

ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ СКОРОСТИ РЕАКЦИИ ПЕРЕДАЧИ МЮОНА С ПРОТОНА НА КИСЛОРОД

© 2022 г. С. В. Романов*

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

Поступила в редакцию 21.05.2021 г.; после доработки 18.06.2021 г.; принята к публикации 18.06.2021 г.

Представлены результаты расчета скорости реакции передачи мюона из состояния $1s$ мезоатома водорода на ядро свободного атома кислорода в интервале энергий столкновения от 10^{-4} до 10 эВ. Расчет выполнен в рамках предложенного ранее варианта метода возмущенных стационарных состояний с учетом электронного экранирования во входном канале реакции. Предсказано существование p -волнового резонанса в скорости реакции при энергии столкновения около 0.1 эВ. Этот результат представляет интерес в связи с планируемым лазерным экспериментом по прецизионному измерению энергии сверхтонкого расщепления состояния $1s$ мезоатома водорода.

DOI: 10.31857/S0044002722010111

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе рассматривается реакция прямой передачи отрицательного мюона μ из основного состояния $1s$ мезоатома водорода $\mu p(1s)$ на ядро кислорода O :



p — протон, μO^* — мезоатом кислорода в возбужденном состоянии. Обозначим через E энергию столкновения и введем скорость реакции $q(E) = N_H v \sigma(E)$. По традиции скорость отнесена к атомной плотности жидкого водорода $N_H = 4.25 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$; $v = \sqrt{2E/M}$ — скорость относительного движения во входном канале, M — приведенная масса канала, $\sigma(E)$ — полное сечение реакции, просуммированное по всем конечным состояниям мезоатома кислорода. При экспериментальном изучении реакций типа (1) в плотных газовых смесях измеряется скорость $\lambda(T)$ передачи мюона с термализованных мезоатомов. Она зависит от температуры смеси T и, будучи также приведена к плотности N_H , получается в результате усреднения скорости $q(E)$ по распределению относительных скоростей во входном канале реакции. В частности, при передаче мюона на ядро свободного атома усреднение выполняется по распределению Максвелла.

Мезоатом водорода представляет собой электрически нейтральный объект, размер которого на

два порядка меньше размеров атомов. В этом отношении он подобен нейтрону. Реакция (1) является экзоэнергетической с энерговыделением порядка нескольких кэВ. Как известно [1], при малых энергиях столкновения, когда основную роль играет s -волна, сечение такой реакции обратно пропорционально относительной скорости: $\sigma(E) \propto 1/v$. В этом случае скорость реакции $q(E)$ не зависит от энергии, а скорость $\lambda(T)$ не зависит от температуры. Экспериментально реакция (1) изучалась в работе [2] в газовых смесях водорода и кислорода, находившихся при комнатной температуре и давлении от 3 до 15 бар. Относительная концентрация кислорода составляла несколько промилле. Наблюдалась зависимость от времени скорости счета запаздывающих рентгеновских квантов, излучаемых мезоатомами кислорода. Было обнаружено, что эта зависимость не является чисто экспоненциальной. Этот факт интерпретировался как проявление зависимости скорости реакции от энергии столкновения в надтепловой области энергий $E = 0.1-0.2$ эВ. Для того чтобы количественно описать наблюдаемые результаты, было выполнено моделирование кинетики замедления мезоатомов водорода в газовых смесях с учетом передачи мюонов на кислород. Предполагалось, что зависимость скорости реакции от энергии столкновения имеет форму ступеньки. Было найдено, что наилучшее согласие с опытными данными обеспечивается функцией $q(E)$ следующего вида:

*E-mail: Romanov_SVi@nrcki.ru; serguei.romanov@yandex.ru

$$q(E) = \begin{cases} 8.5(2) \times 10^{10} \text{ с}^{-1}, & E < 0.12 \text{ эВ}; \\ 3.9 \begin{pmatrix} +0.5 \\ -1.3 \end{pmatrix} \times 10^{11} \text{ с}^{-1}, & 0.12 < E < 0.22 \text{ эВ}. \end{cases} \quad (2)$$

Верхнее значение есть скорость передачи с мезоатомов, термализованных при комнатной температуре, нижнее соответствует надтепловой области энергий. Как видно, скорость реакции в надтепловой области почти в пять раз больше. В связи с этим результатом в работе [3] было предложено использовать реакцию передачи мюона на кислород в лазерном эксперименте по прецизионному измерению энергии сверхтонкого расщепления состояния $1s$ мезоатома водорода. Рассмотрим идею этого эксперимента.

Как и в обычном атоме водорода, уровень энергии состояния $1s$ мезоатома расщеплен на две компоненты, характеризующиеся значениями полного углового момента $F = 0$ и 1 . Меньшую энергию имеет состояние с $F = 0$. Энергия расщепления ΔE_{1s} определяется в основном поправкой первого порядка теории возмущений по взаимодействию магнитных моментов частиц. В случае атома водорода соответствующий результат хорошо известен [1]. Заменяя в нем магнитный момент электрона на магнитный момент мюона и учитывая приведенную массу мезоатома водорода, получаем $\Delta E_{1s} \approx 0.18$ эВ. Длина волны перехода между сверхтонкими компонентами составляет 6.8 мкм. Что касается времени жизни состояния $1s$, то в водороде с небольшой примесью кислорода оно определяется в основном распадом мюона и реакцией передачи мюона на кислород. Скорость мюораспада равна $4.5 \times 10^5 \text{ с}^{-1}$. Следуя результату (2), примем для оценки, что скорость реакции передачи, отнесенная к плотности жидкого водорода, порядка 10^{11} с^{-1} . Тогда, например, при давлении 40 бар, комнатной температуре и относительной концентрации кислорода 0.1 промилле скорость реакции передачи становится порядка скорости мюораспада и время жизни состояния $1s$ составляет примерно 1 мкс.

Мезоатом водорода в состоянии $1s$ образуется в результате каскадного захвата мюона. При этом заселяются обе компоненты сверхтонкой структуры, а кинетическая энергия мезоатома может варьироваться в широких пределах. При движении через газ мезоатом замедляется, теряя энергию в столкновениях с молекулами водорода. При этом взаимодействие магнитных моментов мюона и протонов молекул приводит к перевороту спина мюона, в результате чего мезоатом оказывается в нижнем по энергии состоянии сверхтонкой структуры с полным моментом $F = 0$. Согласно результатам

моделирования, проведенного в работе [4], при давлении 40 бар, комнатной температуре и начальной энергии мезоатома порядка 20 эВ характерное время замедления до тепловых скоростей составляет 150 нс. Характерное время переворота спина на порядок меньше — 10–15 нс. Таким образом, после термализации практически все мезоатомы находятся в нижнем состоянии сверхтонкой структуры. Если теперь пропустить через газ лазерный импульс, настроенный на частоту перехода между сверхтонкими компонентами, то часть мезоатомов окажется в верхнем состоянии с полным моментом $F = 1$. Сталкиваясь с молекулами водорода, эти мезоатомы снова переходят в состояние с $F = 0$. В каждом таком столкновении энергия перехода 0.18 эВ делится между мезоатомом и молекулой. С учетом отношения масс и возможности переходов между вращательными состояниями молекулы водорода можно утверждать, что мезоатом получает дополнительную кинетическую энергию около 0.1 эВ. Таким образом, после прохождения лазерного импульса в газе имеются мезоатомы в состоянии с $F = 0$, часть из которых по-прежнему термализована, а часть ускорена до надтепловых энергий. Очевидно, что зависимость количества надтепловых мезоатомов от частоты лазерного излучения имеет резонансный характер. По виду этой зависимости можно определить энергию сверхтонкого расщепления. Если для детектирования надтепловых мезоатомов водорода использовать реакцию передачи мюона на ядро более тяжелого элемента, то передача с термализованных мезоатомов образует нежелательный фон. Наиболее подходящей является реакция, скорость которой резко возрастает при переходе от тепловых энергий к надтепловым. Этому требованию как раз удовлетворяет реакция передачи мюона на кислород. В данном случае наблюдаемой величиной является количество запаздывающих рентгеновских квантов, излучаемых мезоатомами кислорода. Поскольку оно пропорционально количеству мезоатомов, то также должно резонансным образом зависеть от частоты лазерного излучения.

