

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

539.186.22

ОБ ЭФФЕКТАХ НЕСОХРАНЕНИЯ ЧЕТНОСТИ В АТОМАХ

В. А. Алексеев, Б. Я. Зельдович, И. И. Соболев

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	385
2. Наблюдаемые эффекты	387
3. Выбор атомных переходов	388
а) Коэффициенты примеси β (388). б) Матричные элементы магнитного диполя M (389). в) Зависимость от Z величин $\Delta\sigma/\sigma$ и $\text{Re}(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)$ (392). г) Результаты расчетов (392).	
4. Возможные схемы эксперимента	394
а) Измерение различия сечения поглощения $\sigma_+ - \sigma_-$ (394). б) Вращение плоскости поляризации (396). в) Расщепление мод оптического резонатора (397).	
5. Заключение	400
Приложение	401
I. Вычисление матричного элемента P -нечетного взаимодействия (401).	
II. Атомы с несколькими оптическими электронами (405). III. Пояснения к таблице (406).	
Цитированная литература	408

1. ВВЕДЕНИЕ

Первые попытки обнаружить проявление слабого взаимодействия электронов с нуклонами в атомной физике относятся к середине тридцатых годов. Так, в работах ^{1,2} предполагалось существование слабого контактного взаимодействия $V = f\delta(\mathbf{r})$, где $\delta(\mathbf{r})$ — дельта-функция, и делались попытки оценить возможное значение константы f по экспериментальным данным относительно рассеяния медленных нейтронов и изотопического сдвига. Было показано, что взаимодействие с константой f порядка константы Ферми $f \sim G_F \approx 10^{-49} \text{ эрг} \cdot \text{см}^3$ могло бы привести лишь к незначительным поправкам на фоне довольно больших теоретических и экспериментальных неопределенностей измерявшихся величин. Поэтому из данных по рассеянию нейтронов и по изотопическому сдвигу оказалось возможным лишь дать очень грубую верхнюю оценку $f \lesssim 10^{-43} \text{ эрг} \cdot \text{см}^3$, что в 10^6 раз больше константы Ферми G_F .

После создания универсальной теории слабого взаимодействия, осуществляемого через заряженные токи, возможность обнаружить эффекты слабого взаимодействия в атомах стала казаться совершенно нереальной. Согласно этой теории в атомах вообще невозможны эффекты первого порядка по G_F , так как матричные элементы взаимодействия для состояний с фиксированным числом электронов равны нулю.

Лишь в 1959 г. в работе ³ было обращено внимание на некоторые новые аспекты проблемы. Если предположить, что наряду со слабым взаи-

модействием, вызывающим бета-распад, существует взаимодействие электронов с нуклонами ядра, обусловленное нейтральными токами и не сохраняющее четность, то возникают качественно новые эффекты, связанные со смешиванием четных и нечетных атомных состояний. В результате излучение, соответствующее ряду атомных переходов, в частности переходу $2s - 1s$ атома водорода, должно иметь частичную циркулярную поляризацию. Кроме того, в этой работе было указано, что вследствие той же причины должно иметь место вращение плоскости поляризации света в изотропных средах. Несколько позднее эффекты несохранения четности применительно к атому водорода рассматривались также в работе ⁴.

В последнее время интерес к возможности наблюдения подобных эффектов значительно возрос ⁵⁻¹⁰ как в связи с прогрессом общей теории слабых взаимодействий, предсказывающей существование нейтральных токов, так и вследствие обнаружения нейтральных токов в нейтринных экспериментах. Кроме того, развитие новой экспериментальной техники, основанной на лазерных источниках света, существенно расширило возможности наблюдения различных тонких эффектов в атомной физике.

Первый достаточно реалистический вариант лазерного эксперимента был рассмотрен в работе ⁵. Если с помощью циркулярно поляризованного светового пучка возбуждать атом Cs в состояние $7s$ (переход $6s_{1/2} - 7s_{1/2}$) и затем регистрировать фотоны, излучаемые на разрешенном переходе $7s - 6p$, то в принципе можно обнаружить различие в сечениях поглощения σ_+ и σ_- для правой и левой циркулярной поляризации, возникающее вследствие смешивания s - и p -состояний. Ожидаемая величина эффекта по оценкам ⁵ составляет $\Delta\sigma/\sigma \sim 10^{-4}$.

В работе ⁹ рассмотрена возможность другого эксперимента — обнаружения вращения плоскости поляризации в парах таллия на частоте ω , близкой к резонансу ω_0 , соответствующему магнитодипольному переходу $6p\ ^2P_{1/2}, 6p\ ^2P_{3/2}$. Ожидаемый эффект в благоприятных условиях (давление ~ 100 тор и $\omega - \omega_0 \sim \Delta\omega_D$, где $\Delta\omega_D$ — доплеровская ширина) может составлять $\sim 10^{-7}$ рад/см. Все эти оценки показывают, что хотя обсуждаемые эффекты несохранения четности в атомах малы, все-таки имеется вполне реальная надежда их обнаружить.

Для успеха соответствующих экспериментов представляется весьма важным выбрать оптимальные объекты исследования и схему эксперимента. Имеются в виду как сами атомные переходы, так и согласованность их с существующими лазерами, необходимые параметры лазеров для конкретных схем эксперимента и т. п. Обсуждению именно этих вопросов и посвящена настоящая статья.

В гл. 2 дается краткое рассмотрение влияния нечетного взаимодействия атомных электронов с ядром на оптические характеристики атомных систем.

Гл. 3 посвящена выбору оптических объектов исследования, т. е. выбору конкретных атомных переходов, для которых ожидаемые эффекты максимальны и которые могут удовлетворить ряду требований, предъявляемых возможностями эксперимента. Проводятся необходимые вычисления и оценки, причем детали вычислений вынесены в приложения I—III.

В гл. 4 обсуждаются конкретные возможные схемы эксперимента и необходимые для каждой из этих схем параметры и характеристики лазеров.

Все рассмотрение ограничивается оптическими эффектами в нейтральных атомах. Другие возможные проявления несохранения четности, вызываемого нейтральными токами, в частности в многозарядных ионах и мезоатомах, подробно осуждаются в обзоре ¹¹.

При выполнении конкретных оценок мы будем исходить из того же выражения для P -нечетного и T -инвариантного гамильтониана V , которое было использовано, например, в работах ^{5,9}:

$$V = -\frac{G\hbar^3}{2\sqrt{2}c^2m} Zq [(\sigma\mathbf{p}) \delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}) (\sigma\mathbf{p})]; \quad (1.1)$$

здесь G — фермиевская константа, $G = 10^{-5}/m_p^2$, m_p — масса протона, c — скорость света, m — масса электрона, Z — заряд ядра, $\sigma/2$, \mathbf{p} , \mathbf{r} — спин, импульс и координата электрона, фактор $q \approx -0,9$ (см. приложение I).

2. НАБЛЮДАЕМЫЕ ЭФФЕКТЫ

Рассмотрим влияние нечетного взаимодействия V атомных электронов с ядром на радиационные переходы. Наибольший интерес представляют оптически запрещенные переходы между состояниями с одинаковой четностью $i \rightarrow f$, для которых матричные элементы электрического дипольного момента равны нулю. В этом случае поправки, обусловленные потенциалом V , будут наибольшими. Пусть V^a , V^m — операторы электрических и магнитных дипольных переходов. Матричный элемент радиационного перехода $i \rightarrow f$ с точностью до членов первого порядка по V имеет вид

$$H'_{if} = V^m_{if} + \sum_k \left(\frac{V_{ik}V^a_{kf}}{\Delta E_{ik}} + \frac{V^a_{ik}V_{kf}}{\Delta E_{fk}} \right), \quad (2.1)$$

где $\Delta E_{ab} = E_a - E_b$ — разность энергий атомных уровней, суммирование по k распространяется на все состояния с четностью, противоположной четности состояний i, f .

