

РАССЕЯНИЕ ПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ МЮОНОВ АТОМАМИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

© 2023 г. Л. В. Чернышева^{1)*}, В. Г. Яржемский^{2)**}

Поступила в редакцию 02.02.2023 г.; после доработки 28.02.2023 г.; принята к публикации 28.02.2023 г.

В настоящей работе методами теории многих тел с использованием комплекса программ АТОМ-М произведены расчеты сечений упругого и неупругого рассеяния положительных мюонов атомами He и Ag при малых и средних кинетических энергиях. Для сравнения приводятся также результаты упругого и неупругого рассеяния позитрона при тех же энергиях. Обсуждается зависимость фаз и сечений рассеяния от заряда частицы и ее массы, а также от заряда ядра рассеивающего атома.

DOI: 10.31857/S004400272304013X, EDN: EGNUG

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование рассеяния положительных мюонов на атомах представляет собой важную задачу для физики, в частности в теории рассеяния положительных частиц изолированными атомами [1]. Взаимодействие положительного мюона с атомом формально такое же, как и взаимодействие позитрона, но существенные различия рассеяния этих частиц возникают из-за отличия масс. Вследствие большой массы кинетическая энергия вращения при данном угловом моменте меньше, поэтому следует ожидать большего вклада членов $l > 0$ при малых кинетических энергиях мюона. Сечения упругого и неупругого рассеяния положительных мюонов и позитронов на атомах [2–4] определялись нами методами теории многих тел в базисе функций Хартри–Фока (ХФ) [5, 6], однако неэмпирические расчеты упругого и неупругого рассеяния положительных мюонов атомами нам неизвестны.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

При изучении рассеяния мюонов на атомах, как и ранее для электронов, мы используем аппарат квантовой теории многих тел. Как показано в работе [7], собственно энергетическая часть Σ одночастичной функции Грина, описывающей распространение электрона, совпадает с оптическим потенциалом стандартной теории рассеяния. В результате задача рассеяния сводится к вычислению собственно энергетической части в том или ином

приближении и решению уравнения Шредингера с потенциалом Σ . Этот же подход мы используем и при изучении рассеяния мюонов на атомах. Мы определяем собственно энергетическую часть Σ , которая является решением интегрального уравнения, соответствующего уравнению Шредингера с потенциалом Σ . Ядро этого уравнения содержит неприводимую собственно энергетическую часть. Последняя вычисляется в упрощенном приближении случайных фаз (УПСФ). Для решения задачи используется разложение волновой функции налетающего мюона на парциальные волны. При расчетах учитывались четыре парциальные волны $l = 0, 1, 2$ и 3 . Неприводимую собственно энергетическую часть Σ одночастичной функции Грина удобно разбить на две части: хартри-фоковскую и определяемую корреляционным взаимодействием:

$$\Sigma = \Sigma^{\text{HF}} + \Sigma^{\text{cor}}. \quad (1)$$

Собственно энергетическая часть в приближении Хартри–Фока Σ^{HF} есть самосогласованное поле [6, гл. 14], которым атом воздействует на рассеиваемый мюон. Волновая функция и фаза рассеяния δ_l^{HF} налетающего мюона рассчитывались в приближении Хартри–Фока [5].

В низшем порядке по Σ^{cor} сдвиг фаз рассеяния электронной (и мюонной) волны с моментом l по сравнению с его хартри-фоковским значением равен [4]:

$$\Delta\delta_{l_1}(E_1) = -\pi \langle \phi_{\nu_1} | \Sigma^{\text{cor}} | \phi_{\nu_1} \rangle, \quad (2)$$

где ϕ_{ν_1} — волновая функция налетающей частицы в приближении Хартри–Фока, E_1 и l_1 — ее энергия и орбитальный момент соответственно.

В рамках приближения случайных фаз (ПСФ) диагональный матричный элемент собственно

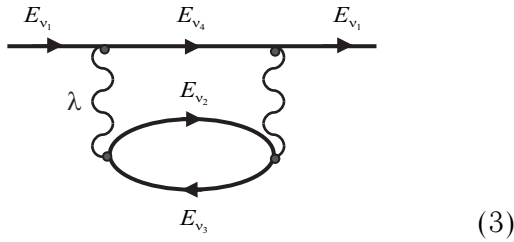
¹⁾Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург, Россия.