С целью выбора оптимальных условий для лазерного эксперимента в работах [5, 6] были выполнены новые измерения скорости реакции (1). Авторы поставили перед собой задачу определить вид энергетической зависимости скорости реакции для тепловых и надтепловых энергий. Для того чтобы избежать неопределенностей, связанных с

начальным распределением мезоатомов водорода по кинетическим энергиям, экспериментально изучалась температурная зависимость скорости $\lambda(T)$ передачи мюона с термализованных мезоатомов. Газовая смесь водорода с кислородом находилась под давлением 41 бар, относительная концентрация кислорода составляла 0.19 промилле, температура смеси менялась от 104 до 300 К. Как и в работе [2], наблюдался временной спектр рентгеновских квантов, излучаемых мезоатомами кислорода. Для определения скорости реакции использовалась часть спектра, отстоящая от момента образования мезоатомов кислорода на время большее одной микросекунды. Полученные результаты представлены в табл. 1. Первоначально они были опубликованы в препринте [5], а затем, после некоторой корректировки, в статье [6]. Новые значения скорости реакции при комнатной температуре хорошо согласуются с результатом (2). Обращает на себя внимание быстрый рост скорости реакции при увеличении температуры. Это означает, что для энергий столкновения, соответствующих рассматриваемому интервалу температур, закон $1/v$ для сечения реакции не работает. Для того чтобы воспроизвести наблюдаемую температурную зависимость, в препринте [5] была предложена квадратичная аппроксимация энергетической зависимости скорости реакции, которая, как полагают авторы, справедлива в интервале энергий столкновения $0.01 < E < 0.1$ эВ:

$$q(E) = p_1 + p_2E + p_3E^2. \quad (3)$$

Значения коэффициентов p_i приведены в табл. 2. Они были получены усреднением функции (3) по распределению Максвелла и подгонкой получившегося результата под экспериментальные данные, представленные в табл. 1. Если взять центральные значения коэффициентов, то максимальное значение функции (3) достигается при энергии 0.097 эВ и составляет $1.74 \times 10^{11} \text{ с}^{-1}$, что качественно согласуется с результатом (2) для надтепловых энергий.

Рассмотрим теперь результаты имеющихся расчетов скорости реакции [7–12]. Следует отметить, что в реакции (1) мюон передается на ядро молекулы кислорода. В расчетах, выполненных до настоящего времени, молекулярные эффекты не учитывались, хотя они, по-видимому, могут быть существенны при небольших энергиях столкновения. Расчеты выполнялись для передачи мюона либо на “голое” ядро кислорода, лишённое электронной оболочки, либо на ядро свободного атома. В последнем случае в потенциале поляризованного взаимодействия мезоатома водорода с атомом кислорода учитывалось экранирование заряда ядра атомными электронами. Результаты, полученные для скорости передачи мюона с мезоатомов водорода, термализованных при комнатной

Таблица 1. Экспериментальные значения скорости $\lambda(T)$ передачи мюона с термализованных мезоатомов водорода на кислород при различных температурах (ошибки приведены в виде $\pm\sigma_1 \pm \sigma_2$, где σ_1 включает в себя ошибки статистики и систематические ошибки, связанные с вычитанием фона из энергетического спектра рентгеновского излучения, σ_2 — остальные систематические ошибки)

T, К	$\lambda(T), 10^{10} \text{ с}^{-1}$	
	[5]	[6]
104	$3.25 \pm 0.10 \pm 0.07$	$3.07 \pm 0.29 \pm 0.07$
153	$5.00 \pm 0.11 \pm 0.10$	$5.20 \pm 0.33 \pm 0.10$
201	$6.38 \pm 0.10 \pm 0.13$	$6.48 \pm 0.32 \pm 0.13$
240	$7.62 \pm 0.12 \pm 0.16$	$8.03 \pm 0.35 \pm 0.16$
272	$8.05 \pm 0.12 \pm 0.17$	$8.18 \pm 0.37 \pm 0.17$
300	$8.68 \pm 0.12 \pm 0.18$	$8.79 \pm 0.39 \pm 0.18$

температуре, представлены в табл. 3. Все они, за исключением результатов работы [12], неплохо согласуются с экспериментом. Сложнее обстоит дело с энергетической зависимостью скорости реакции. В работе [7] передача мюона на “голое” ядро кислорода рассматривалась в модели Ландау–Зинера. При учете вклада только s -волны было получено, что при увеличении энергии столкновения скорость реакции сначала постоянна, а затем начинает убывать. Такая же зависимость была предсказана в работе [8]. Соответствующий расчет был выполнен на основе уравнений Фаддеева для энергий столкновения $E \leq 0.5$ эВ. Как и в [7], рассматривалась передача мюона на “голое” ядро кислорода и учитывался вклад только s -волны. Важный шаг был сделан в работе [9], авторы которой включили в рассмотрение парциальные волны с отличными от нуля значениями орбитального момента. Использовалось приближение двух состояний и модель Ландау–Зинера в более рафинированном варианте, чем в работе [7]. Кроме того, учитывалось электронное экранирование во входном канале реакции. В результате было предсказано существование d -волнового резонанса в скорости реакции при энергии столкновения около 0.19 эВ. Ширина резонанса и пиковое значение скорости качественно согласуются с экспериментальным результатом (2) для надтепловых энергий. В дальнейшем роль парциальных волн с ненулевыми орбитальными моментами изучалась в работах [10, 11]. Расчет скорости реакции был выполнен в рамках метода гиперсферических эллиптических координат; электронное экранирование не учитывалось. Результаты расчета резко отличаются от результатов работы [9]. Было получено, что

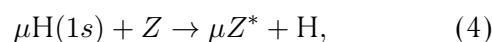
при энергиях столкновения $2 \times 10^{-3} < E < 1$ эВ основной вклад в скорость реакции дает p -волна. С ростом энергии скорость проходит через широкий максимум при тепловых энергиях, достигая значения около $8 \times 10^{10} \text{ с}^{-1}$, а затем монотонно убывает вплоть до энергии 2 эВ. Таким образом, расчет, выполненный в работах [10, 11], хорошо воспроизводит значение скорости реакции для термализованных мезоатомов, но его результаты противоречат экспериментальному факту увеличения скорости для надтепловых энергий. Наконец, еще один расчет был выполнен в работе [12]. Использовался один из вариантов метода гиперсферических функций, причем вычисления были сделаны для передачи мюона как на “голое” ядро кислорода, так и на ядро свободного атома с учетом электронного экранирования. В обоих случаях было предсказано существование широкого p -волнового максимума в энергетической зависимости скорости реакции, однако его положение и высота оказались очень чувствительны к электронному экранированию. В случае передачи мюона на “голое” ядро максимум также располагался при тепловых энергиях, но его высота получилась в восемь раз большей, чем в работах [10, 11]. При учете электронного экранирования кривая энергетической зависимости сильно проседала вниз при энергиях столкновения $E < 0.1$ эВ. В результате максимум смещался к энергии 0.11 эВ и становился менее резким. Значение скорости реакции в максимуме получилось равным примерно $1.3 \times 10^{11} \text{ с}^{-1}$. Этот результат качественно согласуется с наблюдаемым увеличением скорости реакции в надтепловой области энергий. Что касается скорости передачи с термализованных мезоатомов, то расчет воспроизводит ее экспериментальное значение не очень хорошо. Скорость, рассчитанная для передачи мюона на “голое” ядро кислорода, получилась примерно в три раза большей. Электронное экранирование оказалось в этом случае еще более заметным. Его учет понизил скорость реакции почти в шесть раз до половины экспериментального значения. Таким образом, результаты расчетов, выполненных в работах [9–12], показывают важность учета парциальных волн с ненулевыми орбитальными моментами и электронного экранирования. Однако энергетические зависимости скорости реакции, предсказанные в этих работах, заметно отличаются друг от друга.

В связи с неоднозначностью рассмотренных выше теоретических результатов в настоящей работе был проведен расчет скорости реакции (1) для энергий столкновения $10^{-4} \leq E \leq 10$ эВ. Использовался один из вариантов метода возмущенных стационарных состояний, предложенный в работе [13]. Ранее он применялся для расчета скорости передачи мюона с водорода на неон [14]. Метод

основан на значительной разнице энергий относительного движения в каналах реакции. Реакция передачи мюона на кислород как раз удовлетворяет этому условию. Анализ энергетического спектра запаздывающих рентгеновских квантов, проведенный в работе [2], показал, что в реакции (1) мюон передается в состоянии мезоатома кислорода с главным квантовым числом $n \leq 6$. В этом случае кинетическая энергия разлета продуктов реакции составляет как минимум 2.4 кэВ, что значительно больше указанных выше энергий столкновения во входном канале. Очевидно, что в этом случае необходимо в первую очередь асимптотически правильно описать входной канал. Поэтому волновая функция трехчастичной системы (мюон, протон и ядро кислорода) строилась в виде разложения по собственным функциям задачи двух кулоновских центров, которая выделялась в трехчастичном гамильтониане, записанном в координатах Якоби входного канала. Поскольку метод расчета был подробно рассмотрен в работе [13], в разд. 2 дан лишь его краткий обзор. Некоторые детали расчета скорости реакции обсуждаются в разд. 3. Результаты и выводы приведены в разд. 4. В дальнейшем, если не оговорено особо, всюду будет использоваться мезоатомная система единиц: $\hbar = e = m_\mu = 1$. Здесь e — заряд протона, m_μ — масса мюона; единица длины равна 2.56×10^{-11} см, единица энергии — 5.63 кэВ.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Реакция прямой передачи мюона на кислород является частным случаем реакции перезарядки при столкновении мезоатома изотопа водорода H в состоянии $1s$ с ядром элемента с номером $Z > 1$:



μZ^* — мезоатом элемента Z в возбужденном состоянии. Введем координаты Якоби входного канала этой реакции: вектор \mathbf{r} , проведенный от ядра H к мюону, и вектор \mathbf{R} , соединяющий центр масс C_2 мезоатома водорода μH с ядром Z (рис. 1). Центр масс C_3 трехчастичной системы расположен на векторе \mathbf{R} . Обозначим через \mathbf{r}_1 вектор, проведенный из центра масс мезоатома водорода к мюону, через r_2 расстояние между мюоном и ядром Z , и через R_{HZ} расстояние между ядрами. Запишем нерелятивистский трехчастичный гамильтониан в системе центра масс:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} + \hat{H}_\mu + \frac{Z}{R_{\text{HZ}}}. \quad (5)$$

Первое слагаемое есть оператор кинетической энергии относительного движения мезоатома водорода и ядра Z , M — приведенная масса ядра Z

Таблица 2. Коэффициенты трехчлена (3), аппроксимирующего энергетическую зависимость скорости реакции в интервале энергий столкновения $0.01 < E < 0.1$ эВ [5]

$p_1, \text{с}^{-1}$	$p_2, \text{с}^{-1} \text{эВ}^{-1}$	$p_3, \text{с}^{-1} \text{эВ}^{-2}$
$(-1.32 \pm 0.61) \times 10^{10}$	$(3.85 \pm 0.54) \times 10^{12}$	$(-1.98 \pm 0.65) \times 10^{13}$

по отношению к мезоатому:

$$M^{-1} = (M_{\text{H}} + 1)^{-1} + M_Z^{-1}, \quad (6)$$

M_{H} и M_Z — массы ядер. Слагаемое \hat{H}_{μ} — гамильтониан мезоатома водорода с добавлением потенциальной энергии взаимодействия мюона с ядром Z :

$$\hat{H}_{\mu} = -\frac{1}{2m_{\mu\text{H}}}\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{1}{r} - \frac{Z}{r_2}, \quad (7)$$

$m_{\mu\text{H}}$ — приведенная масса мезоатома водорода:

$$m_{\mu\text{H}}^{-1} = M_{\text{H}}^{-1} + 1. \quad (8)$$

Последнее слагаемое в (5) описывает кулоновское отталкивание ядер H и Z .

Выделим в трехчастичном гамильтониане двухцентровую задачу. Для этого перепишем слагаемое \hat{H}_{μ} в следующем виде [15]:

$$\hat{H}_{\mu} = m_{\mu\text{H}} \cdot \hat{h}_{\mu}, \quad (9)$$

$$\hat{h}_{\mu} = -\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{s}} - \frac{1}{r_1} - \frac{Z'}{r_2}. \quad (10)$$

Вектор \mathbf{s} соединяет середину вектора \mathbf{R} (точка M_R на рис. 1) с мюоном:

$$\mathbf{s} = \mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2}, \quad \mathbf{r}_1 = m_{\mu\text{H}} \cdot \mathbf{r}. \quad (11)$$

Величина Z' равна:

$$Z' = \frac{Z}{m_{\mu\text{H}}}. \quad (12)$$

Оператор \hat{h}_{μ} представляет собой гамильтониан мюона в поле двух неподвижных кулоновских центров, заряды которых равны единице и Z' . Единичный заряд расположен в центре масс мезоатома водорода, заряд Z' находится в той же точке, что и ядро Z . Для реакции передачи мюона с протона на кислород имеем:

$$m_{\mu\text{H}} = 0.899, \quad Z' = 8.90. \quad (13)$$

В системе координат с началом в точке M_R и полярной осью, направленной вдоль вектора \mathbf{R} , положение мюона задается вытянутыми сфероидами координатами ξ , η и φ [16]:

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}. \quad (14)$$

Азимутальный угол φ лежит в плоскости, проведенной через точку M_R перпендикулярно \mathbf{R} . Рассмотрим задачу на собственные значения и собственные функции двухцентрового гамильтониана \hat{h}_{μ} :

$$\begin{aligned} \hat{h}_{\mu}\psi_{jm}(\xi, \eta; R) \frac{\exp(\pm im\varphi)}{\sqrt{2\pi}} &= \quad (15) \\ &= \varepsilon_{jm}(R)\psi_{jm}(\xi, \eta; R) \frac{\exp(\pm im\varphi)}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned}$$

Здесь в явном виде выделена зависимость от угла φ ; квантовое число m принимает неотрицательные целые значения; индексом j обозначен набор остальных квантовых чисел. Для связанных состояний это либо число узлов n_{ξ} и n_{η} по соответствующим переменным, либо параболические квантовые числа n_1 и n_2 в пределе $R \rightarrow \infty$ [16]. Двухцентровая задача (15) решается при фиксированном расстоянии R , которое входит в собственные функции и собственные значения $\varepsilon_{jm}(R)$ в качестве параметра. Функции $\psi_{jm}(\xi, \eta; R)$ с одинаковыми m и различными наборами i и j остальных квантовых чисел ортонормированы и могут быть выбраны действительными. Ортонормированность по m обеспечивается факторами $\exp(\pm im\varphi)/\sqrt{2\pi}$. Очевидно, что решения задачи (15) являются также собственными функциями гамильтониана \hat{H}_{μ} с собственными значениями $m_{\mu\text{H}} \cdot \varepsilon_{jm}(R)$.

Как известно [16], двухцентровая задача допускает разделение переменных в вытянутых сфероидах координатах: функция $\psi_{jm}(\xi, \eta; R)$ представляет собой произведение радиальной и угловой функций, первая из которых зависит только от ξ , а вторая только от η . Решение двух дифференциальных уравнений для этих функций с соответствующими граничными условиями позволяет найти собственное значение $\varepsilon_{jm}(R)$, константу разделения и в конечном итоге построить сами функции. Как и в предыдущем расчете скорости передачи мюона на неон [14], в данной работе использовался алгоритм, основанный на стандартных разложениях радиальной и угловой функций в бесконечные ряды [17–19]. Собственное значение $\varepsilon_{jm}(R)$ и константа разделения определялись на основе метода, предложенного в работе [20] и модифицированного для случая, когда коэффициенты разложения не являются монотонными функциями их номера.

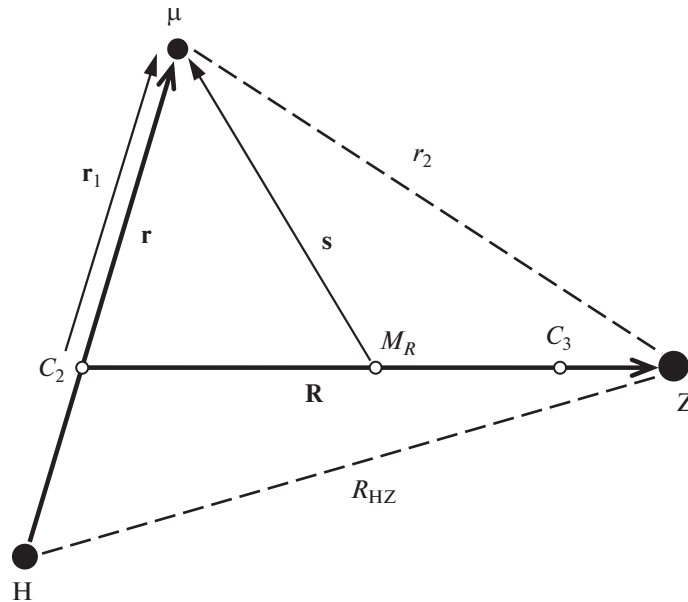


Рис. 1. Координаты Якоби входного канала реакции передачи мюона μ с водорода Н на ядро элемента с номером Z . C_2 — центр масс мезоатома водорода, C_3 — центр масс трехчастичной системы, M_R — середина вектора \mathbf{R} .