Циркулярные компоненты напряженностей электрического и магнитного полей E_ξ , H_ξ связаны соотношением $E_\xi = -i\xi H_\xi$, где ξ — принимает значения $+1$ и -1 для правой и левой поляризаций. Поэтому в случае испускания или поглощения циркулярно-поляризованных фотонов $V^a_\xi \propto D_\xi E^*_\xi$, $V^m_\xi \propto M_\xi H^*_\xi = +i\xi M_\xi E_\xi$, где D , M — операторы электрического и магнитного дипольных моментов. Учитывая, что матрица V диагональна по полному моменту атома J и его z -компоненте m , нетрудно получить

$$H'_{if} \propto (-1)^{J_i - m_i} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_f \\ -m_i & \xi & m_f \end{pmatrix} \times \\ \times \left\{ (i \| M \| f) + i\xi \sum_k \left[\frac{\tilde{V}_{ik}}{\Delta E_{ik}} (k \| D \| f) - (i \| D \| k) \frac{\tilde{V}_{kf}}{\Delta E_{kf}} \right] \right\}, \quad (2.2)$$

где

$$\begin{pmatrix} J_i & 1 & J_f \\ -m_i & \xi & m_f \end{pmatrix}$$

— $3j$ -символ, $(a \| M \| b)$, $(a \| D \| b)$ — приведенные матричные элементы M и D . Запишем (2.2) в виде

$$H'_{if}(\xi) \propto \sqrt{S_m(if)} (1 + \xi\chi), \quad (2.3)$$

$$\chi = \sum_k \chi_k, \quad \chi_k = i \frac{\beta(i, k) (k \| D \| f) - (i \| D \| k) \beta(k, f)}{\sqrt{S_m(if)}}, \quad (2.4)$$

$$\beta(a, b) = \frac{V_{ab}}{\Delta E_{ab}}; \quad (2.5)$$

здесь $S_m(if) = |(i \| M \| f)|^2$ — сила линии магнитно-дипольного перехода, $\beta(a, b)$ — коэффициент смешивания состояний a, b за счет взаимо-

действия V . С точностью до членов, линейных по χ , имеем

$$|H_{if}(\xi)|^2 \propto S_m(if) \cdot (1 + 2\xi \operatorname{Re} \chi), \quad \xi = \pm 1. \quad (2.6)$$

Как показывается в приложении I, параметр χ чисто вещественный, поэтому символ Re в дальнейшем будет опускаться. Можно показать, что вещественность χ связана с T -инвариантностью гамильтониана (1.1), т. е. с инвариантностью относительно изменения знака времени. Для P - и T -нечетного взаимодействия параметр χ был бы чисто мнимым и обсуждаемые в настоящей статье эффекты отсутствовали бы. Обозначим через σ_ξ , W_ξ сечение поглощения и вероятность испускания циркулярного поляризованного фотона, $\Delta\sigma = \sigma_+ - \sigma_-$, $\Delta W = W_+ - W_-$. Тогда

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} = \frac{\Delta W}{W} = 4\chi; \quad (2.7a)$$

здесь σ , W соответствуют $V = 0$, т. е. первому члену в (2.4). Часто вводят степень циркулярной поляризации P ,

$$P = \frac{W_+ - W_-}{W_+ + W_-} = \frac{1}{2} \frac{\Delta W}{W} = 2\chi. \quad (2.7b)$$

Мы, однако, будем пользоваться величинами (2.7a).

Из-за различия в сечениях поглощения σ_+ , σ_- возникает также различие в значениях диэлектрической проницаемости для волн, поляризованных по правому и левому кругу, $\Delta\epsilon = \epsilon_+ - \epsilon_-$. Обозначим через ϵ_0 ту часть диэлектрической проницаемости, которая определяется всеми остальными атомными переходами, помимо перехода $i \rightarrow f$. Поскольку $\epsilon(\omega) - \epsilon_0(\omega) \propto \sigma$, легко получить

$$\Delta\epsilon = (\epsilon - \epsilon_0) \frac{\Delta\sigma}{\sigma} = (\epsilon - \epsilon_0) \cdot 4\chi. \quad (2.8)$$

Таким образом, обнаружить существование слабого взаимодействия V , нарушающего закон сохранения четности, можно или по различию сечений поглощения и вероятностей испускания циркулярно поляризованных фотонов, или по различию вещественных частей ϵ_+ и ϵ_- .

3. ВЫБОР АТОМНЫХ ПЕРЕХОДОВ

Значения величин $\Delta\sigma/\sigma$ и $\Delta\epsilon$ из (2.7), (2.8) существенно зависят от выбора конкретных атомных переходов. Согласно (2.4), (2.7) $\Delta\sigma/\sigma \propto 4\beta D/M$, поэтому желательно обеспечить наибольшие значения β и D и наименьшие возможные значения M , при которых рассматриваемый переход еще может быть наблюдаем. Что касается величины $\operatorname{Re}(\epsilon_+ - \epsilon_-)$, то здесь преимущество имеют переходы со сравнительно большими значениями M (см. ⁹), однако, как показывается в гл. 4, для достаточно больших $M \gtrsim 2 \cdot 10^{-2} \mu_B$, где μ_B — магнетон Бора, в оптимальных условиях наблюдаемые эффекты пропорциональны βD и практически не зависят от M .

а) Коэффициенты примеси β

Рассмотрим прежде всего, от каких атомных параметров зависят коэффициенты смешивания состояний разной четности β из (2.5). Вычисления матричных элементов V содержатся в приложениях I, II. Воспользуемся результатами этих вычислений. В простейшем случае одноэлектронного атома (один электрон сверх заполненных оболочек) оператор (1.1) смешивает только s - и p -состояния, причем $\langle s_{1/2} | V | p_{1/2} \rangle \propto R_s^*(0) (R_p/r)_{r \rightarrow 0}$, где R_s , R_p — радиальные функции s - и p -состояний. Для определения

$R_s(0)$ и $(R_p/r)_{r \rightarrow 0}$ наиболее простым и надежным является способ, принятый в теории сверхтонкой структуры и позволяющий выразить $R_s(0)$ через экспериментальные значения энергии связи s -электрона и $(R_p/r)_{r \rightarrow 0}$ через тонкое расщепление уровней $p_{1/2}$, $p_{3/2}$ (см., например, ¹²). В результате можно получить (см. (I.26))

$$\beta(s_{1/2}, p_{1/2}) = \frac{\langle s_{1/2} | V | p_{1/2} \rangle}{\Delta E(s_{1/2}, p_{1/2})} = \\ = i \frac{1}{\pi} \cdot 10^{-5} \left(\frac{m}{m_p} \right)^2 \alpha Q Z^2 \frac{1}{(n_*^s)^{3/2}} \left(\frac{3\zeta_p}{2\text{Ry}} \right)^{1/2} \lambda_{\text{рел}}(Z) \frac{\text{Ry}}{\Delta E(s_{1/2}, p_{1/2})}, \quad (3.4)$$

где Z — заряд атомного ядра, $\alpha = 1/137$, n_*^s — эффективное главное квантовое число в s -состоянии; $3\zeta_p/2$ — тонкое расщепление уровней $p_{1/2}$, $p_{3/2}$; $\lambda_{\text{рел}}(Z)$ — релятивистский фактор (I.21б); Ry — единица энергии Ридберга.

