

Przejścia rotacyjne w molekułach mionowych

Wilhelm Czapliński

Katedra Zastosowań Fizyki Jądrowej

1. Stany energetyczne molekuł

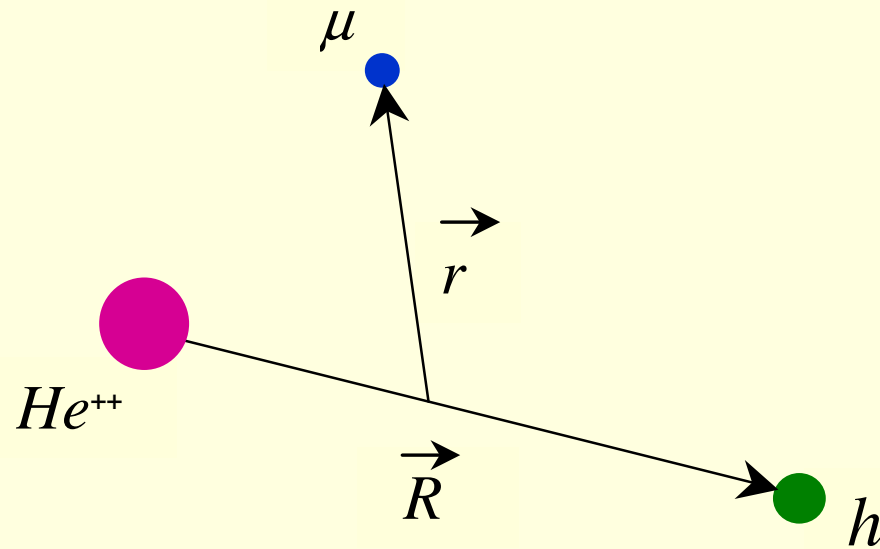
$$(He\mu h)_{J,\nu}^{++} \quad He = {}^3He, {}^4He \quad h = p, d, t$$

2. Tworzenie i rozpad molekuł mionowych

3. Synteza jądrowa ze stanów rotacyjnych $J = 0$ i 1

4. Przejścia rotacyjne $1 \rightarrow 0$

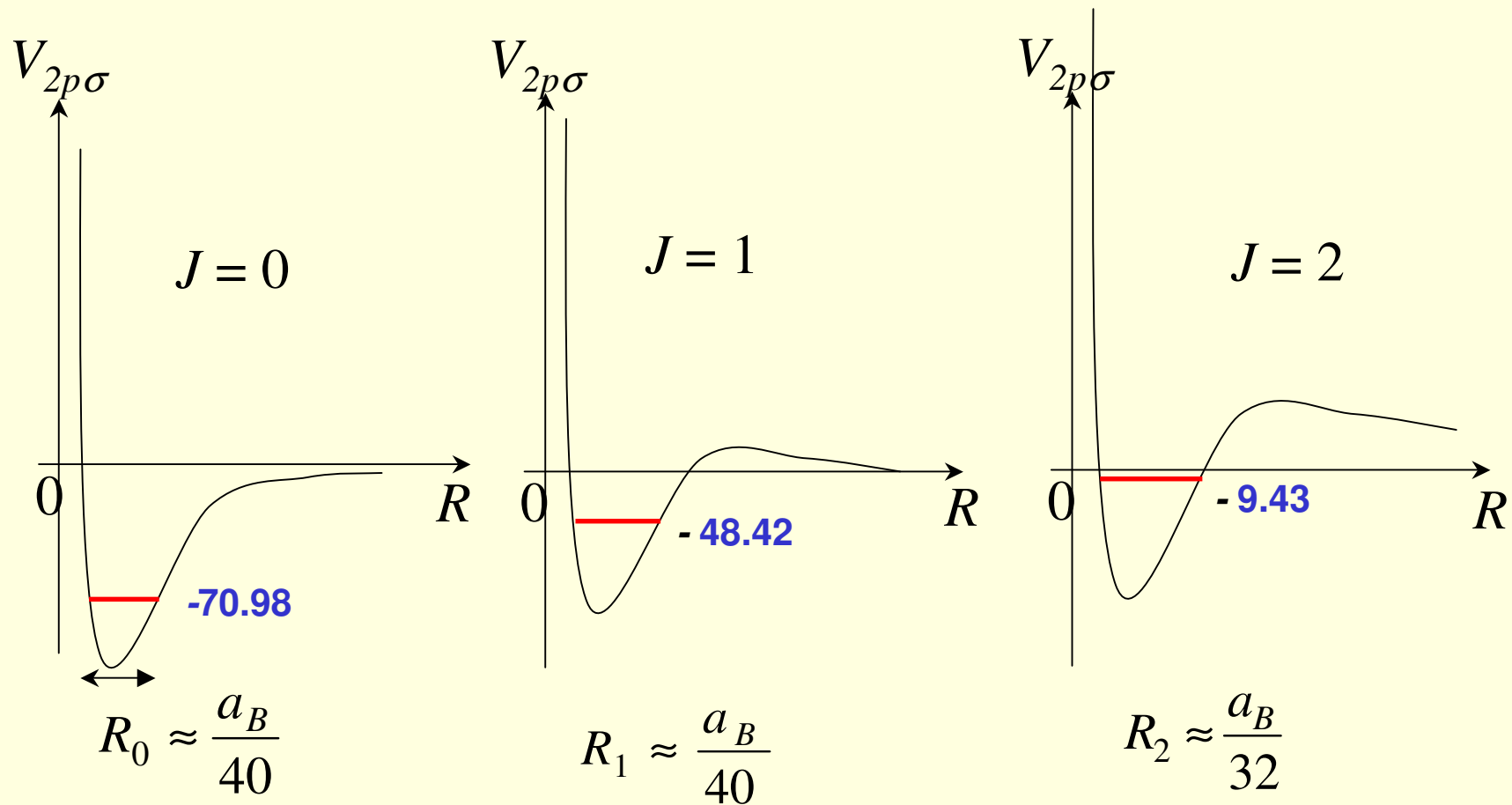
$$(He\mu h)_{J,\nu}^{++} \quad He = {}^3He, {}^4He \quad h = p, d, t$$