²⁾Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия.

*E-mail: Larissa.Chernysheva@mail.ioffe.ru

**E-mail: vgyar@igic.ras.ru

энергетической части для мюона может быть представлен графически следующим образом:



где волнистая линия обозначает кулоновское взаимодействие, а λ — его мультипольность.

Для расчета этой диаграммы надо всем линиям (включая волнистую) сопоставить угловые моменты электронов и мюона (или мультипольность λ кулоновского взаимодействия), а каждой волнистой линии кулоновского взаимодействия весовой множитель [8, 9]

$$\begin{aligned} & \langle \nu_1 \nu_3 \| V_\lambda \| \nu_4 \nu_2 \rangle = \\ & = \sqrt{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1)(2l_4 + 1)} \times \\ & \times \begin{pmatrix} l_1 & \lambda & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & \lambda & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R^\lambda(\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4), \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} R^\lambda(\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4) &= \int_0^\infty P_{\nu_1}(r) P_{\nu_4}(r) dr \times \\ & \times \int_0^r \frac{r'^\lambda}{r'^{\lambda+1}} P_{\nu_3}(r') P_{\nu_2}(r') dr'. \end{aligned} \quad (5)$$

Применяя правила графической техники при суммировании моментных диаграмм [8, 9], получаем

$$\begin{aligned} \langle \nu_1 | \Sigma^{\text{cor}}(E) | \nu_1 \rangle &= \sum_\lambda \frac{1}{(2l_{\nu_1} + 1)(2\lambda + 1)} \times \\ & \times \sum_{\substack{\nu_4, \nu_2 > F, \\ \nu_3 \leq F}} \frac{2 \langle \nu_1 \nu_3 \| V_\lambda \| \nu_4 \nu_2 \rangle^2}{E - E_{\nu_2} + E_{\nu_3} - E_{\nu_4} + i\eta(1 - 2n_{\nu_4})}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь “2” — результат суммирования по спинам в петле (3), ν_i означает совокупность квантовых чисел nl (E_{ν_2} — для непрерывного спектра), суммирование по ν_3 проводится по занятым (дырочным) состояниям, суммирование по ν_4, ν_2 — по свободным (частичным) состояниям, в том числе интегрируется по непрерывному спектру энергий.

В результате проблема сводится к вычислению собственно энергетической части Σ^{cor} и решению уравнения

$$\langle El | \bar{\Sigma}(\omega) | E'l \rangle = \langle El | \Sigma^{\text{cor}}(\omega) | E'l \rangle + \quad (7)$$

$$+ P \int \langle El | \Sigma^{\text{cor}}(\omega) | E''l \rangle \langle E''l | \bar{\Sigma}(\omega) | E'l \rangle \frac{dE''}{\omega - E''}.$$

Здесь знак $P \int$ означает, что интеграл рассматривается в смысле главного значения. Интегрирование по E'' включает суммирование по дискретным состояниям, в том числе и по занятым (дырочным) уровням.

Волновые функции в (5) выбираются следующим способом. Налетающий мюон ν_1 описывается волновой функцией ϕ^N , рассчитанной в поле нейтрального атома. Соответствующим выбором волновых функций виртуальных электронов можно по-разному учесть вклад многоэлектронных корреляций, а именно, выбором $\phi_{\nu_2}^{N-1}$ (т.е. в поле с дыркой ν_3) учитывается часть корреляций ПСФ во взаимодействии между электроном и дыркой.

После того как матричные элементы $\langle \nu_1 \nu_3 \| V_\lambda \| \nu_4 \nu_2 \rangle$ получены, уравнение (7) может быть решено для неприводимой собственно энергетической части, через которую выражаются поправки к фазе рассеяния

$$\Delta\delta_l(E) = \arctg [-\pi \langle \psi_{El} | \bar{\Sigma}(E) | \psi_{El} \rangle]. \quad (8)$$

При энергиях, превышающих порог ионизации атома, выражение для матричного элемента, определяемого (6), становится комплексным, а вместе с ним становятся комплексными и решение уравнения, и поправки к фазе.

