

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

5480/2-80

9/11-81
P4-81-572

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, М.П.Файфман

СКОРОСТИ ДЕВОЗБУЖДЕНИЯ
 μ -МЕЗОМОЛЕКУЛ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА

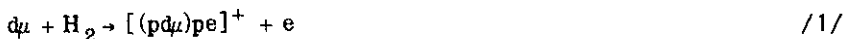
Направлено в ЖЭТФ

1981

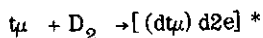
1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно^{/1,2/}, в μ -мезомолекулах происходят реакции синтеза ядер, а также захват μ^- -мезона протонами ядер, причем скорости этих процессов существенным образом зависят от квантового состояния мезомолекул^{/3,4/}.

Мезомолекулы $pp\mu$, $p\bar{d}\mu$, $p\bar{t}\mu$ и $tt\mu$ образуются в реакциях типа^{/1,5,6/}



с конверсией на одном из электронов молекулярного комплекса $[(p\bar{d}\mu)p2e]$, а молекулы $d\bar{d}\mu$ и $d\bar{t}\mu$ - в резонансных реакциях^{/7,8/}



с возбуждением колебательных уровней комплексов $[(d\bar{d}\mu) d2e]$ и $[(d\bar{t}\mu) d2e]$. Мезомолекулы $pp\mu$, $p\bar{d}\mu$ и $p\bar{t}\mu$ образуются преимущественно в состояниях с полным орбитальным моментом $J=1$ и колебательным квантовым числом $v=0$, а мезомолекулы $d\bar{d}\mu$, $d\bar{t}\mu$ и $tt\mu$ - в состояниях с $J=1$, $v=1$.

Для мезомолекул с одинаковыми ядрами ($pp\mu$, $d\bar{d}\mu$, $tt\mu$) скорость перехода ($J=1$) \rightarrow ($J=0$) в основное состояние за время жизни μ^- -мезона крайне мала /например, в случае мезомолекулы $pp\mu$ $\lambda \sim 10^4 \text{ с}^{-1/9/}$ /, поскольку такой переход сопряжен с изменением суммарного спина ядер молекулы и обусловлен релятивистскими эффектами.

Мезомолекулы $p\bar{d}\mu$, $p\bar{t}\mu$ и $d\bar{t}\mu$ переходят в основное состояние путем $E1$ -переходов с конверсией на электроне* молекулярных комплексов типа I ($[(p\bar{d}\mu)pe]^+$, $[(p\bar{t}\mu)pe]^+$ и $[(d\bar{t}\mu)de]^+$) или II ($[(p\bar{d}\mu)p2e]$, $[(p\bar{t}\mu)p2e]$ и $[(d\bar{t}\mu)d2e]$) - в зависимости от соотношения между скоростями λ_A оже-переходов и ско-

*Скорости радиационных переходов составляют величину $\lambda_R \sim 10^5 - 10^6 \text{ с}^{-1}$ и малы по сравнению со скоростями оже-переходов в мезомолекулах^{/1,5/}.

Таблица 1

Скорости дипольного оже-перехода в мезомолекулах $p\mu$ и $pt\mu$

Молекула	$-\epsilon_{10}^{(i)}/\text{эВ}/$	$-\epsilon_{00}^{(f)}/\text{эВ}/$	$\langle d \rangle$	$\lambda_A^{(1)} 10^{11}/\text{с}^{-1}/$	$\lambda_A^{(2)} 10^{11}/\text{с}^{-1}/$
$p\mu$	97,4	221,5	0,28	1,2	2,7
$pt\mu$	99,0	214,0	0,38	2,2	5,1