Исходная система координат, в которой рассматривается движение трех частиц, имеет фиксированные оси и начало в центре масс C_3 . Гамильтониан \hat{H} коммутирует с оператором $\hat{\mathbf{J}}^2$ квадрата орбитального момента трехчастичной системы и с оператором \hat{J}_z его проекции на ось z исходной системы координат. Кроме того, \hat{H} коммутирует с оператором \hat{P} инверсии пространственных координат всех частиц. В качестве базисных функций, по которым разлагается волновая функция трехчастичной системы, удобно взять собственные функции этих операторов. Потребуем также, чтобы они являлись решениями двухцентровой задачи (15). Поскольку координаты мюона в этой задаче “привязаны” к вектору \mathbf{R} , введем полярный угол Θ и азимутальный угол Φ , задающие ориентацию \mathbf{R} по отношению к осям исходной системы координат. Тогда конфигурация системы трех частиц определяется шестью независимыми координатами $R, \Theta, \Phi, \xi, \eta, \varphi$ и базисные функции имеют вид:

$$\Psi_{Mjm}^{JP}(R, \Theta, \Phi, \xi, \eta, \varphi) = \chi_{jm}^{JP}(R) \Upsilon_{Mm}^{JP}(\Phi, \Theta, \varphi) \psi_{jm}(\xi, \eta; R). \quad (16)$$

Здесь $\chi_{jm}^{JP}(R)$ — радиальная функция, зависящая от указанных в индексах квантовых чисел; $\Upsilon_{Mm}^{JP}(\Phi, \Theta, \varphi)$ — собственная функция операторов $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$ и \hat{P} с собственными значениями $J(J+1), M$ и P . Явный вид этих функций приведен в работе [13]. Неотрицательное целое число m , введенное

в (15), представляет собой модуль проекции полного орбитального момента трехчастичной системы на направление вектора \mathbf{R} .

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера для трехчастичной волновой функции с квантовыми числами J, M и P :

$$\hat{H}\Psi_M^{JP} = \tilde{E}\Psi_M^{JP}. \quad (17)$$

Энергия системы равна: $\tilde{E} = E_{\mu\text{H}}(1s) + E$, где $E_{\mu\text{H}}(1s) = -m_{\mu\text{H}}/2$ — энергия основного состояния мезоатома водорода, E — энергия столкновения. Будем искать решение в виде разложения по базисным функциям (16):

$$\Psi_M^{JP} = \sum_{jm} \Psi_{Mjm}^{JP}. \quad (18)$$

Подстановка этого разложения в уравнение и интегрирование по переменным $\Theta, \Phi, \xi, \eta, \varphi$ с учетом ортонормированности базисных функций дает систему связанных дифференциальных уравнений второго порядка для радиальных функций $\chi_{jm}^{JP}(R)$. Эти уравнения приведены в работе [13]. На практике в разложении учитывается вклад конечного числа двухцентровых состояний. Решение полученной системы уравнений с соответствующими граничными условиями позволяет вычислить полное сечение реакции (4).

Как уже отмечалось, основная идея обсуждаемого метода состоит в том, чтобы асимптотически правильно описать входной канал реакции при

больших значениях расстояния R . В пределе $R \rightarrow \infty$ решения двухцентральной задачи (15) распадаются на две группы. Состояния одной из них локализованы вблизи левого центра, который имеет единичный заряд и расположен в центре масс мезоатома μH . Состояния другой группы локализованы вблизи правого центра Z' . Простейший способ описания входного канала состоит в учете вклада только одного состояния левого центра. Его асимптотические квантовые числа равны:

$$m = n_1 = n_2 = 0, \quad n = 1. \quad (19)$$

n_1 и n_2 — параболические квантовые числа, $n = n_1 + n_2 + m + 1$ — главное квантовое число. Будем отмечать все величины, относящиеся к этому состоянию, индексом 0. В рассматриваемом пределе собственная функция ψ_0 и собственное значение $\varepsilon_0(R)$ двухцентральной задачи равны:

$$\begin{aligned} \psi_0 &\propto \exp(-m_{\mu\text{H}} \cdot r), \\ \varepsilon_0(R \rightarrow \infty) &= -\frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Таким образом, двухцентровая функция переходит в волновую функцию основного состояния мезоатома водорода с правильным значением приведенной массы. Это объясняется тем, что левый центр расположен в центре масс мезоатома водорода; аргумент экспоненты в функции ψ_0 есть расстояние от этого центра до мюона. Собственное значение гамильтониана \hat{H}_μ стремится к правильному пределу диссоциации:

$$m_{\mu\text{H}} \cdot \varepsilon_0(R \rightarrow \infty) = E_{\mu\text{H}}(1s). \quad (21)$$

При больших R относительное движение во входном канале определяется потенциалом $U_0(R)$, который представляет собой среднее значение трехчастичного гамильтониана по состоянию ψ_0 . В работе [13] было рассмотрено разложение этого потенциала по степеням R^{-1} . Ведущее слагаемое в этом разложении пропорционально R^{-4} и соответствует поляризации притяжению между мезоатомом водорода и ядром Z :

$$U_0(R) = -\frac{\beta_0 Z^2}{2R^4}. \quad (22)$$

Для поляризуемости мезоатома было получено следующее значение:

$$\beta_0 = \beta \left[1 - \frac{1}{(M_{\text{H}} + 1)^2} \right], \quad (23)$$

где $\beta = 9/(2m_{\mu\text{H}}^3)$ — точное значение поляризуемости. Хотя β_0 не совпадает с β , их значения очень близки. Для протона $\beta_0 \approx 0.99\beta$. Различие этих величин связано с тем, что кулоновское отталкивание ядер (последнее слагаемое в гамильтониане (5)) не диагонально в двухцентровом базисе. В работе [13]

было показано, что учет этого обстоятельства дает поправку к поляризуемости, которая в сумме с величиной β_0 в точности равна β . Таким образом, использование только одного состояния левого центра уже обеспечивает хорошее описание входного канала реакции при больших R : получается правильный предел диссоциации, не возникают ложные степенные потенциалы (по крайней мере в слагаемых вплоть до R^{-4}), значение поляризуемости мезоатома воспроизводится с точностью 1%. Именно это описание будет использоваться в дальнейшем. Кроме того, из-за близости значений β и β_0 в качестве асимптотического потенциала, определяющего относительное движение во входном канале при больших R , будет использоваться поляризационный потенциал с точным значением β :

$$U_p(R) = -\frac{\beta Z^2}{2R^4}. \quad (24)$$

В рассматриваемом подходе канал передачи мюона описывается состояниями правого центра. В пределе $R \rightarrow \infty$ они соответствуют мезоатому $\mu Z'$ с бесконечно тяжелым ядром, но не реальному мезоатому μZ . В частности, волновые функции этих состояний вообще не содержат приведенную массу конечного мезоатома. Кроме того, уравнения для радиальных функций относительного движения в канале передачи остаются связанными движением при бесконечно большом расстоянии R . Причина этих трудностей состоит в том, что канал передачи описывается в несвойственных ему координатах Якоби входного канала. Очевидно, что в этом случае невозможно вычислить сечения передачи мюона в отдельные состояния мезоатома μZ . Тем не менее, поскольку асимптотически состояния правого центра локализованы вблизи ядра Z , положение которого совпадает с положением заряда Z' , некоторая группа этих состояний в целом описывает перетекание зарядового облака мюона с H на Z , т.е. перезарядку. Поэтому можно вычислить полное сечение передачи мюона на ядро Z . Эта возможность основана на том факте, что при больших R базисные волновые функции, описывающие входной канал и канал передачи мюона, локализованы на разных центрах и слабо перекрываются. Поэтому с ростом R матричные элементы трехчастичного гамильтониана, связывающие уравнения для радиальных функций этих каналов, экспоненциально убывают. В результате при $R \rightarrow \infty$ система радиальных уравнений распадается на две группы, одна из которых описывает входной канал, а другая — канал передачи. В простейшем приближении, когда учитывается единственное состояние левого центра с квантовыми числами (19), входной канал асимп-

тотически описывается одним уравнением:

$$\frac{d^2 \chi_0^J}{dR^2} + \left[k^2 - \frac{J(J+1)}{R^2} - 2MU_p(R) \right] \chi_0^J = 0, \quad (25)$$

где $k = \sqrt{2ME}$ — асимптотический импульс относительного движения, χ_0^J — радиальная функция входного канала. Верхний индекс P у нее опущен, поскольку при $m = 0$ четность однозначно определяется квантовым числом J : $P = (-1)^J$. Решение системы уравнений для радиальных функций со стандартными граничными условиями позволяет найти диагональный элемент S -матрицы, соответствующий входному каналу, и полное сечение реакции $\sigma(E)$. Это сечение совпадает с полным сечением передачи мюона, поскольку при рассматриваемых энергиях столкновения канал передачи является единственным неупругим каналом.