Обозначим фазу

$$\delta_l(E) = \lambda_l(E) + i\mu_l(E), \quad (9)$$

где

$$\lambda_l(E) = \delta_l^{\text{HF}}(E) + \text{Re } \Delta\delta_l(E), \quad (10)$$

а

$$\mu_l(E) = \text{Im } \Delta\delta_l(E), \quad (11)$$

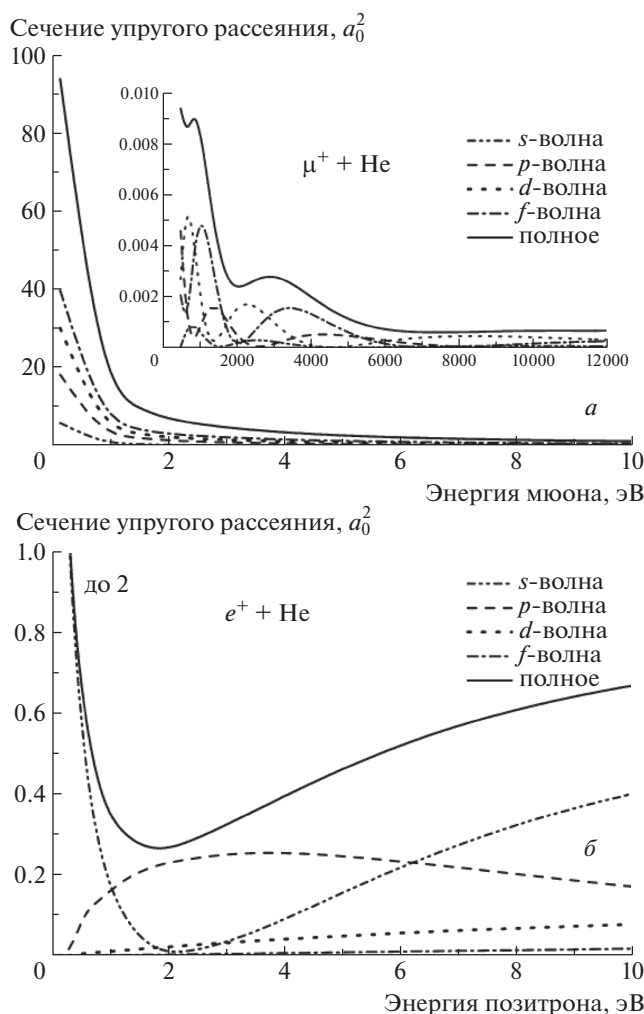
где $\delta_l^{\text{HF}}(E)$ — фаза волновой функции мюона, которая получается при решении уравнений Хартри–Фока для мюона в поле атома. Знание фазы (9) позволяет найти как сечения упругого рассеяния мюона на атоме [9]:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{el}} &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \times \\ & \times (\cosh 2\mu_l - \cos 2\lambda_l) \exp(-2\mu_l), \end{aligned} \quad (12)$$

где $k^2 = 2mE_m$ ³⁾, масса мюона $m = 207$ и энергия мюона E_m , так и неупругого рассеяния

$$\sigma_{\text{in}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - \exp(-4\mu_l)]. \quad (13)$$

³⁾В статье используется атомная система единиц $e = m_e = \hbar = 1$, где e — заряд электрона, m_e — его масса, $\hbar$ — постоянная Планка.

Рис. 1. Сечение упругого рассеяния μ^+/He и e^+/He .

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчетов сечений упругого и неупругого рассеяния μ^+/He , e^+/He , μ^+/Ar , e^+/Ar с использованием программного комплекса АТОМ [6] приведены на рис. 1–4. Расчеты показали, что при рассеянии мюонов атомами также, как и при рассеянии электронов атомами [10], основной вклад в фазу рассеяния дают монопольные возбуждения ($\lambda = 0$ в формулах (3)–(6)) электронов валентных оболочек. Для сравнения приведены результаты расчетов рассеяния позитрона на этих же атомах. Эти частицы имеют одинаковый заряд, но разные массы.

На рис. 1а и 1б приводятся соответственно сечения упругого рассеяния μ^+/He и e^+/He . На врезке рис. 1а — сечения при энергиях в диапазоне 300–12 000 эВ. Сечения вычислялись для s -, p -, d -, f -волн. Вклады в сечения упругого рассеяния μ^+ парциальных волн $l = 0, 1, 2, 3$ при малых кинетических энергиях не обращаются в нуль (см.