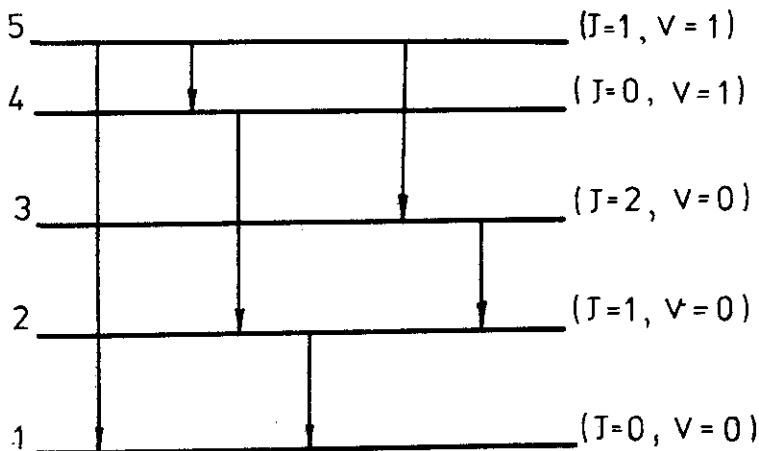
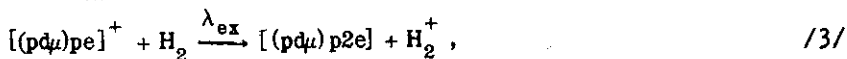


Схема каскадных E1-переходов между состояниями (Jv) мезомолекулы $dt\mu$ с энергиями связи: $\epsilon_{00} = 319,2$ эВ, $\epsilon_{10} = 232,4$ эВ, $\epsilon_{20} = 102,5$ эВ, $\epsilon_{01} = 34,9$ эВ, $\epsilon_{11} = 0,64$ эВ^{10/}.

ростью λ_{ex} реакции перезарядки типа



в результате которой образовавшийся первоначально ион $[(p\mu)pe]^+$ захватывает электрон.

В мезомолекулах $p\mu$ и $pt\mu$ возможен единственный переход $(J=1, v=0) \rightarrow (J=0, v=0)$, поскольку они существуют лишь в этих двух состояниях^{10/}/см. табл. 1/. Мезомолекулы $dt\mu$ существуют в пяти состояниях^{10/}/см. рисунок/. Их девозбуждение из состояния $(J=1, v=1)$ в основное состояние $(J=0, v=0)$ происходит преимущественно путем каскадных E1-переходов.

В данной работе вычислены скорости $\lambda_A^{(1)}$ и $\lambda_A^{(2)}$ оже-переходов в мезомолекулах $p\mu$, $pt\mu$ и $dt\mu$, являющихся "ядрами" молекулярных комплексов типа I и II соответственно.

2. ДЕВОЗБУЖДЕНИЕ ПУТЕМ E1-ПЕРЕХОДА

Вероятность перехода мезомолекулы из начального (i) в конечное (f) состояние с испусканием оже-электрона в интервале импульсов \vec{q} и $\vec{q} + d\vec{q}$ равна ^{/6/}

$$dW_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) d\vec{q}, \quad /4/$$

здесь: E_i и E_f - полные энергии конечного и начального состояний комплекса /I или II/, $E_i = \epsilon_{J_V}^{(i)} + \epsilon_I$, $E_f = \epsilon_{J_V}^{(f)} + q^2/2m_e$, $\epsilon_{J_V}^{(i)}$ и $\epsilon_{J_V}^{(f)}$ - энергии связи мезомолекулы в начальном и конечном состояниях с полными орбитальными моментами $J^{(i,f)}$ и колебательными квантовыми числами $v^{(i,f)}$, ϵ_I - энергия связи электрона в основном состоянии комплекса, \vec{q} - импульс электрона конверсии, m_e - масса электрона.

Матричный элемент перехода равен:

$$|T_{fi}|^2 = \frac{1}{2J^{(i)} + 1} \sum_{m_J^{(i)}} \sum_{m_J^{(f)}} \left| \int d\vec{R} d\vec{r}_\mu d\rho \Psi^{(f)*}(\vec{r}_\mu, \vec{R}) \Psi^{(f)*}(\rho) \hat{H}_{int} \Psi^{(i)}(\rho) \Psi^{(i)}(\vec{r}_\mu, \vec{R}) \right|^2, \quad /5/$$

где $\Psi^{(i)}(\vec{\rho})$ и $\Psi^{(f)}(\vec{\rho})$ - волновые функции электрона конверсии в начальном и конечном состояниях, $\vec{\rho}$ - координата электрона, отсчитанная от центра масс мезомолекулы, $\Psi^{(i)}(\vec{r}_\mu, \vec{R})$ и $\Psi^{(f)}(\vec{r}_\mu, \vec{R})$ - волновые функции мезомолекулы, \vec{R} - радиус-вектор, соединяющий ядра мезомолекулы, \vec{r}_μ - координата μ -мезона, отсчитанная от середины отрезка R, и проведено усреднение по проекциям $m_J^{(i)}$ орбитального момента $J^{(i)}$ в начальном и суммирование по проекциям $m_J^{(f)}$ в конечном состояниях.