3. НЕКОТОРЫЕ ДЕТАЛИ РАСЧЕТА

Рассмотрим, как метод, описанный в предыдущем разделе, применяется к расчету скорости передачи мюона с протона на кислород. При больших межатомных расстояниях входной канал реакции описывается одним состоянием левого центра ψ_0 с квантовыми числами (19). При выборе состояний правого центра воспользуемся общепринятыми представлениями, согласно которым передача мюона с водорода на ядро более тяжелого элемента обусловлена в основном квазипересечениями адиабатических термов, соответствующих каналам реакции. Будем характеризовать состояния правого центра параболическими квантовыми числами n'_1 , n'_2 и главным квантовым числом $n' = n'_1 + n'_2 + m + 1$. Как известно [16], квазипересечения возможны только для термов с одинаковыми значениями чисел m и n_1 . Поскольку для состояния ψ_0 эти числа равны нулю, рассмотрим состояния правого центра с $m = n'_1 = 0$. Волновые функции этих состояний не имеют узлов по переменной ξ , а различаются числом узлов n_η по переменной η . В дальнейшем нас будут интересовать состояния с $3 \leq n'_2 \leq 6$. Согласно приведенным в монографии [16] правилам связи между n_η и n'_2 , при $Z' = 8.90$ для этих состояний $n_\eta = n'_2$. Зависимости собственных значений ε_j двухцентровой задачи (15) от межатомного расстояния R для указанных выше состояний показаны на рис. 2 (индекс j сейчас сводится к паре чисел n'_1 и n'_2). Квазипересечения термов имеются в следующих интервалах расстояний: $R = 4-6, 7-8$ и $12-13$. Если начать с терма с $n'_2 = 3$ и двигаться в сторону увеличения R ,

то при переходе с терма на терм при каждом квазипересечении значение n'_2 последовательно увеличивается на единицу от 3 до 6. Это соответствует общему правилу [16], согласно которому в квазипересечениях участвуют термы, отличающиеся на единицу значением числа n_η . Имеются еще два квазипересечения, не показанные на рис. 2. Одно из них расположено при $R \approx 24.3$. Для него число n'_2 увеличивается с 6 до 7. Наконец, самое далекое квазипересечение лежит при $R \approx 66$. В нем участвуют состояние правого центра с $n'_2 = 7$ и состояние ψ_0 , для которого число узлов $n_\eta = 8$.

Предположим, что мезоатом водорода находится на очень большом расстоянии R от ядра кислорода. Соответствующая этому случаю функция ψ_0 локализована вблизи протона и практически совпадает там с волновой функцией основного состояния изолированного мезоатома водорода. Все 8 узлов этой функции расположены вблизи ядра кислорода, где ψ_0 экспоненциально мала. При уменьшении R такая картина сохраняется до первого квазипересечения с состоянием правого центра с квантовым числом $n'_2 = 7$. После прохождения узкой области квазипересечения распределение заряда мюона в этих состояниях резко меняется. В состоянии ψ_0 зарядовое облако мюона перемещается к кислороду и становится экспоненциально малым вблизи протона. В состоянии с $n'_2 = 7$ заряд, наоборот, перетекает к протону, а все 7 узлов волновой функции оказываются в области вблизи ядра кислорода, где волновая функция экспоненциально мала. Аналогичная картина наблюдается при прохождении других квазипересечений, которые происходят глубоко под потенциальным барьером, разделяющим кулоновские ямы двухцентровой задачи. В этом случае в промежутках между узкими областями квазипересечений можно говорить о локализации зарядового облака мюона вблизи одного из центров и считать, что при уменьшении R состояния правого центра с последовательно уменьшающимися на единицу значениями квантового числа n'_2 описывают мезоатом водорода в поле ядра кислорода. В частности, в области $13 < R < 24$ это состояние с $n'_2 = 6$. Тот факт, что оно действительно соответствует мезоатому водорода в поле кислорода, подтверждается расчетом адиабатического потенциала, равного сумме собственного значения $m_{\mu\text{H}} \cdot \varepsilon_j(R)$ гамильтониана \hat{H}_μ , отсчитанного от энергии $E_{\mu\text{H}}(1s)$ изолированного мезоатома водорода, и среднего значения кулоновского отталкивания ядер. При $R = 24$ этот потенциал совпадает с поляризационным потенциалом с точностью около двух процентов. При дальнейшем уменьшении R квазипересечения происходят все ближе и ближе к вершине потенциального барьера,

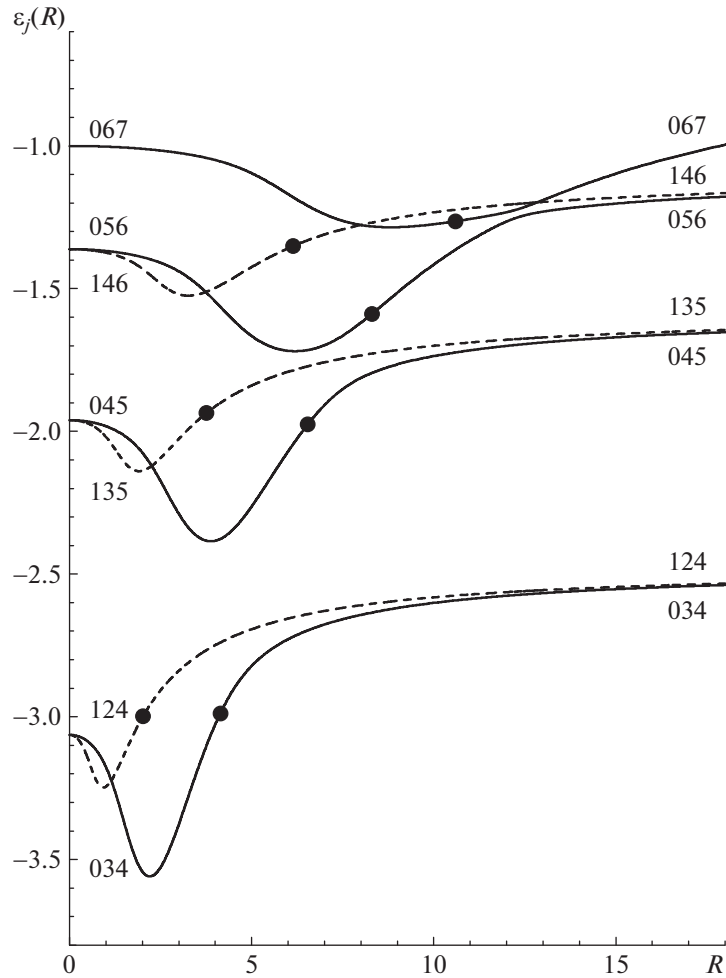


Рис. 2. Зависимости собственных значений $\varepsilon_j(R)$ двухцентрковой кулоновской задачи от расстояния R между центром масс мезоатома водорода и ядром кислорода для состояний правого центра с $m = 0$. Все величины даны в мезоатомных единицах. Каждая кривая помечена значениями параболических квантовых чисел n'_1 , n'_2 и n' . Сплошные кривые — состояния с $n'_1 = 0$, штриховые — с $n'_1 = 1$. На каждой кривой черным кружком отмечено значение R , при котором состояние пересекает вершину потенциального барьера, разделяющего кулоновские ямы двухцентрковой задачи.

области квазипересечений размываются и утверждение о локализации мюона вблизи одного из ядер теряет смысл. В нашем случае у вершины потенциального барьера происходят квазипересечения при $R = 4-6$ и $7-8$.

Согласно общепринятой трактовке, реакция передачи мюона обусловлена в основном не слишком далекими квазипересечениями, лежащими вблизи вершины потенциального барьера. Например, в работах [7, 9] передача мюона на кислород была рассмотрена на основе анализа термов задачи двух кулоновских центров с зарядами 1 и 8. Было выяснено, что основной вклад в скорость реакции дают квазипересечения, для которых расстояние между кулоновскими центрами лежит в интервале 8–9. Следуя этим представлениям, в настоящей работе в разложении трехчастичной волновой функции учитывались четыре состояния правого

центра с квантовыми числами $m = n'_1 = 0$ и $n'_2 = 3-6$. В работе [7] было отмечено, что некоторую роль могут играть состояния с $m = 0$ и $n'_1 = 1$. Поэтому в расчет были включены три таких состояния правого центра с квантовым числом $n'_2 = 2-4$. Зависимости собственных значений ε_j двухцентрковой задачи от межатомного расстояния R для этих состояний также показаны на рис. 2. Их двухцентровые волновые функции имеют один узел по переменной ξ ; число узлов по переменной η равно n'_2 . Таким образом, используемый базис состоял из семи состояний правого центра с $m = 0$. Для удобства квантовые числа этих состояний собраны в табл. 4.