Energie wiązania (eV)

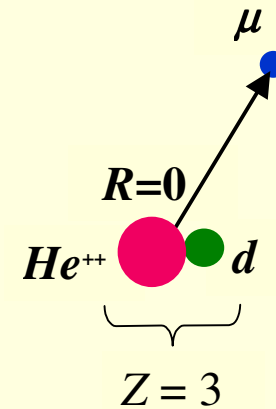
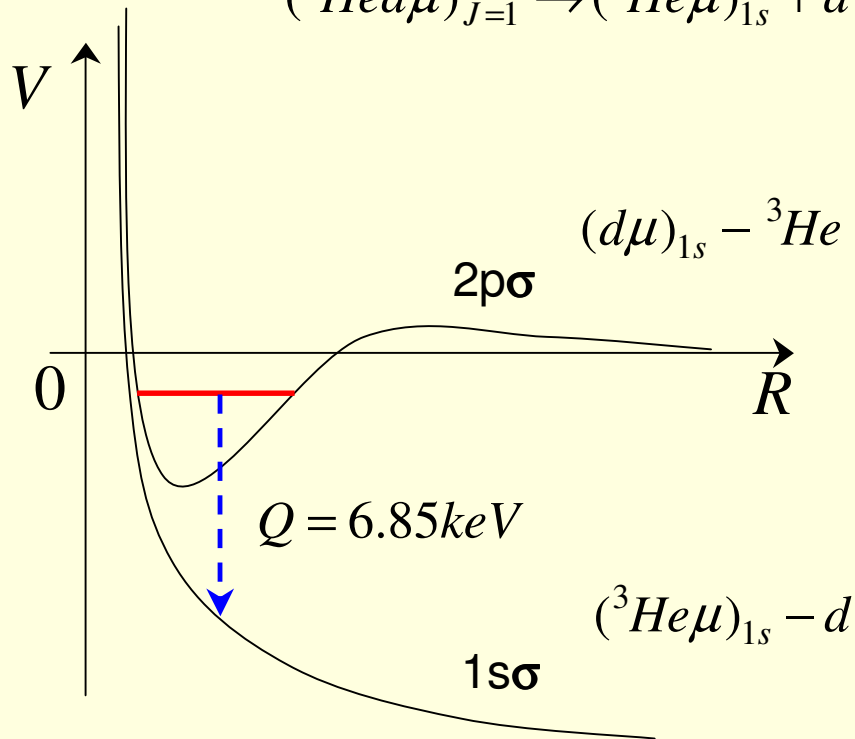
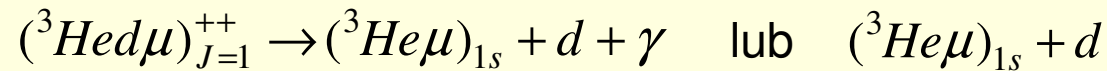
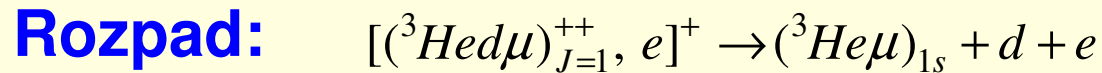
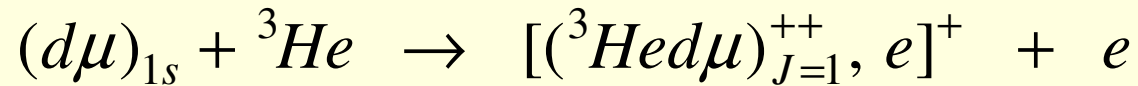
(J,v)	${}^3\text{He}\mu\rho$	${}^3\text{He}\mu\delta$	${}^3\text{He}\mu\tau$	${}^4\text{He}\mu\rho$	${}^4\text{He}\mu\delta$	${}^4\text{He}\mu\tau$
(0,0)	72.76	70.98	72.30	80.64	79.34	81.34
(0,1)						0.13
(1,0)	38.82	48.42	53.33	47.45	58.22	63.96
(2,0)		9.43	19.38		20.42	32.06