Оператор возмущения \hat{H}_{int} в дипольном приближении имеет вид

$$\hat{H}_{int} = -e \frac{\vec{d} \cdot \vec{\rho}}{\rho^3}, \quad /6/$$

где дипольный момент $\vec{d} = \vec{d}(\vec{r}_\mu, \vec{R})$ мезомолекулы равен ^{/6/}

$$\vec{d} = -e \left[\frac{\kappa}{2} \left(1 - \frac{M_\mu}{M_{tot}}\right) \vec{R} + \left(1 + \frac{M_\mu}{M_{tot}}\right) \vec{r}_\mu \right], \quad /7/$$

$$\kappa = (M_b - M_a) / (M_b + M_a), \quad M_{tot} = M_a + M_b + M_\mu.$$

Здесь M_μ - масса μ -мезона, $M_a > M_b$ - массы ядер мезомолекулы, M_{tot} - полная масса мезомолекулы.

Волновые функции электрона в начальном и конечном состояниях /в атомных единицах $e = \hbar = m_e = 1$ / выбраны соответственно в виде ^{/5,6/}

$$\Psi^{(i)}(\vec{\rho}) = \left[\frac{Z_0^3}{2\pi(1+\Delta)} \right]^{1/2} \left(e^{-Z_0 \rho} + e^{-Z_0 |\rho - \vec{R}_p|} \right), \quad /8a/$$

$$\Psi^{(f)}(\vec{\rho}) = \frac{3i}{4\pi q} e^{-i\sigma_1} R_{q1}(\rho) \cos\theta_{q\rho},$$

$$R_{q1}(\rho) = \frac{2}{3} q^2 \left[\frac{\eta(1+\eta^2)}{1-e^{-2\pi\eta}} \right]^{1/2} \rho F(2+i\eta, 4; 2iq\rho),$$

$$R_{q1}(\rho) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\rho} \sin(q\rho + \eta \ln 2q\rho - \frac{\pi}{2} + \sigma_1); \quad \eta = \frac{Z^*}{q}. \quad /86/$$

Здесь Z_0 и Z^* - эффективные заряды, в поле которых движется электрон в начальном и конечном состояниях комплекса, \vec{R}_p - радиус-вектор между центром масс мезомолекулы и другим ядром комплекса, $\theta_{q\rho}$ - угол между векторами \vec{q} и $\vec{\rho}$; $\sigma_1 = \arg\Gamma(2-i\eta)$ - кулоновская фаза в состоянии с моментом $\ell = 1$.

В данной работе использованы следующие значения параметров^{/12/}, характеризующих молекулярные комплексы типа I /аналогичные молекулярному иону H_2^+ / и II /аналогичные молекуле H_2 /:

для комплексов I

$$Z_0 = 1,25; \quad R_p = 2,00, \quad \Delta = 0,468; \quad Z^* = 2, \quad /9a/$$

для комплексов II

$$Z_0 = 1,19; \quad R_p = 1,40; \quad \Delta = 0,677; \quad Z^* = 1. \quad /96/$$

Волновые функции мезомолекул вычислены в адиабатическом представлении задачи трех тел^{/13/}

$$\Psi^{(i,f)}(\vec{r}_\mu, \vec{R}) = \sum_{m=0}^{J(i,f)} \sum_j F_{jm}^{J(i,f)}(\vec{r}; R, \Theta, \Phi) \frac{1}{R} \chi_{jm}^{(i,f)}(R),$$

$$F_{jm}^J(\vec{r}; R, \Theta, \Phi) = [2(1 + \delta_{0m})]^{-1/2} \{ \phi_{jm}(\vec{r}; R) D_{mmJ}^J(\Phi, \Theta, 0) + \quad /10/$$

$$+ \phi_{j,-m}(\vec{r}; R) D_{-mmJ}^J(\Phi, \Theta, 0) \},$$

где $D_{mmJ}^J(\Phi, \Theta, 0)$ - нормированные D-функции Вигнера, $\phi_{jm}(\vec{r}; R)$ - полный набор решений задачи двух кулоновских центров^{/14/}, \vec{r} - координаты мезона во вращающейся системе координат, ось Z которой направлена по вектору \vec{R} . Связь между компонентами вектора $\vec{r}_\mu = (x_\mu, y_\mu, z_\mu)$ в лабораторной системе координат и компонентами вектора $\vec{r} = (x, y, z)$ определена соотношениями^{/13/}:

$$\begin{pmatrix} x_\mu \\ y_\mu \\ z_\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\Theta \cos\Phi & -\sin\Phi & \sin\Theta \cos\Phi \\ \cos\Theta \sin\Phi & \cos\Phi & \sin\Theta \sin\Phi \\ -\sin\Theta & 0 & \cos\Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad /11/$$

Знак \sum_j в формулах /10/ означает суммирование по дискретным и интегрирование по непрерывному спектру задачи двух центров^{/13/}, $j = [n_1 n_2 p]$ - набор параболических квантовых чисел, соответствующий четному ($p=g$) и нечетному ($p=u$) решениям задачи двух центров^{/14/}.

Волновые функции $\phi_{jm}(\vec{r}; R)$ ортонормированы условием

$$\int d\vec{r} \phi_{jm}(\vec{r}; R) \phi_{j'm'}^*(\vec{r}; R) = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad /12/$$

Функции $\chi_{jm}^{(i,f)}(R) \equiv \chi_{jm}^{(jv)}(R)$ представляют относительное движение ядер мезомолекулы в начальном (i) и конечном (f) состояниях с энергиями $\epsilon_{jv}^{(i)}$ и $\epsilon_{jv}^{(f)}$ соответственно и удовлетворяют соотношению ортогональности

$$\sum_{m=0}^J \sum_j \int dR \chi_{jm}^{jv'}(R) \chi_{jm}^{jv}(R) = \delta_{vv'} \quad /13/$$

Выделяя размерные множители всех величин, входящих в выражение для T_{fi} в формуле /5/*, и проводя интегрирование по координатам $\vec{\rho}$, \vec{r} , \vec{R} и импульсам \vec{q} электрона в конечном состоянии, получим следующее выражение для скоростей $\lambda_A^{(1,2)}(E1) \equiv W_{fi}^{E1}$ -перехода в мезомолекуле:

$$\lambda_A^{(1,2)}(E1) = \beta \frac{4\pi}{3} \left(\frac{m_e}{m_a}\right)^2 \frac{Z_0^3}{1+\Delta} \frac{1}{q} |I(q)|^2 |<d>|^2 \frac{m_e e^4}{\hbar^3} c^{-1} \quad /14/$$

Здесь $\beta=1$ для переходов в комплексах типа I, $\beta=2$ в комплексах типа II, $m_a^{-1} = M_\mu^{-1} + M_a^{-1}$, где M_a - масса более тяжелого ядра мезомолекулы,

$$I(q) = \int_0^\infty d\rho R_{q1}(\rho) e^{-Z_0 \rho} + \frac{1}{2} \int_0^\infty d\rho R_{q1}(\rho) \int_{-1}^1 d \cos\theta \rho R_\rho e^{-Z_0 |\vec{\rho} - \vec{R}_\rho|},$$

$$|<d>|^2 = \frac{1}{2J^{(i)} + 1} \sum_{m_J^{(i)}} \sum_{m_J^{(f)}} \left| \int d\vec{R} d\vec{r}_\mu \Psi^{(f)*}(\vec{r}_\mu, \vec{R}) d(\vec{r}_\mu, \vec{R}) \Psi^{(i)}(\vec{r}_\mu, \vec{R}) \right|^2 \quad /15/$$

* Величина $\frac{1}{q} |I(q)|^2$ вычислена в атомных единицах, величина $|<d>|^2$ - в единицах задачи ($e = \hbar = m_a = 1$). Размерности волновых функций /8а/, /8б/, /10/ равны соответственно $a_e^{-3/2}$, 1 , $a_m^{-3/2}$, где $a_e = \hbar^2 / m_e e^2$, $a_m = \hbar^2 / m_a e^2$.