При использовании указанного выше двухцентрвого базиса в области, лежащей слева от квазипересечения при $R \approx 24.3$, имеется система семи связанных уравнений для радиальных функций. В

Таблица 3. Экспериментальное λ_{exp} и расчетные λ_{th} значения скорости $\lambda(T)$ передачи мюона с термализованных мезоатомов водорода на кислород при комнатной температуре (все скорости приведены в единицах 10^{10} c^{-1} ; скорость, полученная в работе [7], пересчитана на значение плотности $N_{\text{H}} = 4.25 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$; число, заимствованное из работы [8], есть значение скорости $q(E)$ при средней тепловой энергии столкновения $E = 0.04 \text{ эВ}$; остальные скорости получены усреднением по распределению Максвелла; два значения, взятые из работы [12], соответствуют передаче мюона на “голое” ядро кислорода (верхнее значение) и на ядро свободного атома с учетом электронного экранирования (нижнее))

λ_{exp} [2]	λ_{th}				
	[7]	[8]	[9]	[10, 11]	[12]
8.5 ± 0.2	6.8	7.7 ± 0.5	8.4	7.77	23.2
					4.42

Таблица 4. Параболические квантовые числа n'_1 и n'_2 базисных состояний правого центра с $m = 0$ в пределе $R \rightarrow \infty$ ($n' = n'_1 + n'_2 + m + 1$ — главное квантовое число; в области $13 < R < 24$ состояние, отмеченное звездочкой, описывает мезоатом водорода в поле ядра кислорода и при $R \approx 24$ соответствует входному каналу реакции; остальные состояния описывают канал передачи мюона)

n'_1	n'_2	n'
*0	6	7
0	5	6
0	4	5
0	3	4
1	4	6
1	3	5
1	2	4

интервале $13 < R < 24$ состояние правого центра с квантовыми числами $m = n'_1 = 0$ и $n'_2 = 6$ описывает мезоатом водорода в поле ядра кислорода. Матричные элементы, связывающие уравнение для радиальной функции этого состояния с остальными уравнениями, экспоненциально убывают с ростом R . Поэтому при $R \approx 24$ уравнение отделяется от прочих и соответствует входному каналу реакции. При этом, как уже отмечалось, адиабатический потенциал в этом уравнении совпадает с поляризационным потенциалом с процентной точностью. При $R \geq 24$ для описания входного канала использовалось уравнение (25) с поляризационным потенциалом $U_p(R)$, т.е. глубоко подбарьер-

ные квазипересечения, лежащие при $R \approx 24.3$ и 66 , полностью игнорировались. Канал передачи мюона в этой области R описывался шестью радиальными уравнениями для остальных состояний, приведенных в табл. 4.

Представленное выше рассмотрение соответствует передаче мюона на “голое” ядро кислорода. В действительности мезоатом водорода сталкивается с молекулой. Ввиду сложности этого процесса рассмотрим столкновение мезоатома со свободным атомом кислорода. Даже в этом упрощенном случае анализ динамики электронной оболочки при столкновении представляет собой сложную задачу, поскольку энерговыделение в реакции передачи мюона составляет несколько кэВ и более чем достаточно для электронного возбуждения. Простейшее предположение состоит в том, что в процессе столкновения электронная оболочка остается в основном состоянии. В этом случае ее роль сводится к экранированию кулоновского взаимодействия между тяжелыми частицами в каналах реакции. Естественно ожидать, что из-за малых энергий столкновения экранирование наиболее существенно во входном канале. В настоящей работе экранирование учитывалось в уравнении (25), описывающем входной канал при $R \geq 24$. Вместо поляризационного потенциала $U_p(R)$ использовался новый сферически симметричный потенциал $U_e(R)$, метод построения которого был предложен в работе [21]. Этот потенциал может быть записан в виде суммы двух слагаемых:

$$U_e(R) = U_s(R) + U_f(R). \quad (26)$$

Первое слагаемое представляет собой экранированный поляризационный потенциал:

$$U_s(R) = -\frac{\beta Z_a^2(R)}{2R^4}, \quad (27)$$

$$Z_a(R) = Z - Z_e(R).$$

$Z_e(R)$ — абсолютная величина электронного заряда в сфере радиуса R с центром на ядре атома, $Z_a(R)$ — полный заряд атома в этой сфере. Второе слагаемое $U_f(R)$ возникает из-за конечного размера мезоатома водорода; его можно рассматривать как контактное взаимодействие мезоатома с электронной оболочкой:

$$U_f(R) = \frac{2\pi}{3} \langle r_{\mu\text{H}}^2 \rangle \rho_e(R). \quad (28)$$

$\langle r_{\mu\text{H}}^2 \rangle$ — средний квадрат зарядового радиуса мезоатома в основном состоянии, вычисленный относительно его центра масс:

$$\langle r_{\mu\text{H}}^2 \rangle = -\frac{3}{m_{\mu\text{H}}} \left(1 - \frac{1}{M_{\text{H}}} \right). \quad (29)$$

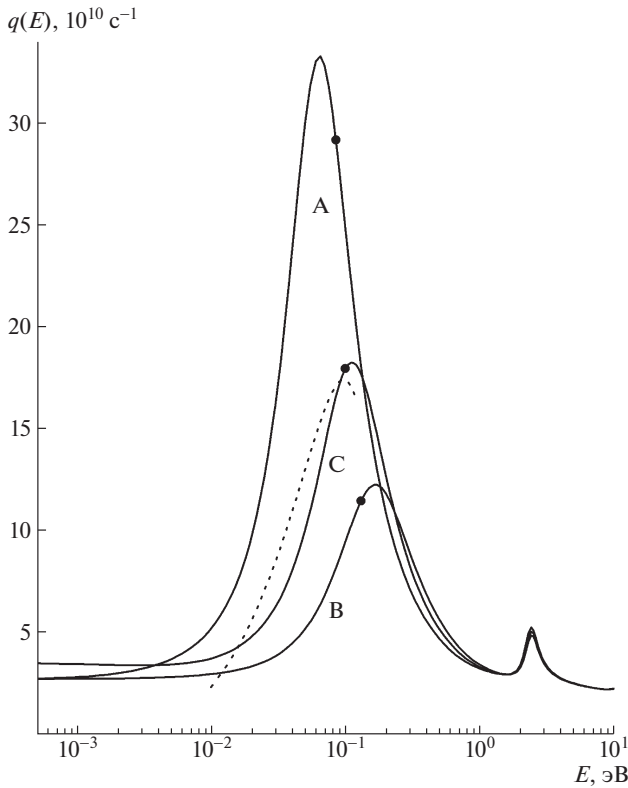


Рис. 3. Зависимости скорости реакции передачи мюона $q(E)$ от энергии столкновения E . Сплошные кривые — результаты расчетов в вариантах А, В и С. На каждой кривой черным кружком отмечено значение энергии E , равное высоте барьера в эффективной потенциальной энергии для p -волны (табл. 6). Точечная кривая — экспериментальная зависимость $q(E)$, рассчитанная по формуле (3) с центральными значениями коэффициентов из табл. 2.

Квадрат зарядового радиуса отрицателен, так как основной вклад в него дает отрицательно заряженный мюон. Функция $\rho_e(R)$ есть абсолютная величина электронной плотности на расстоянии R от ядра Z . Она нормирована условием

$$4\pi \int_0^{\infty} \rho_e(R) R^2 dR = Z. \quad (30)$$

Значения потенциалов $U_s(R)$ и $U_f(R)$ для ряда межатомных расстояний приведены в табл. 5. Плотность $\rho_e(R)$ и заряд $Z_e(R)$ вычислялись с помощью аналитических волновых функций одноэлектронных орбит атома кислорода, полученных методом Хартри–Фока–Рутана [22]. Оба потенциала $U_s(R)$ и $U_f(R)$ являются потенциалами притяжения и экспоненциально убывают с ростом R . Так как $U_s(R)$ пропорционален квадрату заряда $Z_a(R)$ и содержит дополнительный фактор R^{-4} , то он убывает быстрее. В результате этот потенциал оказывается существенным лишь на расстояниях

R , не превышающих электронного борковского радиуса (≈ 200 мезоатомных единиц). Например, при $R = 24$ потенциал $U_s = -2.92$ эВ и на порядок превосходит слагаемое U_f . Так как электронная K -оболочка атома кислорода имеет примерно такой же радиус, то экранирование в потенциале U_s уже заметно: заряд $Z_a = 7.45$. При $R \approx 105$ потенциалы U_s и U_f сравниваются и дают в сумме приблизительно -8.5×10^{-3} эВ, т.е. величину порядка тепловых энергий при температуре 100 К. При $R = 200$ слагаемое U_s составляет только 9% от потенциала U_f . В этом случае $U_e = 1.69 \times 10^{-3}$ эВ, что соответствует тепловым энергиям при температуре 20 К. Отметим еще одно обстоятельство, связанное со слагаемым U_f . Учет электронного экранирования ослабляет поляризационное притяжение, так что при всех R выполняется неравенство $|U_s| < |U_p|$. Добавление слагаемого U_f приводит к тому, что при $R > 115$ новый потенциал U_e по абсолютной величине становится больше, чем U_p : $|U_e| > |U_p|$. Поскольку U_e убывает экспоненциально, а U_p по степенному закону, то при $R > 600$ знак неравенства меняется на противоположный. Значение потенциалов в этой точке уже очень мало — примерно -8×10^{-6} эВ, что соответствует температуре около 0.1 К.

Для выяснения роли электронного экранирования расчеты скорости рассматриваемой реакции были выполнены для трех вариантов А, В и С, отличающихся потенциалом в уравнении (25), асимптотически описывающем входной канал.