Для многоэлектронных атомов матричный элемент гамильтониана (1.1) отличен от нуля только для смешивания конфигураций a , b , содержащих соответственно s - и p -электроны, причем

$$\langle a | V | b \rangle = \langle s_{1/2} | V | p_{1/2} \rangle Q(a, b), \quad (3.2)$$

где Q — фактор порядка единицы, зависящий от угловых моментов. Формулы для факторов Q даются в приложении II.

Интересно обсудить зависимость коэффициента примеси β от заряда ядра Z . Параметр тонкого расщепления p -уровня $\zeta_p \propto Z^2 (n_*^p)^{-3}$. Поэтому коэффициент $\beta \propto Z^3 \lambda_{\text{рел}}(Z) (n_*^p n_*^s)^{-3/2} (\Delta E(s, p))^{-1}$. При $Z \leq 30$ $\lambda_{\text{рел}} \approx 1$, при $Z \geq 40$ $\lambda_{\text{рел}}(Z)$ быстро растет с ростом Z , достигая значения $\lambda_{\text{рел}} = 6$ при $Z = 80$. Главные квантовые числа n_*^s , p и разности энергий $\Delta E(s, p)$ можно считать не зависящими от Z (*). Поэтому коэффициенты смешивания β растут с увеличением Z , как Z^3 при $Z \leq 30$, и несколько быстрее, чем Z^3 , при $Z \geq 30$. Таким образом, наибольшие значения β реализуются в тяжелых атомах. Это важное обстоятельство впервые было отмечено в работе ⁵.

б) Матричные элементы магнитного диполя M

В нерелятивистском приближении матричные элементы магнитного диполя отличны от нуля только для переходов между компонентами тонкой структуры одного терма или компонентами сверхтонкой структуры одного уровня. По порядку величины все матричные элементы такого типа равны магнетону Бора μ_B . Для переходов между уровнями различных электронных конфигураций или между различными термами LS матричные элементы M в нерелятивистском приближении равны нулю. Смешивание электронных конфигураций за счет электростатического взаимодействия электронов не снимает этого запрета. Запрет снимается только за счет релятивистских эффектов. Возможны два типа таких эффектов — релятивистские поправки в операторе магнитного момента ¹³ и либо спин-орбитальное взаимодействие, либо совместное влияние смешивания конфигураций и спин-орбитального взаимодействия.

*) В тех случаях, когда по какой-либо причине ΔE_{ab} аномально мало (например, $\Delta E_{n_s, n_p}$ в атоме водорода), коэффициент примеси β становится очень большим. Однако при этом рассматриваемый переход попадает в крыло сильного, оптически разрешенного перехода, что делает эксперимент по измерению сечения поглощения практически невозможным. Эксперименты других типов для водорода, по-видимому, также нереалистичны; см. ¹¹.

Начнем с первого из этих эффектов. При учете высших членов разложения по v/c (v — скорость электрона) в операторе \mathbf{M} возникают дополнительные члены \mathbf{M}' порядка α^2 : $\mathbf{M} = \mu_B (\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{I}) + \mathbf{M}'$. Для переходов $ns_{1/2} - n's_{1/2}$ в атоме водорода

$$\mathbf{M}' = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{1}{3} \frac{\alpha^2}{Ry} \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (3.3)$$

Для переходов $ns_{1/2} - n's_{1/2}$ в щелочных атомах ⁸

$$\mathbf{M}' = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{1}{3} \frac{\alpha^2}{Ry} \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} \frac{d}{dr} (rU) \right], \quad (3.4)$$

где $U(r)$ — эффективный потенциал для валентного электрона. Второй член в (3.4) существен лишь при $r \ll r_0$, где r_0 — радиус атомного остатка, так как для $U \propto 1/r$ $d(rU)/dr = 0$. Нетрудно показать, что относительный вклад этого члена в матричный элемент перехода невелик. Необходимость в учете этого члена может возникнуть при рассмотрении переходов между уровнями, для которых одно из главных квантовых чисел n, n' велико, когда вклад первого члена в (3.4) может оказаться аномально малым. При этом, однако, необходимо также учесть обменное взаимодействие валентного электрона с электронами заполненных оболочек, которое дает вклад того же порядка величины, что и второй член в (3.4). Поэтому ниже в оценках мы будем использовать выражение (3.3) *).

Матричные элементы оператора (3.3) слабо зависят от Z и для большого числа переходов между основным и нижними возбужденными уровнями, например для переходов $ns \rightarrow (n+1)s$ в щелочных атомах, составляют $\sim 0,1\alpha^2\mu_B$. Так, численные расчеты, выполненные с полуэмпирическими волновыми функциями¹⁵, дают следующие значения квадрата матричного элемента: $|\langle ns | \mathbf{p}^2/2m | n's \rangle|^2$: калий, $4s - 5s - 0,1 Ry^2$; рубидий, $5s - 6s - 0,15 Ry^2$; цезий, $6s - 7s - 0,2 Ry^2$. Как видно, зависимость от Z действительно очень слабая, во всяком случае по сравнению с зависимостью $\beta(Z)$.

Перейдем теперь к спин-орбитальному взаимодействию и смешиванию конфигураций. Эти эффекты весьма сильно зависят от Z , причем эта зависимость различна для атомов с основной конфигурацией ns , ns^2 и np^k .

Для атомов с основной электронной конфигурацией np^k представляют интерес или переходы между компонентами тонкой структуры основного терма, например переходы $np^2 P_{1/2} - np^2 P_{3/2}$, $np^5 {}^2P_{3/2} - np^5 {}^2P_{1/2}$, $np^2 {}^3P_0 - np^2 {}^3P_1$ и т. п., или переходы между термами основной электронной конфигурации, например, $np^3 {}^4S_{3/2} - np^3 {}^2D_{3/2, 5/2}$. Для переходов первого типа $M \sim \mu_B$. В случае переходов второго типа для $Z \gtrsim 40$ вследствие сильного спин-орбитального взаимодействия, смешивающего различные SL термы (S — полный спин, L — полный орбитальный момент) $M \sim (0,1-1) \mu_B$ ¹⁶. Именно такова ситуация для рассмотренного ниже атома висмута.

Для щелочноземельных и щелочных элементов интерес представляют запрещенные $s - s$ переходы с изменением главного квантового числа: $ns^2 {}^1S_0 \rightarrow nsn's {}^3S_1$ и $ns_{1/2} \rightarrow (n+1)s_{1/2}$.

В случае щелочноземельных атомов (переходы $ns^2 {}^1S_0 - nsn's {}^3S_1$) запрет снимается совместным влиянием эффектов взаимодействия конфигураций ns^2 , ns , $n's$ с конфигурацией pp - и спин-орбитальными взаимодействием. Взаимодействие конфигураций приводит к смешиванию атомных

*) Детальный вывод выражения для оператора магнитного диполя для гелия и гелиеподобных ионов содержится в работах^{13, 14}. Однако обобщение этого выражения на щелочноземельные атомы требует также учета обменного взаимодействия с внутренними заполненными оболочками.