Schemat poziomów energetycznych dla $({}^3\text{He}\mu d)_J^{++}$



dla $({}^4\text{He}\mu t)_{J=0, \nu=1}^{++}$ $R_{01} \approx \frac{a_B}{6}$

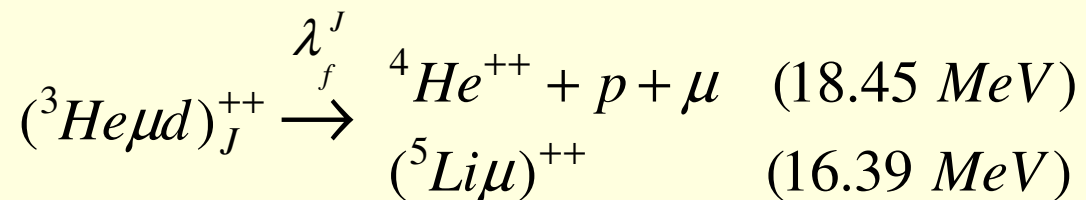
Powstawanie molekuly mionowej $({}^3\text{He}\mu d)_J^{++}$:



sfer. I. kwantowe
mionu $N l m$

Reakcje syntezy w molekułach mionowych

Z relacji nieoznaczoności **E ~ 1keV**



Teoria: $\lambda_f^{J=0} = 1.9 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1} \div 3.8 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$

$$\lambda_f^{J=1} = 6.5 \cdot 10^2 \text{ s}^{-1}$$

$$\frac{\lambda_f^{J=0}}{\lambda_f^{J=1}} \approx 300 \div 6000$$

Eksperyment: $\lambda_f^{\text{exp}} = 4.5 \cdot 10^5 \div 6.9 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$

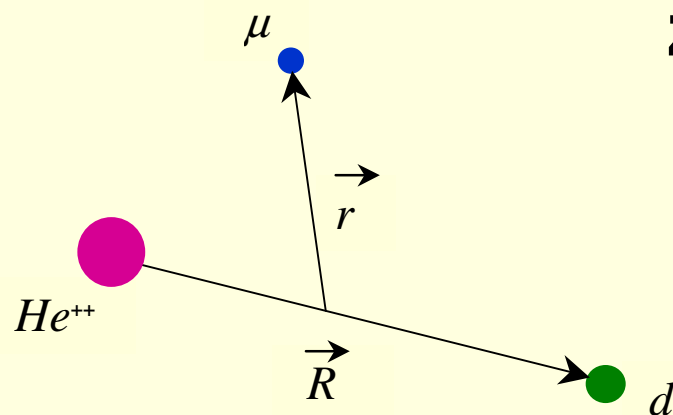
$$\lambda_f^{\text{exp}} = \beta_0 \lambda_f^{J=0} + \beta_1 \lambda_f^{J=1} \quad \beta_0 + \beta_1 = 1$$

Molekuła powstaje w stanie $J = 1$

synteza ze stanu $J = 0$

! Musi istnieć przejście $J = 1 \rightarrow J = 0$!

Opis molekuly i reakcji syntezy



$$\Psi_{m_J}^{J\nu\lambda}(\vec{R}, \vec{r})$$

zupelny uklad obserwabli:

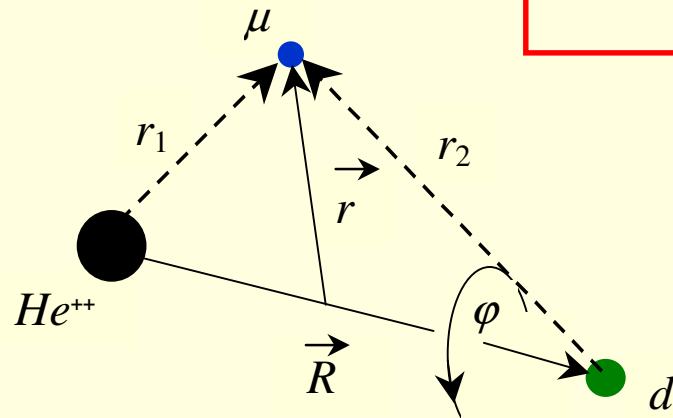
\hat{H} - hamiltonian

\hat{J} - calkowity kręć orbitalny 3 ciał

\hat{J}_Z - rzut kręću orbit. na oś Z ukladu LAB.

\hat{P} - op.pełnej inwersji: $\begin{pmatrix} \vec{r} \rightarrow -\vec{r} \\ \vec{R} \rightarrow -\vec{R} \end{pmatrix}$

$$\hat{H} \Psi_{m_J}^{J\nu\lambda} = \varepsilon_{J\nu} \Psi_{m_J}^{J\nu\lambda}$$



$$\Psi_{m_J}^{J\nu\lambda}(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_{m=0}^J D_{m m_J}^{J\lambda}(\hat{R}, \varphi) F_m^{J\nu\lambda}(R; r_1, r_2)$$

Rozwinięcie adyabatyczne:

$$\begin{aligned} F_m^{J\nu\lambda}(R; r_1, r_2) &= \sum_{N=1}^{\infty} \phi_{Nlm}^{\mu}(R; r_1, r_2) \frac{\chi_{Nlm}^{J\nu}(R)}{R} = \\ &= \phi_{1s\sigma}^{\mu}(R; r_1, r_2) \frac{\chi_{1s\sigma}^{J\nu}(R)}{R} + \phi_{2p\sigma}^{\mu}(R; r_1, r_2) \frac{\chi_{2p\sigma}^{J\nu}(R)}{R} + \dots \end{aligned}$$

funkcje radialne $\chi_{2p\sigma}^{J\nu}(R)$ spełniają układ równań:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon_{J\nu} - U_{ii}^J(R) \right] \chi_i(R) = \sum_{j \neq i} U_{ij}^J(R) \chi_j(R)$$

synteza $\rightarrow \chi_{Nlm}^{J\nu}(R \approx 0)$ - aby to policzyć trzeba znać $U_{ij}(R \approx 0)$

E.S.Chang, U.Fano (Phys.Rev. A6 (1972) 173) :

$$U_{ij}^J(R \approx 0) = \frac{1}{R^2} \langle lm; Jm_J | \underbrace{(\hat{J} - \hat{l})^2}_{\parallel \hat{L}} | lm'; Jm_J \rangle = \frac{1}{R^2} \sum_{L=|J-l|}^{J+l} L(L+1) G_{mL}^{lJ} G_{m'L}^{lJ}$$

\hat{L} - kręt orbitalny jąder !