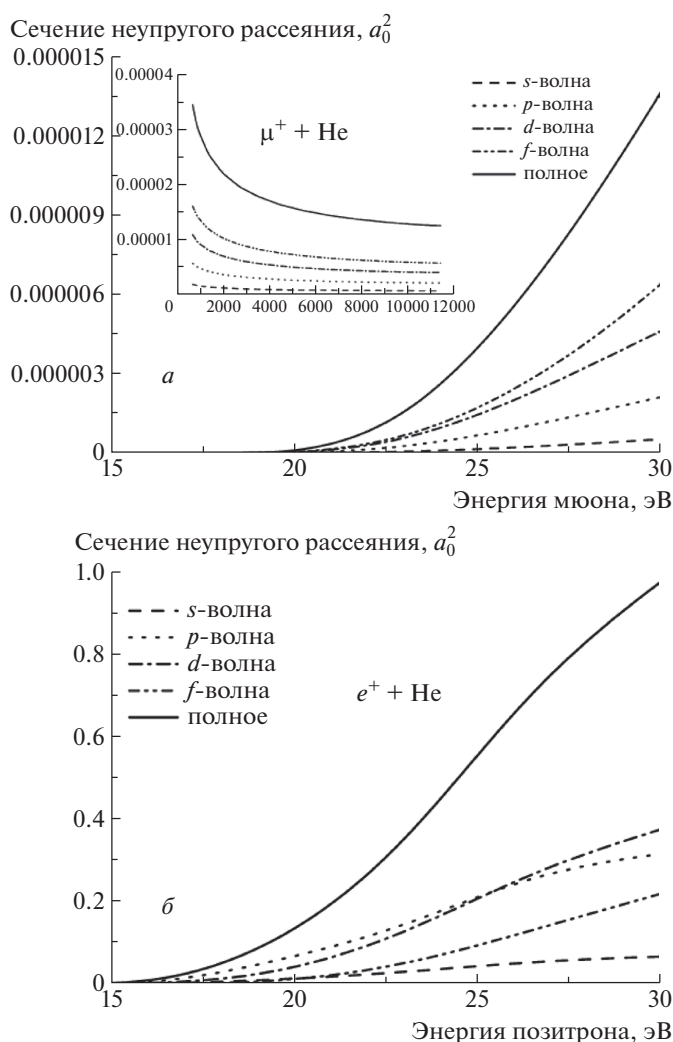
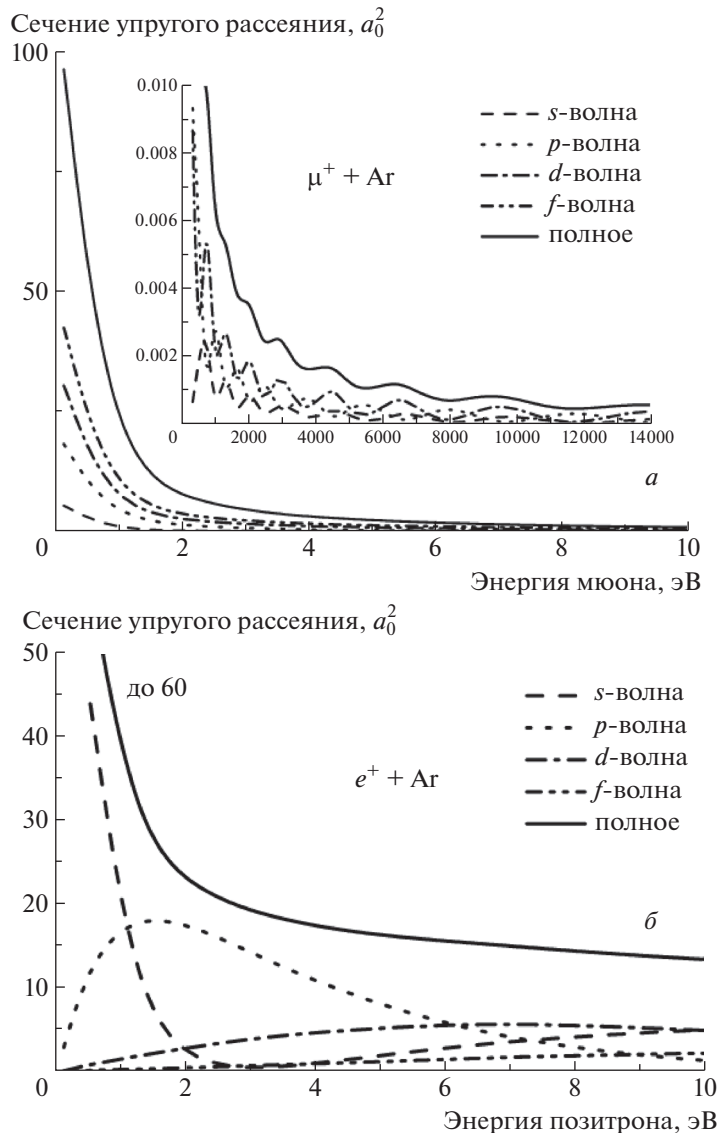
Рис. 2. Сечение неупругого рассеяния μ^+/He и e^+/He .