состояний типа

$$\begin{aligned}\tilde{\Psi}(ns^2\ ^1S_0) &= a\Psi(ns^2\ ^1S_0) + b\Psi(n_1pn'_1p\ ^1S_0), \\ \tilde{\Psi}(nsn's\ ^3S_1) &= a'\Psi(nsn's\ ^3S_1) + b'\Psi(n_1pn'_1p\ ^3S_1).\end{aligned}\quad (3.5)$$

Взятый по таким функциям матричный элемент перехода M по-прежнему равен нулю, поскольку магнитно-дипольный переход даже при одинаковых главных квантовых числах возможен лишь между состояниями с одинаковыми спинами. Спин-орбитальное взаимодействие в конфигурации pp в свою очередь смешивает термы 1S_0 и 3P_0 , 3S_1 и 3P_1 :

$$\begin{aligned}\tilde{\Psi}(n_1pn'_1p\ ^1S_0) &= \gamma\Psi(n_1pn'_1p\ ^1S_0) + \delta\Psi(n_1pn'_1p\ ^3P_0), \\ \tilde{\Psi}(n_1pn'_1p\ ^3S_1) &= \gamma'\Psi(n_1pn'_1p\ ^3S_1) + \delta'\Psi(n_1pn'_1p\ ^3P_1).\end{aligned}\quad (3.6)$$

В результате

$$M = bb'\delta\delta'(^3P_0 \parallel M \parallel ^3P_1) \approx bb'\delta\delta'\mu_B. \quad (3.7)$$

Величина коэффициента δ быстро ($\propto Z^2$) растет с ростом Z и при $Z \approx 40-50$ достигает значений $\sim 0,1-0,3$ ^{12,17}. Достаточно надежная оценка коэффициентов b, b' в (3.6) требует специальных численных расчетов, так как

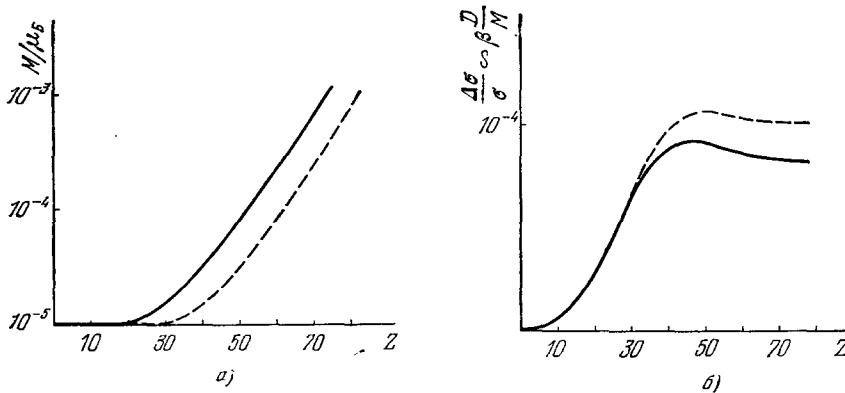


Рис. 1. а) Зависимость матричного элемента магнитно-дипольного перехода M от заряда ядра Z (сплошная линия — переход $ns^2\ ^1S_0 \rightarrow ns(n+1)s\ ^3S_1$ в щелочно-земельных атомах, штриховая — переход $ns^2\ ^1S_0 \rightarrow ns(n+1)s\ ^3S_1$ в щелочных атомах); б) зависимость относительной разности сечений $\Delta\sigma/\sigma$ от заряда ядра Z (сплошная и штриховая линии отвечают, как и на рис. 1, а, переходам $ns^2\ ^1S_0 \rightarrow ns(n+1)s\ ^3S_1$ и $ns^2\ ^1S_0 \rightarrow ns(n+1)s\ ^3S_1$ соответственно).

на самом деле в (3.5) эффективно примешивается не одно ближайшее состояние pp , а большое число таких состояний, как дискретного, так и непрерывного спектра. Согласно¹⁸ во всем ряду атомов с основной конфигурацией ns^2 от бериллия до ртути суммарный коэффициент примеси всех pp - и p^2 -состояний равен $0,2-0,35$ без какой-либо регулярной зависимости от Z . Естественнo принять, что вклад ближайших конфигураций pp , для которых δ наиболее велико, составляет не менее $0,1$. Поэтому множитель $bb'\delta\delta'$ быстро растет от значений 10^{-4} при $Z \approx 40$ до значений 10^{-2} для самых больших Z .

Для щелочных атомов, т. е. для атомов с основной конфигурацией ns , ситуация примерно такая же. Здесь, однако, к конфигурации p^6ns примешиваются конфигурации $p^5npr's$ (см.⁸), соответствующие возбуждению замкнутой оболочки p^6 . Поэтому коэффициенты b могут быть несколько меньше, чем в случае смешивания конфигураций $ns^2 - prn'p$. Примерный вид зависимости $M(Z)$ для переходов $ns_{1/2} \rightarrow (n+1)s_{1/2}$ в щелочных атомах и переходов $ns^2\ ^1S_0 \rightarrow ns(n+1)s\ ^3S_1$ в щелочноземельных атомах показан на рис. 1.

в) З а в и с и м о с т ь о т Z в е л и ч и н $\Delta\sigma/\sigma$ и $\text{Re}(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)$

Матричные элементы D для нейтральных атомов практически не зависят от Z , поэтому зависимость от Z величины $\Delta\sigma/\sigma \propto \beta D/M$ определяется видом $\beta(Z)$ и $M(Z)$. Примерная зависимость $\Delta\sigma/\sigma$ от Z для переходов $ns_{1/2} - (n+1)s_{1/2}$ в щелочных атомах и переходов $ns^2\ ^1S_0 - ns(n+1)s\ ^3S_1$ в щелочноземельных атомах показана на рис. 1, б. Сначала $\Delta\sigma/\sigma$ быстро растет с ростом Z , так же как и $\beta(Z)$; затем этот рост насыщается, так как начинает проявляться зависимость $M \propto Z^4$ при больших Z .

Из всего сказанного выше следует, что наибольшие значения $\Delta\sigma/\sigma$ в рассматриваемых сильно запрещенных переходах реализуются при $Z > 30-40$. Для таких переходов, однако, матричные элементы M , которыми определяются сами сечения поглощения σ очень малы, $\sim 10^{-4} \mu_B$. Поэтому пытаться увеличить $\Delta\sigma/\sigma$ за счет дальнейшего уменьшения M вряд ли целесообразно. В принципе можно указать переходы, для которых $M < 10^{-5} \mu_B$, например переходы из основного состояния $ns_{1/2}$ в сильно возбужденное состояние $n's_{1/2}$. Однако зарегистрировать поглощение на таких переходах практически невозможно, так как оно будет перекрываться поглощением в крыле разрешенного перехода $ns_{1/2} - n'p_{1/2, 3/2}$.

Для экспериментов по измерению $\text{Re}(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)$ наиболее пригодны самые тяжелые из атомов с конфигурациями np^h , для которых имеется целый ряд переходов в видимой и ближней инфракрасной области спектра с $M \sim (10^{-2} - 1) \mu_B$, что было впервые отмечено в работе ⁹.