$G_{m'L}^{lJ} \neq 0$ dla $J - l - L$ parzystych

$$\text{wtedy } \chi_{Nlm}^{J\nu}(R \approx 0) = \sum_{L=|J-l|}^{J+l} G_{mL}^{lJ} (C_L R^{L+1} + \cancel{D_L R^{-L}})$$

człon wiodący dla $L = |J - l|$

możliwe kręty orbitalne jąder dla $J = 0, 1$

$$L = |J - l|, \dots, J + l$$

$J - L - l$ parzyste

Nlm J	$1s\sigma$ $l = 0$	Npm $l = 1$
0	0	1
1	1	0, 2

szybkość syntezy jądrowej

$$\lambda_f^J = B_{L=0} \left\langle \Psi_{m_J}^{J\nu\lambda} \left| \Psi_{m_J}^{J\nu\lambda} \right\rangle_{\vec{r}} \Big|_{R=0} + B_{L=1} \left\langle \nabla_{\vec{R}} \Psi_{m_J}^{J\nu\lambda} \left| \nabla_{\vec{R}} \Psi_{m_J}^{J\nu\lambda} \right\rangle_{\vec{r}} \Big|_{R=0}$$

$B_{L=0}$, $B_{L=1}$ - czynniki jądrowe, $B_{L=0} \gg B_{L=1}$

$$\lambda_f^{J=0} = \sum_{N=1}^{\infty} B_{L=0} \left| \frac{\chi_{Ns\sigma}^{J=0}(R)}{R} \right|_{R=0}^2$$

$$\lambda_f^{J=1} = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{m=-1}^1 B_{L=0} \left| \frac{\chi_{Npm}^{J=1}(R)}{R} \right|_{R=0}^2$$

Dla $J = 0$ i $J = 1$ synteza zachodzi ze stanu krętowego jąder $L = 0$

Przejścia rotacyjne $J = 1 \rightarrow J = 0$

Energie przejść:

$$\varepsilon_{10} = 17.4 \text{ eV } ({}^4\text{He}\mu t)^{++} - 30.9 \text{ eV } ({}^{3,4}\text{He}\mu p)^{++}$$

- mechanizmy przejść:

- $[(\text{He}\mu h)_{J=1}^{++}, e]^+ \rightarrow (\text{He}\mu h)_{J=0}^{++} + e$ - zabroniony !
 $I_{\text{He}^+} = 54.4 \text{ eV} > \varepsilon_{10}$

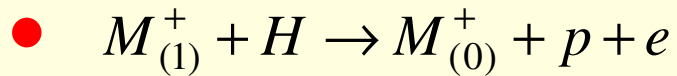
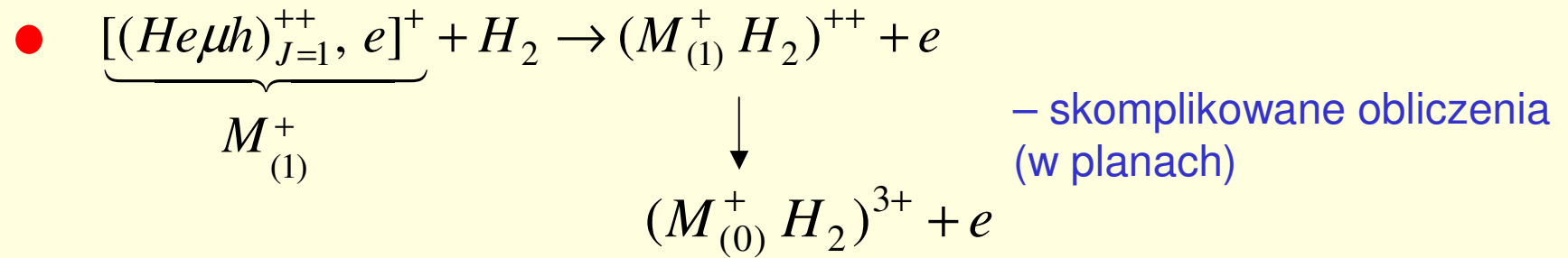
- $[(\text{He}\mu h)_{J=1}^{++}, e_{1s}]^+ + \text{He} \rightarrow [(\text{He}\mu h)_{J=1}^{++}, 2e_{1s}] + \text{He}^+$

wtedy

$$[(\text{He}\mu h)_{J=1}^{++}, 2e_{1s}] \rightarrow [(\text{He}\mu h)_{J=0}^{++}, e_{1s}]^+ + e$$