рис. 1а). В этом состоит их основное отличие от сечений упругого рассеяния e^+ , которые из-за наличия центробежного потенциала $\frac{l(l+1)}{2mr^2}$, препятствующего проникновению волновой функции позитрона в область атома, обращаются в нуль при малых кинетических энергиях (см. рис. 1б). Сечения неупругого рассеяния мюонов имеют два максимума: один в области нескольких сотен эВ, а другой в области нескольких тысяч эВ, и положение максимума зависит от углового момента парциальной волны.

На рис. 2а и 2б приведены соответственно сечения неупругого рассеяния μ^+/He и e^+/He . На врезке рис. 2а — сечения при энергиях в диапазоне 300–12 000 эВ. Наибольший вклад в сечения неупругого рассеяния мюонов на He дает f -волна. Соотношение между парциальными волнами не

Рис. 3. Сечение упругого рассеяния μ^+/Ar и e^+/Ar .

зависит от энергии и приблизительно пропорционально величине $2l + 1$. В то же время в случае позитронов наибольший вклад дают p - и d -волны.

На рис. 3а и 3б мы даем сечения упругого рассеяния μ^+/Ar и e^+/Ar . На врезке рис. 3а — сечения при энергиях в диапазоне 300–14 000 эВ. Интересно, что осцилляции в сечениях упругого рассеяния мюонов на атоме Ar сохраняются также и при больших энергиях (до 14 000 эВ) и наибольший вклад дает f -волна. В то же время в сечении упругого рассеяния позитрона на Ar дает вклад s -волна.

На рис. 4а и 4б приведены сечения неупругого рассеяния μ^+/Ar , e^+/Ar . На врезке рис. 4а — сечения при энергиях в диапазоне 300–12 000 эВ. Ход парциальных сечений неупругого рассеяния

мюонов на атоме Ar подобен ходу сечений неупругого рассеяния на атоме Ne — соотношения между парциальными волнами почти постоянны при изменении энергии. Наибольший парциальный вклад в рассеяние как мюона, так и позитрона дает f -волна.

На рис. 5 приведены для сравнения фазы упругого рассеяния для p -волны μ^+/Ar в приближениях Хартри–Фока и УПСФ.

Сечения упругого и неупругого рассеяния позитронов хорошо изучены, поэтому интересно рассмотреть отличия в сечении рассеяния мюонов от сечения рассеяния позитронов. Наличие центробежного потенциала, величина которого для позитрона при $l = 1$ и $r = 1$ имеет величину порядка атомной единицы, приводит к тому, что в области