г) Р е з у л ь т а т ы р а с ч е т о в

В таблице приводятся характеристики ряда переходов в атомах с основными конфигурациями ns , ns^2 , np , np^2 , np^5 , а также результаты выполненных расчетов параметра $\Delta\sigma/\sigma = \Delta W/W$. Проведение этих расчетов основывается на весьма разнообразной спектроскопической информации об атомах и конкретных переходах. Соответствующие сведения вместе с обоснованием используемых приближений даются в приложении III. Приведенная в таблице вероятность магнитно-дипольного перехода W вычисляется по формуле

$$W = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \frac{1}{g_f} \left(\frac{e\hbar}{2mc} \right)^2 s_m,$$

где g_f — статистический вес верхнего состояния, s_m — также приведенная в таблице сила линии, выраженная в магнетонах Бора: $|(i \| M \| f)|^2 = S_m = s_m (e\hbar/2mc)^2$. Эта вероятность соответствует суммарной вероятности перехода из произвольного сверхтонкого подуровня верхнего состояния на все сверхтонкие подуровни нижнего состояния. Интересующее нас сечение поглощения для магнитно-дипольного перехода с примесью электрического дипольного на частоте ω равно

$$\sigma_{\pm}(\omega) = \left(1 \pm \frac{1}{2} \frac{\Delta W}{W} \right) \sigma(\omega); \quad (3.8)$$

здесь $\sigma(\omega)$ — сечение магнитно-дипольного перехода, учитывающее наличие сверхтонкой и изотропической структуры линии, а также доплеровское и ударное уширение. Таким образом, отношение $\Delta\sigma(\omega)/\sigma(\omega) = \Delta W/W$ и не зависит от факторов, уширяющих и расщепляющих линию *).

*) В случае, если одновременно с магнитно-дипольным переходом имеется также электрический квадрупольный переход, соотношение (3.8) теряет силу.

Элемент	Переход	ν , см ⁻¹	λ , мкм	s_m	W , сек ⁻¹	σ , см ²	$\Delta\sigma/\sigma = \Delta W/W$
Конфигурация ns							62
Rb ³⁷ ₈₅	$6s_{1/2} \rightarrow 5s_{1/2}$	20 133,6	0,496 682	10 ⁻⁸	$1,1 \cdot 10^{-6}$	$6,9 \cdot 10^{-26}$	$1,13 \cdot 10^{-4}$
Cs ⁵⁵ ₃₃	$7s_{1/2} \rightarrow 6s_{1/2}$	18 535,51	0,539 505	10 ⁻⁸	$8,6 \cdot 10^{-7}$	$9,6 \cdot 10^{-26}$	$5,7 \cdot 10^{-4}$
Конфигурация ns^2							
Sr ³⁸ ₈₈	$5s6s^3S_1 \rightarrow 5s^2\ ^1S_0$	29 038,795	0,344 366	10 ⁻⁸	$2,22 \cdot 10^{-6}$	$1,41 \cdot 10^{-25}$	$3,0 \cdot 10^{-4}$
Ba ⁵⁶ ₁₃₇	$6s7s^3S_1 \rightarrow 6s^2\ ^1S_0$	26 160,284	0,382 259	10 ⁻⁵	$1,6 \cdot 10^{-3}$	$1,74 \cdot 10^{-22}$	$1,8 \cdot 10^{-5}$
Hg ⁸⁰ ₂₀₀	$6s7s^3S_1 \rightarrow 6s^2\ ^1S_0$	62 350,456	0,160 384	10 ⁻⁵	$6,7 \cdot 10^{-2}$	$6,5 \cdot 10^{-22}$	$1,7 \cdot 10^{-5}$
Конфигурация np^k							
I ⁵³ ₁₂₇	$5p^5\ ^2P_{1/2} \rightarrow 5p^5\ ^2P_{3/2}$	7 603,15	1,315 244	4/3	8	$5,6 \cdot 10^{-18}$	$1 \cdot 10^{-8}$
Tl ⁸¹ ₂₀₄	$6p\ ^2P_{3/2} \rightarrow 6p^2\ ^1P_{1/2}$	7 792,7	1,283 26	4/3	4,33	$1,4 \cdot 10^{-17}$	$2,6 \cdot 10^{-7}$
Pb ⁸² ₂₀₇	$6p^2\ ^3P_1 \rightarrow 6p^2\ ^3P_0$	7 819,85	1,278 879	2	8,6	$4,3 \cdot 10^{-17}$	10^{-6}
Bi ⁸³ ₂₀₉	$6p^3\ ^2P_{1/2} \rightarrow 6p^3\ ^4S_{3/2}$	21 661,0	0,461 659	0,4	56	$2,25 \cdot 10^{-18}$	$1 \cdot 10^{-6}$
	$6p^3\ ^2P_{3/2} \rightarrow 6p^3\ ^4S_{3/2}$	33 164,84	0,301 524 14	0,035	8,74	$0,2 \cdot 10^{-18}$	
	$6p^3\ ^2D_{3/2} \rightarrow 6p^3\ ^4S_{3/2}$	11 419,03	0,875 731 1	1,65	16,7	$9,0 \cdot 10^{-18}$	
	$6p^3\ ^2D_{5/2} \rightarrow 6p^3\ ^4S_{3/2}$	15 437,66	0,647 766	0,35	5,8	$1,3 \cdot 10^{-18}$	

При вычислении сечения σ , приведенного в таблице, сверхтонкая и изотопическая структуры не учитывались, что приводит к завышению вычисленного сечения по сравнению с сечением в максимуме наиболее интенсивной сверхтонкой компоненты в 1,5—2 раза. Приведенная в таблице величина σ вычислена для центра доплеровски уширенной линии по формуле

$$\sigma = \frac{1}{8\pi \sqrt{2\pi}} \frac{W}{v^3} \sqrt{\frac{M}{kT}} \frac{g_f}{g_i}$$

(где M — масса атома) при температуре $T = 1000^\circ \text{К}$. Для иода, таллия, свинца и висмута магнитно-дипольный переход разрешен, и сила линии s_m вычисляется точно *). В атомах рубидия, стронция, цезия, бария и ртути сила линии s_m была оценена весьма приближенно с учетом эффектов взаимодействия конфигураций. Очень желательны экспериментальные измерения сил линий этих переходов, которые могут изменить величину приведенного в таблице эффекта $\Delta\sigma/\sigma$ в число раз, равное $\sqrt{s_m^{\text{табл}}/s_m^{\text{эксп}}}$.

4. ВОЗМОЖНЫЕ СХЕМЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

а) Измерение различия сечений поглощения σ_+ — σ_-

Как видно из таблицы, максимальные значения $\Delta\sigma/\sigma$ соответствуют очень малым $\sigma \sim 10^{-25} \text{ см}^2$, когда непосредственное наблюдение поглощения затруднено: доля поглощенных фотонов при плотности $N \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и длине кюветы $L \sim 10 \text{ см}$ составляет $N\sigma L \sim 10^{-4}$. В работе ⁵ было предложено измерять величины σ_+ , σ_- , регистрируя число актов поглощения по излучению возбужденных атомов при разрешенном переходе на нижележащий уровень противоположной четности. Для щелочных атомов — это поглощение на переходе $ns \rightarrow n's$ и последующее излучение на переходе $n's \rightarrow np$; для щелочноземельных — поглощение на переходе $ns^2 {}^1S_0 \rightarrow nsn's {}^3S_1$ и излучение на переходе $nsn's {}^3S_1 \rightarrow nsnr {}^3P_1$. Рассмотрим требования, предъявляемые к точности измерений в этом эксперименте. Пусть I_1 и I_2 — потоки фотонов преимущественно правой и левой поляризаций соответственно, причем состояния поляризаций заданы с точностью x_1 и x_2 , т. е. в первом пучке есть небольшая примесь x_1 левополяризованного света, а во втором — примесь x_2 правополяризованного света, $x_1, x_2 \ll 1$. Обозначая через I'_1 и I'_2 измеряемые потоки фотонов на разрешенном переходе $I'_1 = I_1 N \sigma_+ L$, $I'_2 = I_2 N \sigma_- L$, для интересующего нас эффекта получим

$$\frac{\sigma_+ - \sigma_-}{\sigma_0} = \left(\frac{I'_1 - I'_2}{I'_1} - \frac{I_1 - I_2}{I_1} \right) (1 - x_1 - x_2)^{-1}. \quad (4.1)$$