- А) Электронное экранирование вообще не учитывалось, что соответствует передаче мюона на “голое” ядро кислорода. В этом случае в уравнении (25) использовался неэкранированный поляризационный потенциал $U_p(R)$.
- В) Вместо $U_p(R)$ подставлялся экранированный потенциал $U_s(R)$, то есть учитывалось экранирование заряда ядра атомными электронами. Такой способ применялся в работах [9, 12].
- С) В уравнении (25) использовался потенциал $U_e(R) = U_s(R) + U_f(R)$, то есть к экранированному поляризационному потенциалу добавлялось контактное взаимодействие мезоатома водорода с электронной оболочкой атома кислорода. Вариант С является самым реалистичным, поскольку учитывает влияние атомных электронов наиболее полно.

Во всех вариантах расчета для ненулевых значений орбитального момента J в эффективном потенциале, входящем в уравнение (25), имеется барьер.

Таблица 5. Атомный заряд Z_a и потенциальные энергии взаимодействия мезоатома водорода с атомом кислорода как функции межатомного расстояния R (значения R и Z_a даны в мезоатомных единицах, потенциальные энергии — в электронвольтах; в скобках указаны порядки чисел)

R	Z_a	U_p	U_s	U_f	U_e
24	7.45	-3.36	-2.92	-1.97(-1)	-3.11
30	7.20	-1.38	-1.12	-1.26(-1)	-1.24
40	6.82	-4.36(-1)	-3.17(-1)	-6.09(-2)	-3.77(-1)
50	6.50	-1.79(-1)	-1.18(-1)	-3.05(-2)	-1.49(-1)
75	5.99	-3.53(-2)	-1.98(-2)	-7.89(-3)	-2.77(-2)
100	5.61	-1.12(-2)	-5.49(-3)	-4.41(-3)	-9.89(-3)
125	5.17	-4.57(-3)	-1.91(-3)	-3.45(-3)	-5.36(-3)
150	4.65	-2.20(-3)	-7.44(-4)	-2.74(-3)	-3.48(-3)
175	4.08	-1.19(-3)	-3.09(-4)	-2.10(-3)	-2.41(-3)
200	3.50	-6.97(-4)	-1.34(-4)	-1.56(-3)	-1.69(-3)
250	2.47	-2.86(-4)	-2.73(-5)	-8.19(-4)	-8.46(-4)
300	1.67	-1.38(-4)	-6.03(-6)	-4.19(-4)	-4.25(-4)
400	0.715	-4.36(-5)	-3.48(-7)	-1.09(-4)	-1.10(-4)
500	0.291	-1.79(-5)	-2.35(-8)	-2.95(-5)	-2.96(-5)
600	0.115	-8.61(-6)	-1.79(-9)	-8.27(-6)	-8.27(-6)
700	0.0455	-4.65(-6)	-1.50(-10)	-2.40(-6)	-2.40(-6)

Таблица 6. Положение R_b вершины потенциального барьера и его высота U_b для нескольких значений орбитального момента J в вариантах расчета А, В и С (R_b — в мезоатомных единицах, U_b — в электронвольтах)

Вариант расчета	$J = 1$		$J = 2$		$J = 3$		$J = 4$	
	R_b	U_b	R_b	U_b	R_b	U_b	R_b	U_b
А	60.5	0.0832	34.9	0.749	24.7	3.00	19.1	8.32
В	51.4	0.126	32.4	0.943	23.8	3.43	18.7	9.07
С	55.9	0.102	33.5	0.841	24.1	3.24	18.8	8.77

Положение вершины барьера R_b и его высота U_b приведены в табл. 6 для $J \leq 4$. Для этих значений J , вершина барьера, лежит либо в области $R \geq 24$, где входной канал реакции описывается одним уравнением (25), либо недалеко от этой области слева. При малых энергиях столкновения $E \ll U_b$ барьер препятствует проникновению соответствующей парциальной волны в область взаимодействия термов и ее вклад в сечение передачи мюона мал. С ростом энергии столкновения парциальное сечение передачи возрастает и при $E \sim U_b$ становится сопоставимо с вкладами волн с меньшими орбитальными моментами.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА И ВЫВОДЫ

Результаты расчета скорости реакции передачи мюона $q(E)$ представлены на рис. 3 и 4. При малых энергиях столкновения основной вклад дает s -волна, сечение реакции пропорционально v^{-1} и скорость реакции практически постоянна. При $E > 0.01$ эВ определяющим становится быстро растущий вклад p -волны. В результате на кривых зависимости $q(E)$ имеются ярко выраженные резонансные максимумы. Их положение и максимальная скорость реакции для вариантов расчета А, В и С приведены в табл. 7. Положение и форма максимумов существенным образом зависят от способа учета электронного экранирования. Наи-

Таблица 7. Положение E_m резонансных максимумов в энергетической зависимости скорости передачи мюона при энергиях столкновения $E < 1$ эВ (q_m — максимальное значение скорости; последняя строка — результат аппроксимации, предложенной в работе [5] (формула (3) с центральными значениями коэффициентов из табл. 2))

Вариант расчета	E_m , эВ	q_m , 10^{11} с $^{-1}$
A	0.0640	3.32
B	0.167	1.23
C	0.112	1.82
[5]	0.0972	1.74

Таблица 8. Экспериментальные λ_{exp} и расчетные λ_{th} значения скорости $\lambda(T)$ передачи мюона с термализованных мезоатомов водорода на кислород при различных температурах (все скорости приведены в единицах 10^{10} с $^{-1}$; экспериментальные значения заимствованы из работы [6]; ошибки вычислены по формуле $\sigma = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}$, где σ_1 и σ_2 приведены в табл. 1; значения λ_{th} получены в вариантах расчета A, B и C)

T , К	λ_{exp} [6]	λ_{th}		
		A	B	C
104	3.07 ± 0.30	7.47	3.16	4.33
153	5.20 ± 0.34	10.6	3.48	5.19
201	6.48 ± 0.35	13.4	3.85	6.12
240	8.03 ± 0.38	15.2	4.17	6.87
272	8.18 ± 0.41	16.4	4.44	7.47
300	8.79 ± 0.43	17.3	4.68	7.95

более ярко максимум выражен в варианте A (передача мюона на “голое” ядро кислорода). Здесь максимальное значение скорости реакции достигается при энергии столкновения, несколько меньшей высоты потенциального барьера в p -волне. В варианте B учет электронного экранирования в поляризационном потенциале уменьшает притяжение во входном канале реакции. В результате максимум смещается в сторону больших энергий и его высота уменьшается. В наиболее реалистичском варианте C учет дополнительного притяжения, обусловленного контактным взаимодействием мезоатома водорода с электронной оболочкой атома кислорода, сдвигает максимум обратно в сторону меньших энергий и увеличивает его высоту. В вариантах B и C максимум достигается при энергиях, несколько больших высоты потенциального

барьера в p -волне. При дальнейшем увеличении энергии столкновения электронное экранирование становится менее существенным, и при $E > 1$ эВ кривые, полученные в трех вариантах расчета, идут очень близко друг к другу. В этой области имеется еще один максимум при $E \approx 2.4$ эВ. Значение скорости реакции в этой точке составляет около 5×10^{10} с $^{-1}$. Максимум обусловлен резонансным поведением парциального вклада g -волны (рис. 4). Интересно отметить, что высота потенциального барьера в g -волне составляет около 9 эВ (табл. 6), так что резонанс является глубоко подбарьерным.

На рис. 3 приведена также экспериментальная кривая зависимости $q(E)$, полученная в работе [5] в результате обработки данных по температурной зависимости скорости реакции. Кривая рассчитана по формуле (3) с центральными значениями коэффициентов из табл. 2. Положение и высота максимума этой кривой приведены в табл. 7. В области $E > 0.015$ эВ расчетная кривая, полученная в варианте C, хорошо совпадает с экспериментальной кривой. Расчетные и экспериментальные значения положения максимума и максимальной скорости реакции также близки. При уменьшении энергии согласие ухудшается. Например, при $E \approx 0.01$ эВ расчетная кривая уже выходит на горизонтальный участок, тогда как экспериментальные значения скорости реакции продолжают убывать. Возможно, что это различие обусловлено влиянием молекулярных эффектов. В связи с этим следует отметить два обстоятельства.

1. Логика выполненного расчета такова, что реакция передачи мюона происходит на межатомных расстояниях R , не превышающих 24 мезоатомные единицы. Эта величина составляет примерно одну десятую электронного борновского радиуса, что заметно меньше размеров молекулы кислорода. При больших значениях R мезоатом водорода движется в сферически симметричном поле свободного атома кислорода. Реально в молекуле это поле устроено значительно сложнее. В частности, оно не является сферически симметричным. Естественно ожидать, что этот факт должен как-то проявляться при уменьшении энергии столкновения.
2. Ядра кислорода в молекуле участвуют во внутреннем колебательно-вращательном движении. В частности, при любой температуре имеются нулевые колебания. Их учет может оказаться важным при малых энергиях столкновения.