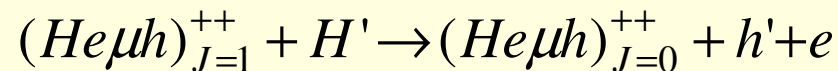
możliwy tylko dla ${}^{3,4}\text{He}\mu p$, $\varepsilon_{10} = 30.9 \text{ eV} > I_{\text{He}} = 24.4 \text{ eV}$

obliczona szybkość (Z. Phys.D **41**(1997)165) $\lambda_{10} \sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$



szybkość obliczona metodą półklasyczną $\lambda_{10} \sim 10^{10} s^{-1}$ (Hyperfine Interactions 142(2002)577)

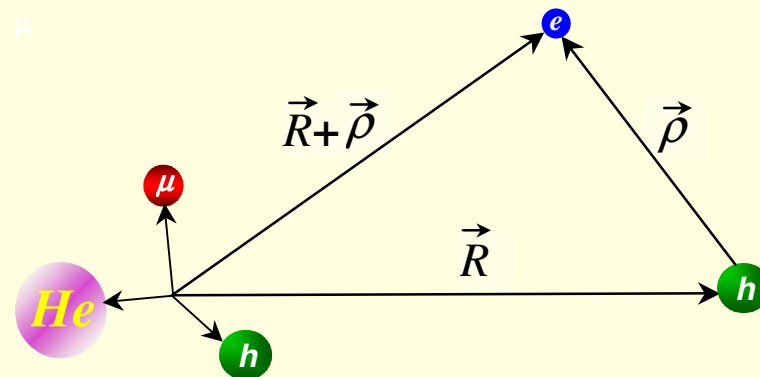
- Ostatnio wykonane obliczenia



Rachunki w pełni kwantowe

Przybliżenia:

1. Molekuła minowa opisana w przybliżeniu adiabatycznym dla termu $2p\sigma$
2. Oddziaływanie molekuła-elektron w przybliżeniu dipolowym:



$$V_{H-He\mu h} = \sum_{i=He,\mu,h} \left(\frac{Z_i}{|\vec{R} - \vec{r}_i|} - \frac{Z_i}{|\vec{R} + \vec{\rho} - \vec{r}_i|} \right) \approx V_{mon} + V_{dip}$$

$$V_{mon} = \frac{2}{R} - \frac{2}{|\vec{R} + \vec{\rho}|} \quad - \text{nie daje wkładu do macierzy przejścia } 1 \rightarrow 0$$

$$V_{dip} = -\frac{\vec{d} \cdot \vec{R}}{R^3} + \frac{\vec{d} \cdot (\vec{R} + \vec{\rho})}{|\vec{R} + \vec{\rho}|^3} \quad - \text{trzeba „uśredniować” po stanach molekuly}$$

$$\langle V_{dip} \rangle = \langle \Psi_{m_J=0}^{J=0} | V_{dip} | \Psi_{m_J}^{J=1} \rangle = \frac{\langle \vec{d} \rangle \cdot \vec{R}}{R^3} - \frac{\langle \vec{d} \rangle \cdot (\vec{R} + \vec{\rho})}{|\vec{R} + \vec{\rho}|^3}$$

$$\langle \vec{d} \rangle = \frac{d}{\sqrt{3}} \vec{\epsilon}_{m_J} \quad \leftarrow \text{wektor polaryzacji: kołowej } (m_J = \pm 1), \text{ liniowej } (m_J = 0) \quad \vec{\epsilon}_{m_J} = \sum_{i=1}^3 a_{im_J} \hat{e}_i$$

Rozwinięcie multipolowe potencjału $\langle V_{dip} \rangle$ – kluczowy punkt obliczeń przekroju czynnego na przejście $1 \rightarrow 0$:

$$\langle V_{dip} \rangle = \frac{d}{\sqrt{3}} \sum_{i=1}^3 a_{im_J} \sum_{\ell=2}^{\infty} W_{\ell}(\hat{R}, \hat{\rho}, \hat{e}_i) \frac{\rho^{\ell-1}}{R^{\ell+1}},$$

gdzie

$$W_{\ell}(\hat{R}, \hat{\rho}, \hat{e}_i) = (-1)^{\ell} \pi^{3/2} \frac{8}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{\ell}{2\ell+1}} \sum_{m_{\ell}=-\ell}^{\ell} \sum_{m_1, m_2} C_{\ell-1, m_1}^{\ell m_{\ell}} C_{1, m_2}^{1 m_2} \bar{Y}_{\ell m_L}(\hat{R}) Y_{\ell-1 m_1}(\hat{\rho}) Y_{1 m_2}(\hat{e}_i)$$