Из (4.1) видно, что требования, предъявляемые к чистоте поляризаций пучков, невелики: вполне достаточно иметь $x_1, x_2 \ll 10^{-2}$, что не вызывает затруднений. Поэтому чувствительность метода по отношению к измерению малых величин $(\sigma_+ - \sigma_-)/\sigma$ определяется той точностью, с которой могут быть измерены $(I_1 - I_2)/I_1$ и $(I'_1 - I'_2)/I'_1$.

Возможны два варианта опыта: 1) поочередное включение пучков I_1, I_2 и 2) одновременная экспозиция двух различных участков объема кюветы.

В первом случае необходим контроль частоты возбуждающего излучения, поскольку уходы частоты на величину $\delta\omega$ от центра линии приводят к уменьшению сечения поглощения на величину $\Delta\sigma = (\delta\omega/\Delta\omega_D)^2 \sigma$, где $\Delta\omega_D$ — доплеровская ширина линии. Поэтому необходимо, чтобы

*) По поводу вычисления s_m в случае висмута см. ^{16, 17}.

$\delta\omega \ll \Delta\omega_D \sqrt{\Delta\sigma/\sigma}$. Расщепление из-за магнитного поля также не должно превышать величину $\Delta\omega_D \sqrt{\Delta\sigma/\sigma}$, что приводит к требованию $H \ll \ll 10^2 \sqrt{\Delta\sigma/\sigma}$ э.

Во втором случае допустимы большие флуктуации $\delta\omega$. Если эти флуктуации действительно велики, то требования на устранение магнитных полей становятся более жесткими: $H \ll 10^2 (\Delta\omega_D/\delta\omega) (\Delta\sigma/\sigma)$ э.

Требования на допустимую величину случайных электрических полей не вызывают серьезных затруднений (см. ⁵).

Оценим типичные значения измеряемых потоков I'_1, I'_2 . Будем считать, что при выбранном значении N ударная ширина не превышает $\Delta\omega_D$. При этом вероятность тушения возбужденного состояния существенно меньше вероятности разрешенного оптического перехода. Поэтому выход фотонов люминесценции равен $Q \approx I\sigma N$ и $I' \approx I\sigma NL$, где L — линейный размер экспонируемого объема. При $N \approx 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $\sigma \approx 10^{-25} \text{ см}^2$, что соответствует минимальному значению σ в таблице, $Q \approx 10^{-7} I$. Если в качестве источника возбуждения использовать непрерывный лазер, то надо ориентироваться на потоки $I \sim 10^{17} \text{ см}^{-2} \text{ сек}^{-1}$ (мощность лазера $\sim 10^{-2} \text{ вт}$ при диаметре пучка $\sim 1 \text{ см}$). При этом $Q \sim 10^{10} \text{ фотонов/см}^3 \text{ сек}$. В случае импульсного лазера можно рассчитывать на импульсы возбуждающего света порядка 10^{16} — 10^{18} фотонов (энергия 10^{-3} — 10^{-1} дж) и импульсы люминесценции порядка 10^9 — 10^{11} фотонов. В обоих случаях выход люминесценции достаточно велик.

Концентрация паров щелочных и щелочноземельных атомов $N \sim \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ может быть получена лишь при сравнительно высоких температурах $T \sim 700$ — 1500°К . При таких температурах необходимо считаться с возможностью появления теплового излучения исследуемого газа на частоте люминесценции. Для оценки роли этого эффекта достаточно сравнить тепловую населенность возбужденного уровня $N_2 = Ne^{-\hbar\omega/kT}$ с заселенностью $\Delta N = I\sigma\tau N$, образующейся при стационарном поглощении квантов из падающего потока I квантов/см² сек; τ — радиационное время жизни возбужденного уровня, $\tau \sim 10^{-7} \text{ сек}$. Приведем оценки $\Delta N/N_2$, соответствующие температуре, при которой плотность насыщающих паров достигает значения $N \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$: рубидий — $T \approx 800^\circ \text{К}$, $\Delta N/N_2 = 5 \cdot 10^{-16} I$; цезий — $T \approx 670^\circ \text{К}$, $\Delta N/N_2 = 2 \cdot 10^{-15} I$; стронций — $T \approx 1370^\circ \text{К}$, $\Delta N/N_2 \approx 3 \cdot 10^{-19} I$; барий — $T \approx 1570^\circ \text{К}$, $\Delta N/N_2 \approx 5 \cdot 10^{-19} I$; ртуть — $T \approx 530^\circ \text{К}$, $\Delta N/N_2 \approx 10^{46} I$. Таким образом, в случае непрерывного лазера с $I \sim 10^{17} \text{ квантов/см}^2 \text{ сек}$ тепловой фон не превышает величины полезного сигнала для ртути, цезия и, по-видимому, рубидия. В случае импульсного лазера с $I \sim 10^{23} \text{ квантов/см}^2 \text{ сек}$ полезный сигнал больше или порядка теплового фона для всех рассмотренных элементов с запрещенным магнитно-дипольным переходом. Существенные трудности может вызвать также тепловое излучение стенок и окон кюветы.

Для регистрации различия в числе актов возбуждения право- и левополяризованным светом не обязательно использовать излучение возбуждаемых атомов на разрешенном переходе; в принципе возможны и другие методы. Например, различие в σ_+ , σ_- приводит к различию в заселенностях $\pm m$ -компонент возбужденного уровня N_+ , N_- и, следовательно, к различию в магнитных моментах $N_+\mu_B$, $N_-\mu_B$, создаваемых при облучении газа световыми потоками I_+ , I_- . При регистрации $N_+\mu_B$ и $N_-\mu_B$ наиболее удобно использовать переход $ns^2\ ^1S_0 - nsn's\ ^3S_1$, так как в основном состоянии момент атома равен нулю и тепловые флуктуации магнитного момента малы. Они определяются только тепловыми флуктуациями заселенностей m -компонент возбужденного уровня.