Величина $|\langle d \rangle|^2$ для переходов $(J^{(i)}=1) \rightarrow (J^{(f)}=0)$ и $(J^{(i)}=1) \rightarrow (J^{(f)}=2)$ равна соответственно

$$(2J^{(i)}+1) |\langle d \rangle|^2 = \left[\frac{\kappa}{2} \left(1 - \frac{M_\mu}{M_{\text{tot}}} \right) \int_0^\infty dR \cdot R D_{00}^{(0)} + \right. \\ \left. + \left(1 + \frac{M_\mu}{M_{\text{tot}}} \right) \int_0^\infty dR (D_{00}^{(1)} - \sqrt{2} D_{01}^{(1)}) \right]^2, \quad /16a/$$

$$(2J^{(i)}+1) |\langle d \rangle|^2 = 2 \left[\frac{\kappa}{2} \left(1 - \frac{M_\mu}{M_{\text{tot}}} \right) \int_0^\infty dR \cdot R (D_{00}^{(0)} + \frac{\sqrt{3}}{2} D_{11}^{(0)}) + \right. \\ \left. + \left(1 + \frac{M_\mu}{M_{\text{tot}}} \right) \int_0^\infty dR (D_{00}^{(1)} + \frac{\sqrt{3}}{2} D_{11}^{(1)} + \frac{1}{\sqrt{2}} D_{01}^{(1)} + \sqrt{\frac{3}{2}} (D_{10}^{(1)} + D_{21}^{(1)})) \right]^2. \quad /16б/$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$D_{mm}^{(0)} \equiv D_{mm}^{(0)}(R) = \sum_j \chi_{jm}^{(f)}(R) \chi_{jm}^{(i)}(R), \quad m=0,1.$$

$$D_{m'm}^{(1)} \equiv D_{m'm}^{(1)}(R) = \sum_{j,j'} \langle j'm' | r_k | jm \rangle \chi_{j'm'}^{(f)}(R) \chi_{jm}^{(i)}(R), \quad m=0,1,2, \quad /17/$$

где $\langle j'm' | r_k | jm \rangle$ - дипольные моменты μ -мезона, движущегося в поле двух фиксированных кулоновских центров /11/:

$$\langle j'm' | r_k | jm \rangle = \int d\vec{r} \phi_{jm}^*(\vec{r}; R) r_k \phi_{jm}(\vec{r}; R), \\ r_k = \begin{cases} z, & m'=m, \quad k=0, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm iy), & m'=m \mp 1, \quad k=\pm 1. \end{cases} \quad /18/$$

Для переходов $(J^{(i)}=0) \rightarrow (J^{(f)}=1)$ и $(J^{(i)}=2) \rightarrow (J^{(f)}=1)$ в выражениях /16а,б/ следует сделать замену индексов $D_{mm}^{(1)} \leftrightarrow D_{mm}^{(1)}$.

При скоростях девозбуждения мезомолекул, больших скорости реакции перезарядки /3/, т.е. при $\lambda_A(E1) > \lambda_{ex}$ девозбуждение мезомолекул происходит в комплексах типа I / $\beta=1$ в формуле /14//, при $\lambda_A(E1) < \lambda_{ex}$ комплекс типа I успеет захватить электрон, и E1-переход в мезомолекуле осуществляется в комплексе типа II ($\beta=2$).

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В табл.1 представлены скорости E1-переходов в мезомолекулах p_{μ}^{\downarrow} и r_{μ}^{\downarrow} из состояния $(J=1, v=0)$ с энергией связи $\epsilon_{Jv}^{(i)}$ в состояние $(J=0, v=0)$ с энергией связи $\epsilon_{Jv}^{(f)}$ и величины $|\langle d \rangle|$, определенные формулами /16/-/18/ в единицах $(e = \hbar = m_a = 1)$. Скорости $\lambda_A^{(1)}$ и $\lambda_A^{(2)}$ соответствуют E1-переходам с конверсией на электронах молекулярных комплексов типа I и II. Отметим, что вычисленная нами скорость перехода в мезомолекуле p_{μ}^{\downarrow} по порядку величины согласуется с оценками работы /1/ и совпадает с результатами наших прежних расчетов /15/, однако отличается от величины $0,25 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$, полученной в работе /5/.