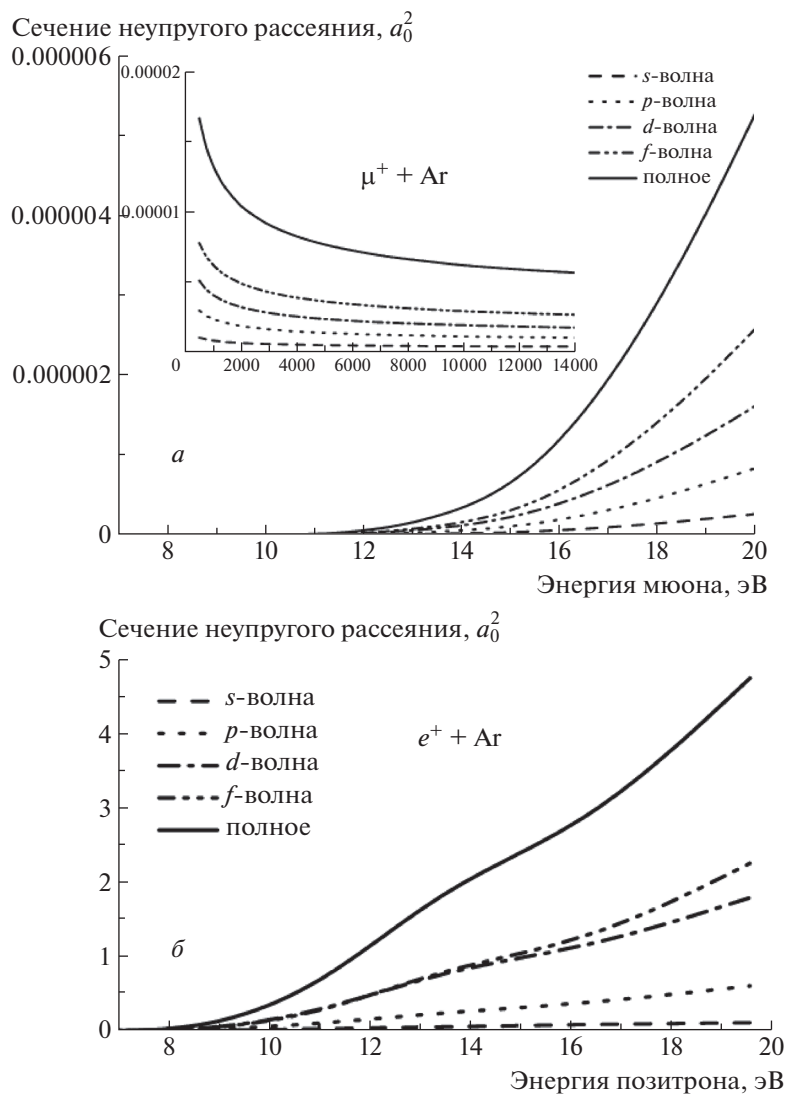


Рис. 4. Сечение неупругого рассеяния μ^+/Ar и e^+/Ar .

малых кинетических энергий основной вклад в сечение позитрона дает s -волна. В случае μ^+ центробежный потенциал примерно в 200 раз меньше и не препятствует проникновению волновой функции μ^+ в область атома. Поэтому в случае μ^+ вклады парциальных волн с $l > 0$ существенны при всех энергиях, начиная от самых малых. При больших энергиях основной вклад в сечения как e^+ , так и μ^+ дают парциальные волны с $l > 0$. Поскольку в знаменателе формулы (12) стоит величина $k^2 = 2mE_m$, сечения рассеяния μ^+ почти на два порядка меньше сечений e^+ . Также важно отметить, что сечения упругого рассеяния мюонов во всем диапазоне энергий почти на два порядка превосходят сечения неупругого рассеяния. Сечения упругого рассеяния μ^+ на атоме Ne имеют по два максимума для каждой из парциальных волн, причем их положения зависят от углового момента

парциальной волны (см. рис. 1а). Сечения упругого рассеяния μ^+ на атоме Ar в рассматриваемом диапазоне (до 14000 эВ) для всех парциальных волн имеют по 5–6 максимумов и минимумов (см. рис. 3). В качестве примера на рис. 5 приведена фаза упругого рассеяния для p -волны на атоме Ar. Из этого рисунка видно, что диапазон изменения фазы соответствует нескольким периодам косинуса в формуле (12), что приводит к осцилляционному характеру зависимости сечения от энергии. Из этого рисунка видно также, что основной вклад в фазу дает величина $\delta_l^{\text{HF}}(E)$, но при этом вклад многоэлектронных эффектов (см. графическую формулу (3)) также весьма существенный. Величины и характер изменения фаз для остальных парциальных волн аналогичны приведенным на рис. 5 для p -волны.