б) Вращение плоскости поляризации

Как уже упоминалось в гл. 2, различие в сечениях поглощения σ_+ , σ_- в силу соотношений Крамерса — Кронига приводит к различию вещественных частей: $\text{Re}(\epsilon_+ - \epsilon_-) \neq 0$. Это различие может быть измерено по углу поворота плоскости поляризации θ при прохождении света через кювету с исследуемым газом длиной L ,

$$\theta = \frac{1}{4} \frac{\omega_0}{c} L \text{Re}(\epsilon_+ - \epsilon_-). \quad (4.2)$$

Как было показано в работе⁹, для этого наиболее подходят переходы с $M \sim \mu_B$, т. е. элементы с основной конфигурацией np^k . В области частот, близких к частоте рассматриваемого магнитно-дипольного перехода, $\epsilon(\omega)$ определяется сверткой доплеровского и лоренцевского контуров

$$\epsilon_{\pm}(\omega) = 1 + N\sigma \frac{c}{\omega_0} \left(1 \pm \frac{1}{2} \frac{\sigma_+ - \sigma_-}{\sigma_0}\right) \frac{1}{\pi} \int \frac{\exp\{-(\omega' - \omega_0)/\Delta\omega_D\}^2}{\omega' - \omega - i\gamma} d\omega', \quad (4.3)$$

где γ — ударная ширина. В центре линии вращение отсутствует. При $\gamma \ll \Delta\omega_D$ максимум величины $\text{Re}(\epsilon_+ - \epsilon_-)$ достигается при $|\omega - \omega_0| = 0,93\Delta\omega_D$ (см. таблицы в¹⁹). В этой точке контура угол θ и ослабление пучка $\exp(-\kappa L)$ равны

$$\theta = -0,61 N\sigma_0 L \frac{\sigma_+ - \sigma_-}{\sigma_0} \frac{\omega - \omega_0}{|\omega - \omega_0|}, \quad (4.4a)$$

$$\exp(-\kappa L) = \exp(-0,41 N\sigma_0 L), \quad (4.4b)$$

где $\kappa = (\omega/c) \text{Im} \epsilon$ — коэффициент поглощения. Из формулы (4.4) видно, что для заданной величины $(\sigma_+ - \sigma_-)/\sigma_0$ угол поворота пропорционален величине $N\sigma_0 L$, которая определяет также поглощение на длине L . По-видимому, нереально проводить измерения при поглощении, более сильном чем $e^{-10} \approx 4,5 \cdot 10^{-5}$. Для атомов с конфигурацией np^k $\Delta\sigma/\sigma \lesssim 10^{-6}$ (см. таблицу) и $|\theta| \lesssim 7(\sigma_+ - \sigma_-)/\sigma_0 \sim 7 \cdot 10^{-6}$. Обнаружение столь малого угла поворота представляется чрезвычайно трудной задачей.

Поглощение e^{-10} соответствует величине $N\sigma_0 L = 25$, что при сечении $\sigma_0 \approx 10^{-17} \text{ см}^2$ (см. таблицу) легко достигается для концентраций $N = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и $\sigma_0 = 2,5 \text{ см}$. Поскольку длина $L = 2,5 \text{ см}$ может быть значительно увеличена (вплоть до $L \approx 10^2 \text{ см}$), можно попытаться увеличить угол поворота, увеличив параметр $N\sigma_0 L$, а от поглощения избавиться частотной отстройкой в крыло линии, поскольку в крыле поглощение спадает быстрее дисперсии.

Поглощение и вращение плоскости поляризации в крыле определяют дисперсионным контуром линии с однородной шириной γ . Величина γ в нейтральных газах обусловлена ударным механизмом уширения за счет взаимодействия Ван-дер-Ваальса и пропорциональна плотности. Уширение Ван-дер-Ваальса слабо зависит от конкретного рода атомов и температуры газа; обычно ширина γ сравнивается с доплеровской шириной линии $\Delta\omega_D$ при $N \approx 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Поэтому в грубых оценках можно положить $\gamma \approx \Delta\omega_D N \cdot 10^{-18}$.

В дисперсионном крыле линии

$$\theta = \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{\pi}} N\sigma_0 L \frac{\sigma_+ - \sigma_-}{\sigma_0} \frac{\Delta\omega_D}{\omega - \omega_0}, \quad (4.5)$$

$$\kappa L = \frac{1}{\sqrt{\pi}} N\sigma_0 L \frac{\gamma}{\Delta\omega_D} \frac{\Delta\omega_D^2}{(\omega - \omega_0)^2}, \quad \gamma \propto N. \quad (4.6)$$

Задаваясь снова предельным поглощением $\exp(-\kappa L) = e^{-10}$, можно выбрать оптимальную отстройку от резонанса

$$|\omega - \omega_0| = \Delta\omega_D \sqrt{\frac{N\sigma_0}{\sqrt{\pi}\kappa} \frac{\gamma}{\Delta\omega_D}} \approx \Delta\omega \sqrt{\frac{N\sigma_0 L}{10\sqrt{\pi}} \frac{\gamma}{\Delta\omega_D}}. \quad (4.7)$$

При таком выборе $|\omega - \omega_0|$ и выполнении условия

$$\frac{N\sigma_0 L}{10\sqrt{\pi}} \frac{\gamma}{\Delta\omega_D} \gg 1, \quad (4.8)$$

которое обеспечивает неравенство $|\omega - \omega_0| \gg \Delta\omega_D$, для угла θ получим

$$\theta = \frac{1}{8\pi^{1/4}} \sqrt{10N\sigma_0 L \frac{\Delta\omega_D}{\gamma} \frac{\sigma_+ - \sigma_-}{\sigma_0}}. \quad (4.9)$$

Поскольку величина γ пропорциональна плотности, угол θ из (4.9) не зависит от N . Далее, поскольку $(\sigma_+ - \sigma_-)/\sigma_0 \sim \beta D/M$, а $\sigma_0 \propto M^2$, угол θ не зависит также от M . Напомним, что речь идет о достаточно больших $M \sim \mu_B$, когда $N\sigma_0 L \gg 1$ ($\sigma_0 > 10^{-20}$, $M > 2 \cdot 10^{-2} \mu_B$). Таким образом, при выборе конкретных переходов необходимо обеспечить максимально возможные значения βD . Подставляя в (4.9) типичные значения параметров (см. таблицу) $\sigma = 10^{-17} \text{ см}^2$, $\Delta\sigma/\sigma = 2 \cdot 10^{-6}$, $N = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (при этом $\gamma \approx \Delta\omega_D$), $L = 100 \text{ см}$, получим $\theta \approx 0,25 \cdot 10^{-4}$. Необходимая частотная отстройка в данном случае равна $|\omega - \omega_0| = 10\gamma = 10\Delta\omega_D$.

Рассмотренный пример показывает масштаб того эффекта поворота плоскости поляризации, которого можно ожидать в оптимальных условиях эксперимента. Измеряемый в реальном эксперименте угол θ в общем случае содержит еще вклад неустраненного магнитного поля. Искомый эффект может быть выделен по его зависимости от величины и знака $(\omega - \omega_0)$. Тепловое излучение газа и кюветы в данном случае несущественно. Яркость излучения одностороннего лазера настолько велика, что даже после значительного ослабления в кювете эффективная температура пучка намного больше температуры газа.