Otrzymany wzór na przekrój czynny na przejście $1 \rightarrow 0$

$$\sigma_{10} \approx \sum_{\ell=0}^4 \sigma_{\ell}$$

gdzie

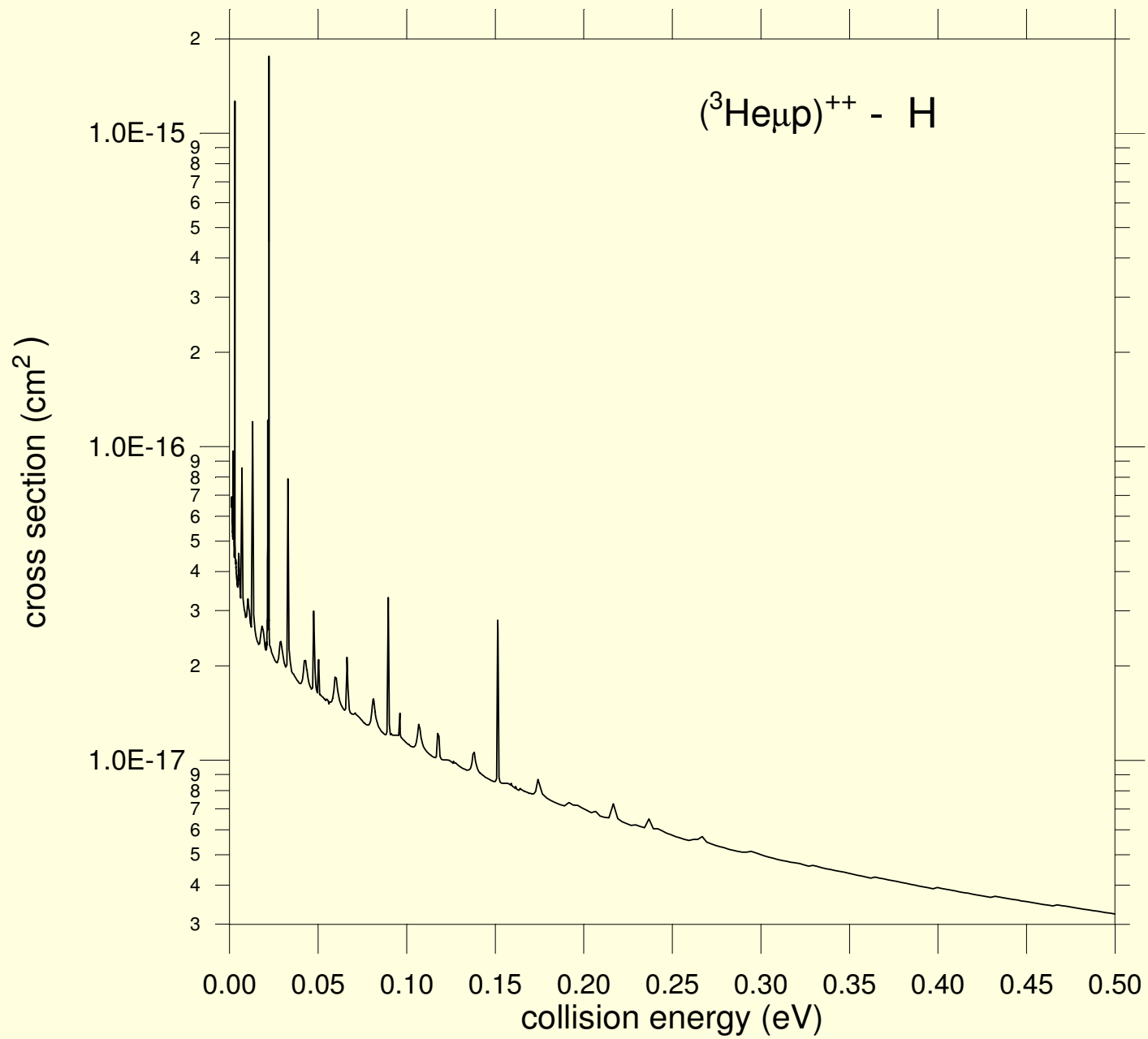
$$\sigma_{\ell} = \frac{2^8}{9} \pi \frac{d^2}{V_i k_i^2} \sum_{l_i l_f} (2l_i + 1)(2l_f + 1) \begin{pmatrix} l_i & l_i & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \int_0^{\infty} dk_f f_L(k_f) G_{l_i l_f \ell}^2(k_i, k_f)$$