В табл.2 приведены скорости каскадных E1-переходов $\lambda_A^{(1)}$ и $\lambda_A^{(2)}$ в мезомолекуле d_{μ}^{\downarrow} . В этой таблице отсутствуют значения скоростей $\lambda_A^{(1)}$ переходов из состояния $(J=1, v=1)$, поскольку мезомолекулы d_{μ}^{\downarrow} в этом состоянии образуются лишь в реакциях типа /2/, и переходы из него всегда происходят с конверсией на одном из двух электронов комплекса $[(d_{\mu}^{\downarrow} d_2 e)]$. Нумерация состояний вместе со схемой каскадных переходов представлена на рисунке.

Таблица 2

Скорости отдельных оже-переходов в мезомолекуле d_{μ}^{\downarrow}

$N \rightarrow N'$	5 \rightarrow 4	5 \rightarrow 3	5 \rightarrow 1	4 \rightarrow 2	3 \rightarrow 2	2 \rightarrow 1
$ \langle d \rangle $	0,52	0,27	0,03	0,24	0,16	0,11
$\lambda_A^{(1)}, 10^{11}/\text{c}^{-1} /$	-	-	-	0,28	0,33	0,20
$\lambda_A^{(2)}, 10^{11}/\text{c}^{-1} /$	11,4	1,3	0,02	0,58	0,74	0,49

При вычислениях использованы волновые функции $\chi_{jm}^{Jv}(R)$ и энергии ϵ_{Jv} мезомолекул, найденные в работе /10/, а также дипольные моменты /18/, приведенные в работе /11/. В выражениях /17/ использованы дипольные моменты $\langle j'm'|r_k|jm \rangle$, связывающие первые 26 состояний дискретного спектра задачи двух центров. Как показали численные расчеты, вклад высших состояний составляет $\sim 10^{-2}$, поэтому для вычисления $|\langle d \rangle|$ с этой точностью достаточно учесть лишь вклад от матричного элемента $\langle 000g|r_0|000u \rangle$.

Основная погрешность в вычисленных нами скоростях девозбуждения обусловлена недостаточным знанием волновых функций электрона конверсии в начальном и конечном состояниях. Вычисления показывают, что варьирование значения Z^* в пределах $1 \leq Z^* \leq 2$ приводит к изменению скоростей девозбуждения на 5-10% от приведенного значения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вычисленные в данной работе скорости девозбуждения в мезо-молекулах необходимы при расчете кинетики процессов мюонного катализа в смеси изотопов водорода ¹⁸/.

При необходимости достигнутую в настоящей работе точность вычислений можно повысить, используя более точные волновые функции электрона конверсии, а также включая большее число слагаемых в разложение /10/*.

В заключение авторы выражают благодарность В.С.Мележику и Л.Н.Сомову за помощь в проведении численных расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я.Б., Герштейн С.С. УФН, 1960, 71, с.581.
2. Gerstein S.S., Ponomarev L.I. In: Muon Physics. Ed. V.W.Hughes, C.S.Wu, Academic Press, New York, 1975, vol.3, p.141.
3. Bogdanova L.N. et al. JINR, E4-80-819, Dubna, 1980.
4. Балашов В.В., Коренман Г.Я., Эрамжан Р.Ф. Поглощение мезонов атомными ядрами. Атомиздат, М., 1978.
5. Cohen S., Judd D.L., Riddell R.J., Jr. Phys.Rev., 1960, 119, p.397.
6. Пономарев Л.И., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1976, 71, с.1689.
7. Весман Э.А. Письма в ЖЭТФ, 1967, 5, с.113.
8. Веницкий С.И. ЖЭТФ, 1978, 74, с.849.
9. Bakalov D.D. et al. JINR, E4-80-720, Dubna, 1980.
10. Веницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1980, 79, с.698.
11. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F. J.Phys., 1978, B11, p.3861.
12. Pauling L., Wilson E.B. Introduction to Quantum Mechanics. McGraw-Hill, New York, 1935.
13. Веницкий С.И., Пономарев Л.И. ЯФ, 1974, 20, с.576.
14. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
15. Пономарев Л.И., Файфман М.П. ОИЯИ, Р4-10635, Дубна, 1977.
16. Герштейн С.С. и др. ЖЭТФ, 1980, 78, с.2099.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 августа 1981 года.

* Скорости монополярных E0-переходов в мезомолекуле dt_{μ} , вычисленные по схеме, приведенной в работе ¹⁸/, малы по сравнению с E1-переходами и составляют величину $\lambda_{\Delta}(E0) \sim 10^6 - 10^8 \text{ с}^{-1}$.