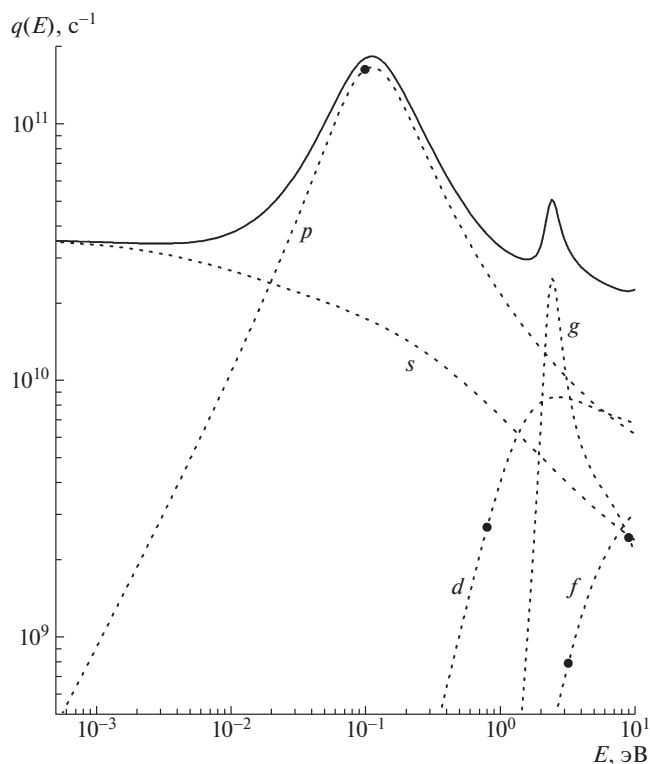


Рис. 4. Зависимости парциальных скоростей реакции передачи мюона от энергии столкновения E , рассчитанные в варианте С. Сплошная кривая — полная скорость $q(E)$, точечные кривые — вклады парциальных волн от s до g . На каждой точечной кривой черным кружком отмечено значение энергии E , равное высоте барьера в эффективной потенциальной энергии для соответствующей парциальной волны (табл. 6).

Рассмотрим теперь температурную зависимость скорости $\lambda(T)$ передачи мюона с термализованных мезоатомов водорода. Для столкновения мезоатома со свободным атомом кислорода эта величина получается усреднением скорости $q(E)$ по максвелловскому распределению скоростей относительного движения во входном канале реакции. Результаты представлены в табл. 8 и на рис. 5. Во всех вариантах расчета скорость реакции монотонно возрастает с увеличением температуры, что является следствием роста скорости $q(E)$ при тепловых энергиях столкновения. Наилучшее согласие с экспериментальными значениями получается в варианте С. При $T > 150$ К расчетная кривая идет несколько ниже экспериментальных точек, отклоняясь от них не более чем на 15%. При уменьшении температуры согласие ухудшается. Расчетные значения становятся больше экспериментальных и при $T = 104$ К превышают последние на 40%. Этот факт также может служить указанием на необходимость учета молекулярных эффектов при малых энергиях столкновения.

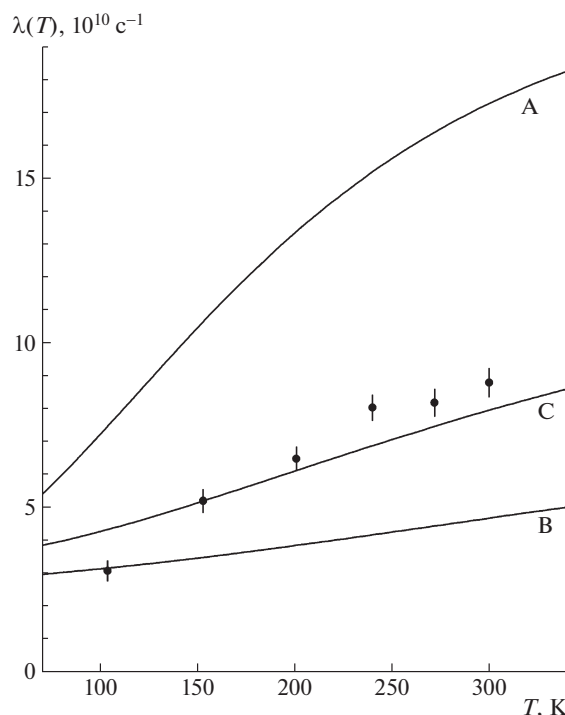


Рис. 5. Зависимости скорости $\lambda(T)$ передачи мюона с термализованных мезоатомов водорода от температуры T , рассчитанные в вариантах А, В и С. Черные кружки — экспериментальные значения, полученные в работе [6] (табл. 8).

В заключение подведем некоторые итоги.

1. В области энергий столкновения $0.015 < E < 0.1$ эВ расчетные значения скорости реакции хорошо согласуются с результатами, полученными при обработке экспериментальных данных. В частности, расчет предсказывает существование p -волнового резонанса при энергии $E \approx 0.1$ эВ. Этот результат представляется важным в контексте планируемого лазерного эксперимента по прецизионному измерению энергии сверхтонкого расщепления состояния $1s$ мезоатома водорода.
2. При температурах $150 < T < 300$ К расчетные значения скорости реакции передачи мюона с термализованных мезоатомов также хорошо согласуются с экспериментальными значениями.
3. Результаты расчета весьма чувствительны к электронному экранированию. Хорошее согласие с экспериментальными данными достигается только при его надлежащем учете.
4. При уменьшении энергии столкновения до 0.01 эВ и уменьшении температуры до 100 К

согласие между расчетными и экспериментальными значениями ухудшается. Возможной причиной может быть влияние молекулярных эффектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1989), с. 693, 581.
2. A. Werthmüller, A. Adamczak, R. Jacot-Guillarmod, F. Mulhauser, L. A. Schaller, L. Schellenberg, H. Schneuwly, Y.-A. Thallman, and S. Tresch, *Hyperf. Interact.* **116**, 1 (1998).
3. A. Adamczak, D. Bakalov, K. Bakalova, E. Polacco, and C. Rizzo, *Hyperf. Interact.* **136**, 1 (2001).
4. D. Bakalov, A. Adamczak, M. Stoilov, and A. Vacchi, *Phys. Lett. A* **379**, 151 (2015).
5. FAMU Collab. (E. Mocchiutti *et al.*), arXiv: 1905.02049 v1 [nucl-ex].
6. E. Mocchiutti, A. Adamczak, D. Bakalov, G. Baldazzi, R. Benocci, R. Bertoni, M. Bonesini, V. Bonvicini, H. Cabrera Morales, F. Chignoli, M. Clemenza, L. Colace, M. Danailov, P. Danev, A. de Bari, C. De Vecchi, *et al.*, *Phys. Lett. A* **384**, 126667 (2020).
7. С. С. Герштейн, *ЖЭТФ* **43**, 706 (1962).
8. R. A. Sultanov and S. K. Adhikari, *Phys. Rev. A* **62**, 022509 (2000).
9. V. I. Savichev and R. Blümel, *Eur. Phys. J. D* **21**, 3 (2002).
10. A. Dupays, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 043401 (2004).
11. A. Dupays, B. Lepetit, J. A. Beswick, C. Rizzo, and D. Bakalov, *Phys. Rev. A* **69**, 062501 (2004).
12. Anh-Thu Le and C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **71**, 022507 (2005).
13. S. V. Romanov, *Eur. Phys. J. D* **28**, 11 (2004).
14. С. В. Романов, *ЯФ* **77**, 3 (2014) [*Phys. At. Nucl.* **77**, 1 (2014)].
15. К. Kobayashi, T. Ishihara, and N. Toshima, *Muon Cat. Fusion* **2**, 191 (1988).
16. И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов, *Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции* (Наука, Москва, 1976), с. 15–17, 171–178, 190–196.
17. G. Jaffé, *Z. Phys.* **87**, 535 (1934).
18. W. G. Baber and H. R. Hassé, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **31**, 564 (1935).
19. D. R. Bates and T. R. Carson, *Proc. Roy. Soc. A* **234**, 207 (1956).
20. Gisèle Hadinger, M. Aubert-Frécon, and Gerold Hadinger, *J. Phys. B* **22**, 697 (1989).
21. A. V. Kravtsov, A. I. Mikhailov, and N. P. Popov, *J. Phys. B* **19**, 1323 (1986).
22. E. Clementi and C. Roetti, *At. Data Nucl. Data Tables* **14**, 177 (1974).

ON THE ENERGY DEPENDENCE OF THE MUON TRANSFER RATE FROM PROTON TO OXYGEN

S. V. Romanov¹⁾

¹⁾*National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia*

The results of calculations of the muon transfer rate from the $1s$ state of muonic protium to the nucleus of a free oxygen atom are presented in the interval of collision energies from 10^{-4} to 10 eV. The calculations were performed within a variant of the perturbed stationary states method suggested before. The electron screening in the entrance channel of the transfer reaction was taken into account. The p -wave resonance in the transfer rate is predicted at collision energies of about 0.1 eV. This result is important in the context of the planned laser experiment on precise measurements of the hyperfine splitting energy of the $1s$ state of muonic protium.