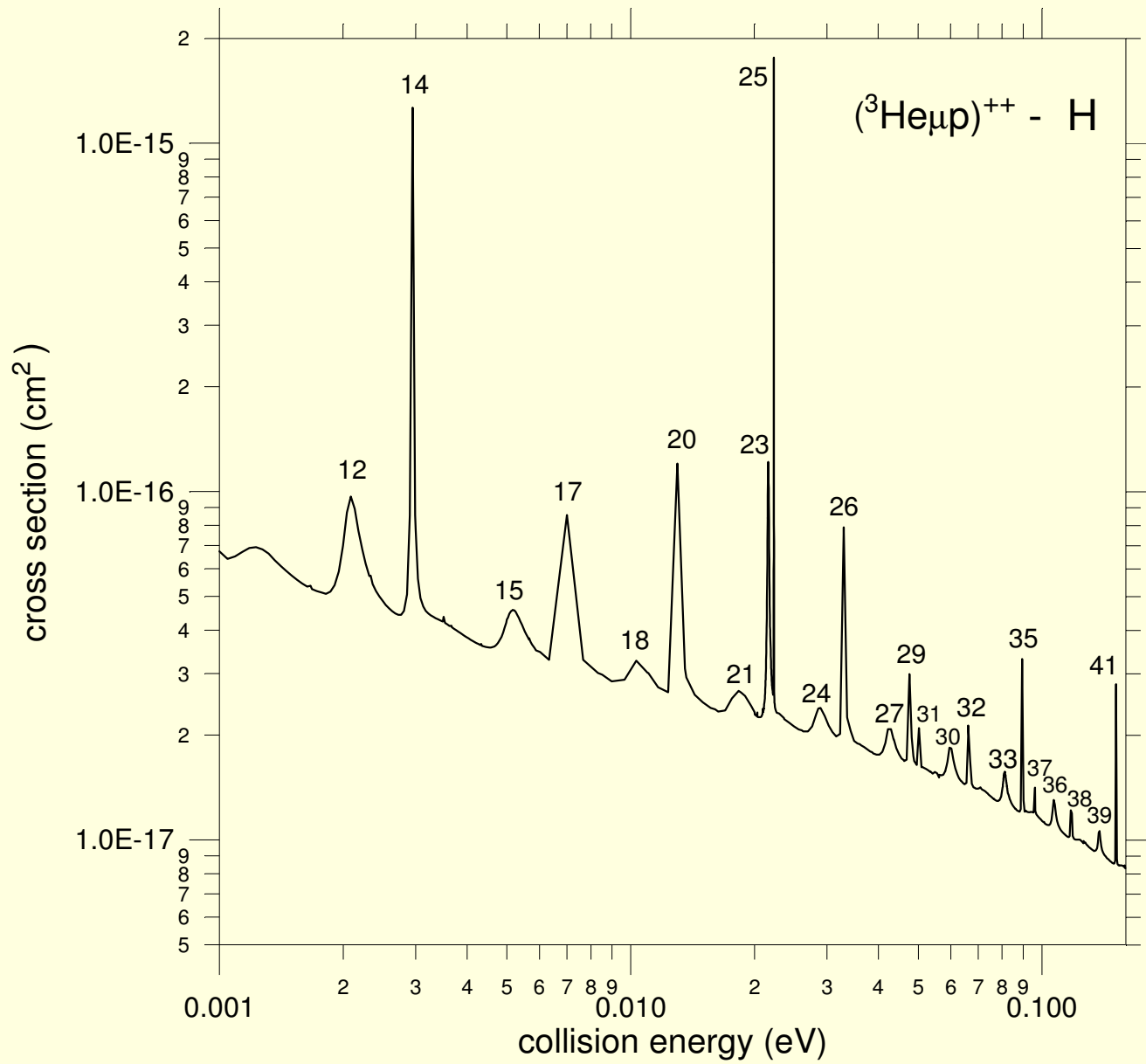
$$f_{\ell}(k_f) = (\ell - 1)^2 4^{\ell} \ell \frac{\exp[-4\kappa \arctg(k_e)]}{(1 - e^{-2\pi\kappa})(1 + k_e^2)^{2\ell+2}} \prod_{s=1}^{\ell-1} [s^2 k_e^2 + 1]$$

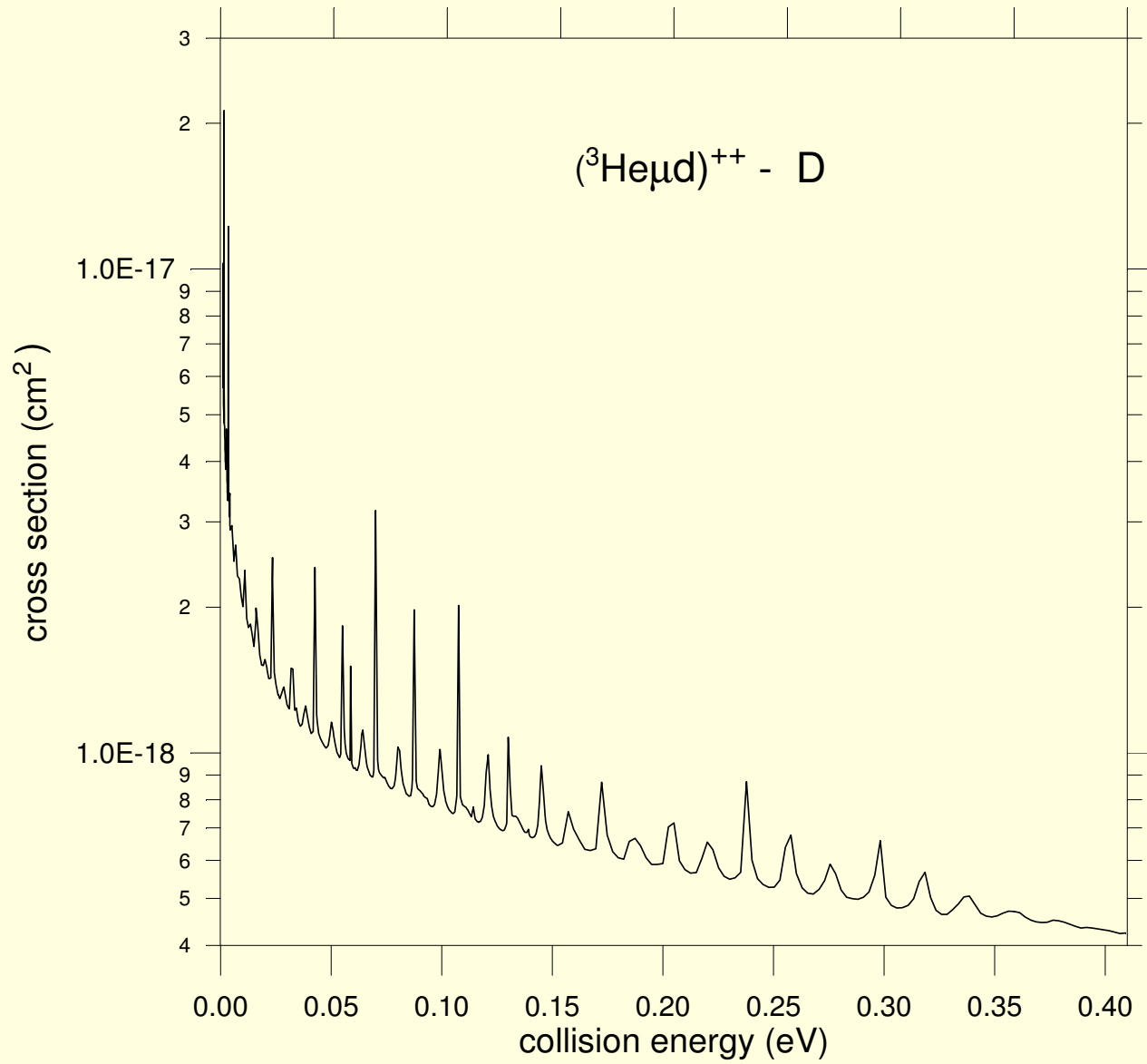
$$G_{l_i l_f \ell}(k_i, k_f) = \int_0^{\infty} \chi_{l_i}(R) \chi_{l_f}(R) R^{-\ell-1} dR$$

