O_3	12	0,22	0,05	0,59	0,71	0,11	0,15
3	MgO	12	0,83	0,07	1,45	1,29	1,01	1,03
		13	0,83	0,04				
	MgO_2	12	0,58	0,03	1,45	1,29	1,01	1,06
		13	0,82	0,05				
	Al_2O_3	12	0,85	0,06	1,55	1,35	0,35	0,87
		14	0,65	0,06				
	SiO_2	12	0,79	0,07	1,65	1,41	0,66	0,82
		14	0,57	0,05				
	15	0,86	0,07					
	P_2O_5	14	0,93	0,11	1,74	1,47	1,09	0,93
4	CaO	12	1,36	0,10	2,18	1,71	1,54	1,59
		16	1,45	0,09				
	Sc_2O_3	12	2,78	0,20	2,26	1,76	1,60	1,77
	TiO_2	12	2,70	0,20	2,34	1,80	2,02	1,95
		16	1,90	0,10				
		17	1,87	0,19				
	V_2O_3	16	2,19	0,18	2,41	1,84	2,29	2,09
	V_2O_4	16	2,28	0,23	2,41	1,84	2,36	2,10
	V_2O_5	12	3,10	0,20	2,41	1,84	2,43	2,12
		16	2,68	0,14				
	Cr_2O_3	12	3,00	0,17	2,49	1,88	2,54	2,27
		16	2,04	0,11				
	Fe_2O_3	17	2,43	0,24	2,63	1,96	1,97	2,49
	Co_2O_3	17	3,04	0,29	2,70	2,00	2,21	2,59
	CuO	12	3,60	0,40	2,84	2,07	2,62	2,88
		18	6,14	0,85				
	Cu_2O	12	3,80	0,90	2,84	2,07	2,48	2,84
	ZnO	12	2,66	0,32	2,91	2,11	2,70	2,81
	19	2,22	0,07					
5	Y_2O_3	12	1,83	0,12	3,47	2,39	2,69	2,11
		16	2,07	0,13				
	ZrO_2	12	2,38	0,16	3,52	2,42	3,14	2,19
	MoO_3	12	3,48	0,23	3,64	2,48	3,81	2,61
	CaO	12	6,70	1,50	3,96	2,63	3,14	3,10
		16	2,47	0,22				
		17	2,50	0,28				

(продолжение)

Период	Z_{K01}	Лит.	Эксперим.		/4/	/20/	Наст. раб.	
			A	σ_A			а)	б)
	In ₂ O ₃	12	2,94	0,28	4,02	2,66	3,57	3,16
	SnO ₂	12	3,17	0,24	4,07	2,68	4,06	3,24
	Sb ₂ O ₃	12	3,48	0,35	4,12	2,71	4,14	3,24
		18	2,79	0,14				
	Sb ₂ O ₅	12	1,73	0,09	4,12	2,71	4,55	3,33
6	BaO	12	2,27	0,22	4,37	2,83	2,42	2,64
		17	1,45	0,18				
	BaO ₂	12	3,28	0,30	4,37	2,83	2,42	2,61
		17	2,23	0,24				
	La ₂ O ₃	17	2,21	0,25	4,41	2,85	2,94	2,64
	CeO ₂	17	3,7	0,4	4,46	2,87	3,35	2,86
	Sm ₂ O ₃	12	3,09	0,34	4,65	2,96	4,14	3,25
	Eu ₂ O ₃	17	3,6	0,4	4,70	2,98	4,88	3,36
	Dy ₂ O ₃	17	4,7	0,5	4,83	3,04	5,18	3,74
	Yb ₂ O ₃	12	3,18	0,34	5,01	3,12	6,16	4,28
	Lu ₂ O ₃	17	4,4	0,5	5,05	3,14	5,94	4,42
	Ta ₂ O ₅	17	6,0	0,6	5,13	3,18	7,02	4,78
	WO ₃	17	4,7	0,5	5,18	3,20	7,59	4,97
	Tl ₂ O ₃	17	4,0	0,5	5,46	3,33	9,84	4,02
	PbO	12	5,80	0,70	5,50	3,34	3,86	3,74
		17	4,1	0,4				
		18	4,56	0,53				
	PbO ₂	12	4,17	0,30	5,50	3,34	3,86	3,83
		17	4,1	0,4				
	Bi ₂ O ₃	12	4,30	0,50	5,54	3,36	4,35	3,65
17		3,1	0,4					
7	ThO ₂	17	2,9	0,4	5,81	3,48	3,27	3,11
		17	3,6	0,4				
	UO ₂	12	6,0	0,5	5,89	3,51	3,85	3,56
		17	4,1	0,5				
U ₃ O ₈	17	4,1	0,5	5,89	3,51	3,85	3,51**	

*) Эта точка вносит наибольший вклад в значение χ^2 для периода.**) Принималось, что U₃O₈ представляет собой смесь 2 UO₃ + UO₂.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fermi E., Teller E. Phys.Rev., 1947, 72, p. 339.
2. Leon M., R.Seki. Nucl.Phys., 1977, A282, p.445.
Leon M., J.H.Miller. Nucl.Phys., 1977, A282, p.461.
3. P. Vogel et al. Nucl. Phys., 1975, A254, p. 445.
4. Daniel H. Phys.Rev.Lett., 1975, 35, p.1649; also in:
Mesons in Matter; JINR, D1,2, 14-10908, Dubna, 1977.
5. Герштейн С.С. и др. УФН, 1969, 97, с.3;
Ponomarev L.I. Ann.Rev.Nucl.Sci., 1973, 23, p. 395.
Герштейн С.С., Пономарев Л.И. В кн.: Мезоны в веществе. ОИЯИ, Д1,2, 14-10908, Дубна, 1977, с. 17.
6. Au-Yang M.Y., Cohen M.L. Phys. Rev., 1968, 174, p.468.
7. Vogel P. et al. Phys.Lett., 1977, 70B, p.39.
8. Коулсон Ч. Валентность. "Мир", М., 1965.
9. Pauling L. The Nature of the Chemical Bond. Cornell University Press, Ithaca, N.Y., 1960.
10. Schneuwly H. In: Exotic Atoms, Pisa, 1977, p. 255; also in: Mesons in Matter, D1,2, 14-10908, JINR, Dubna, 1977, p. 86.
11. Keh-Nigh Huang et al. Atom. Data Nucl. Data Tables, 1976, 18, p. 243.
12. Зинов В.Г. и др. ЯФ, 1965, 2, с. 859.
13. Зинов В.Г. и др. В кн.: Мезоны в веществе. ОИЯИ, Д1,2, 14-10908, Дубна, 1977, с. 150.
14. Sens J.C. et al. Nuovo Cim., 1958, 7, p. 536.
15. Mausner L.F. et al. Phys. Rev., 1977, A15, p. 479.
16. Knight J.D. et al. Phys. Rev., 1976, A13, p. 43.
17. Daniel H. et al. Phys.Lett., 1977, 71B, p. 60.
18. Bajal J.S. et al. Nuovo Cim., 1963, 30, p. 711.
19. Бобров В.Д. и др. ЖЭТФ, 1965, 48, с. 1197.
20. Петрухин В.И., Суворов В.М. ЖЭТФ, 1976, 70, с. 1145.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 апреля 1978 года.