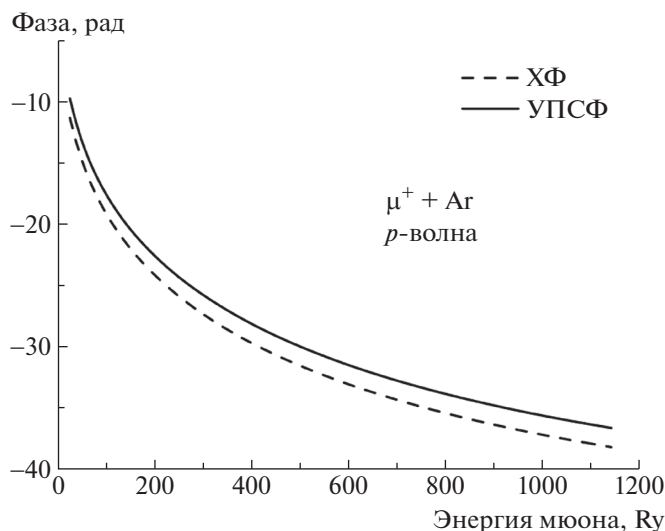


Рис. 5. Фазы упругого рассеяния μ^+/Ar (p -волна) в ХФ и УПСФ.

4. ВЫВОДЫ

Методом Хартри–Фока с применением много-частичной теории возмущений нами рассчитаны сечения упругого и неупругого рассеяния μ^+ и e^+ на атомах He и Ar. Результаты расчетов позволяют выявить следующие основные тенденции. Как при малых, так и при больших энергиях вклады всех парциальных волн $l = 0, 1, 2, 3$ в сечения как упругого, так и неупругого рассеяния существенны. Основной вклад в фазу рассеяния дают моно-польные возбуждения ($\lambda = 0$ в формулах (3)–(6)) электронов валентных оболочек. Сечения упругого рассеяния мюонов почти на два порядка больше сечений неупругого рассеяния и поэтому должны

учитываться при расчете эффективной глубины проникновения мюонов в образец. Зависимость сечений упругого рассеяния мюонов от кинетической энергии имеет осциллирующий характер во всем рассмотренном диапазоне (до 14 000 эВ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А. О. Вайсенберг, *Мю-мезон* (Наука, Москва, 1964).
2. Н. А. Черепков, Л. В. Чернышева, *ЯФ* **32**, 709 (1980).
3. M. Ya. Amusia, N. A. Cherepkov, L. V. Chernysheva, and S. G. Shapiro, *J. Phys. B* **9**, 17 (1976).
4. M. Ya. Amusia, V. K. Dolmatov, and L. V. Chernysheva, *J. Phys. B* **54**, 185003 (2021).
5. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, *Computation of Atomic and Molecular Processes: Introducing the ATOM-M Software Suite* (Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, 2021), Vol. 117.
6. М. Я. Амусья, С. К. Семенов, Л. В. Чернышева, *АТОМ-М алгоритмы и программы исследований атомных и молекулярных процессов* (Наука, С.-Петербург, 2016).
7. J. S. Bell and E. J. Squires, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 96 (1959).
8. I. Lindgren and J. Morrison, *Atomic Many-Body Theory* (Springer, Berlin, 1982).
9. N. F. Mott and H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford, 1949).
10. М. Я. Амусья, Л. В. Чернышева, and V. G. Yarzhevsky, *Handbook of Theoretical Atomic Physics, Data for Photon Absorption, Electron Scattering, and Vacancies Decay* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2012).

SCATTERING OF POSITIVE MUONS BY ATOMS OF INERT GASES

L. V. Chernysheva¹⁾, V. G. Yarzhevsky²⁾

¹⁾ Ioffe Institute, 194021 St. Petersburg, Russia

²⁾ Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry of RAS, 119991, Moscow, Russia

In the present work, the cross sections of elastic and inelastic scattering of positive muons by He and Ar atoms at low and medium kinetic energies are calculated by the methods of many-body theory with the use of the ATOM-M software package. For comparison, the results of elastic and inelastic positron scattering at the same energies are also given. The dependence of the phases and scattering cross sections on the charge of the particle and its mass, as well as on the charge of the nucleus of the scattering atom, is discussed.