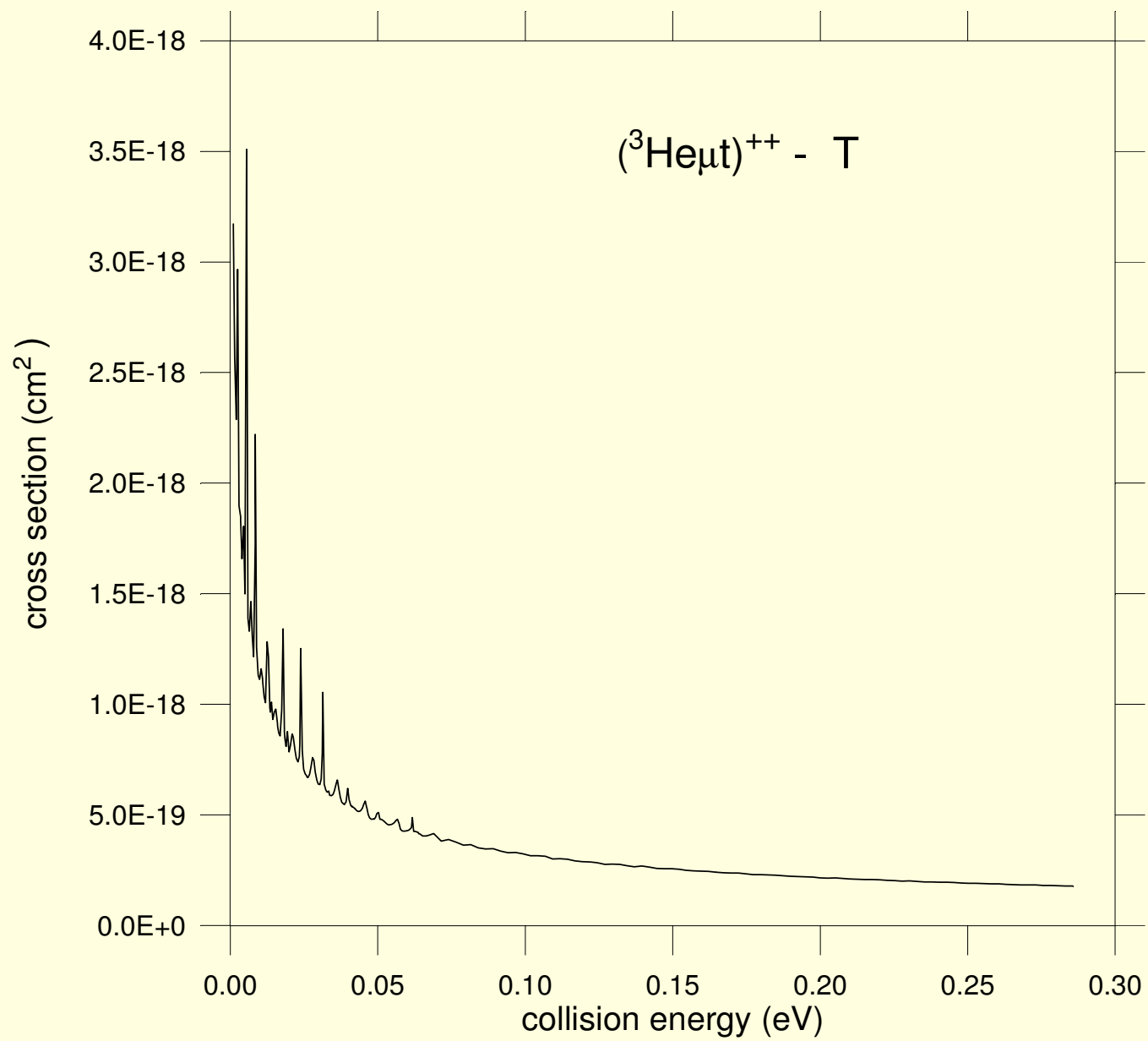
$$k_e = \sqrt{\frac{k_i^2 - k_f^2}{M} + 2(\epsilon_{10} - I_e)}$$

REZULTATY









Dziękuję za uwagę