в) Р а с ш е щ е н и е м о д о п т и ч е с к о г о р е з о н а т о р а

Можно предположить еще один возможный способ обнаружения различия в $\text{Re } \epsilon_+$, $\text{Re } \epsilon_-$. Благодаря развитию лазерной техники в настоящее время имеется реальная возможность контролировать собственную частоту моды оптического резонатора с точностью $\delta\omega \sim 10^{-4} \text{ Г}$ и даже лучшей (см., например, ²⁰), где Γ — ширина моды. Внесение внутрь резонатора кюветы с исследуемым газом должно привести к расщеплению частот право- и левополяризованных мод:

$$\omega_+ - \omega_- = \frac{1}{2} \omega \frac{L}{L_p} \text{Re } (\epsilon_+ - \epsilon_-), \quad (4.10)$$

где ω — соответствующая частота моды резонатора без кюветы; здесь L — длина кюветы, L_p — полная длина пути света в резонаторе. Используя опять частотную отстройку $|\omega - \omega_0| \gg \Delta\omega_D$ для уменьшения поглощения, получим

$$\omega_+ - \omega_- = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{c}{L_p} N\sigma_0 L \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} \frac{\Delta\omega_D}{\omega - \omega_0}. \quad (4.11)$$

Ширина моды резонатора без кюветы Γ определяется потерями на зеркалах и равна

$$\Gamma = \frac{c}{2L_p} \sum_i (1 - R_i), \quad (4.12)$$

где R_i — коэффициенты отражения зеркал. Конкретный выбор частотной отстройки определяется так, чтобы потери за счет поглощения в кювете не превосходили потерь на зеркалах

$$\kappa L = \frac{1}{\sqrt{\pi}} N \sigma_0 L - \frac{\gamma}{\Delta \omega_D} \frac{\Delta \omega_D^2}{(\omega - \omega_0)^2} \leq \sum_i (1 - R_i). \quad (4.13)$$

Оптимальная частотная отстройка равна

$$|\omega - \omega_0| = \Delta \omega_D \sqrt{\frac{N \sigma_0 L}{\sqrt{\pi} \sum_i (1 - R_i)} \frac{\gamma}{\Delta \omega_D}}. \quad (4.14)$$

Подставляя (4.14) в (4.11), находим

$$\frac{\omega_+ - \omega_-}{\Gamma} = \frac{1}{2\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{N \sigma_0 L}{\sum_i (1 - R_i)} \frac{\Delta \omega_D}{\gamma} \frac{\Delta \sigma}{\sigma}}; \quad (4.15)$$

здесь учтено, что при равенстве потерь в кювете и на зеркалах ширина Γ удваивается по сравнению с (4.12). Отметим, что величина эффекта (4.15) не зависит от N . Полагая опять $\sigma = 10^{-17} \text{ см}^2$, $\Delta \sigma / \sigma = 2 \cdot 10^{-6}$, $N = 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $L = 200 \text{ см}$ (двухкратный проход по метровой кювете), $\sum_i (1 - R_i) = 0,02$, из (4.14), (4.15) получим $|\omega - \omega_0| = 2,4 \cdot 10^2 \gamma \approx \approx 2,4 \cdot 10^2 \Delta \omega_D$, $(\omega_+ - \omega_-) / \Gamma \approx 2,4 \cdot 10^{-4}$.

При отражении световой волны от зеркала знак циркулярной поляризации меняется на обратный. С другой стороны, необходимо, чтобы

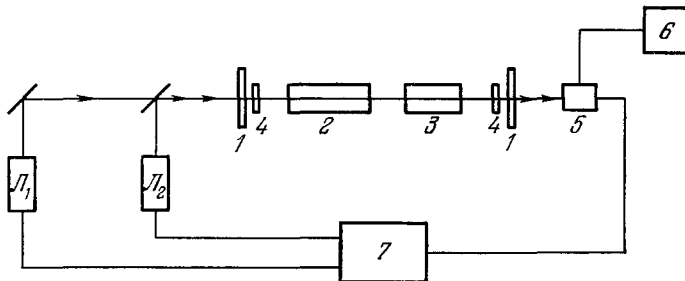


Рис. 2. Схема опыта по определению расщепления собственных частот интерферометра.

L_1, L_2 — лазеры с перестраиваемой частотой; 1 — зеркала интерферометра, 2 — кювета с исследуемым атомарным газом, 3 — кювета с оптически активным веществом, создающая дополнительное расщепление мод интерферометра, 4 — пластинки $\lambda/4$, 5 — фотодетектор, 6 — частотомер, 7 — следящая система, вырабатывающая сигнал обратной связи для подстройки частоты лазеров.

эффект несохранения четности накапливался при последовательных проходах света через кювету. Поэтому необходимо использовать или кольцевой резонатор бегущей волны, в котором между каждыми последующими проходами волна испытывает четное число отражений, или резонатор Фабри — Перо, в котором между кюветой и зеркалами установлены четвертьволновые пластинки. Во втором случае в результате двукратного прохождения четвертьволновой пластинки и отражения от зеркала волна также сохраняет поляризацию.

Схема рассматриваемого эксперимента состоит в следующем (рис. 2). Излучение лазера L_1 , поляризованное по левому кругу, и излучение лазера L_2 , поляризованное по правому кругу, одновременно пропускают через интерферометр, внутри которого помещена кювета с исследуемым

газом. Система автоподстройки вырабатывает сигналы обратной связи, которые подаются на пьезокерамику лазерных резонаторов, подстраивая длину резонаторов таким образом, чтобы частоты лазеров соответствовали максимумам полос пропускания интерферометров. Одновременно с фотодетектора подается на частотомер сигнал биений с частотой $\omega_+ - \omega_-$. Требования к чистоте состояния поляризации невелики — примерно такие же, как и в экспериментах по измерению $\Delta\sigma/\sigma$.

Можно несколько видоизменить схему эксперимента, если внести в резонатор дополнительную кювету с оптически активным веществом и, таким образом, создать дополнительное расщепление частот ω_+ , ω_- , превышающее Γ . При этом нет необходимости обеспечивать с большой точностью поляризацию лазерного излучения. Моды ω_+ , ω_- будут возбуждаться отдельно при совпадении частоты лазера с каждой из этих частот практически независимо от состояния поляризации лазерного излучения. Исследуемый газ теперь будет создавать небольшой сдвиг частот $\delta\omega_+$, $\delta\omega_-$, порядка того расщепления, которое ранее определялось выражением (4.15). Выделить эти сдвиги можно, используя их зависимость от плотности газа.

Какой из двух рассмотренных способов обнаружения различия в $\text{Re } \epsilon_+$, $\text{Re } \epsilon_-$ — по углу вращения плоскости поляризации или интерферометрический — имеет преимущество, будет зависеть от конкретных условий эксперимента. Трудности измерения углов поворота $\theta \sim 10^{-4} - 10^{-5}$ и привязки собственных частот интерферометра ω_+ , ω_- с точностью порядка $(10^{-4} - 10^{-5})$ Г, по-видимому, примерно одинаковы, хотя и несколько разного свойства.

Из проведенного рассмотрения видно, что основным препятствием к достижению больших эффектов, связанных с $\text{Re } (\epsilon_+ - \epsilon_-)$, является большое поглощение в исследуемом газе. В настоящее время существует принципиальная возможность преодолеть эту трудность. Эта возможность основана на так называемом явлении самоиндуцированной прозрачности (2 π -импульсы) и состоит в следующем (см., например, ²⁷). Импульс резонансного излучения, длительность которого τ много меньше всех времен релаксации среды, а амплитуда волны $H(t)$ удовлетворяет условию

$$\frac{M}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} H(t) dt = 2\pi, \quad (4.16)$$

где M — матричный элемент перехода, может распространяться в двухуровневой поглощающей среде без потерь. Известно, что реактивное резонансное взаимодействие, связанное в линейной оптике с действительной частью $\epsilon(\omega)$, здесь сохраняется. Так, например, в этом случае наблюдается аномально большое фарадеевское вращение плоскости поляризации в магнитном поле, описываемое практически теми же формулами, что и в линейной оптике. При малых интенсивностях световых потоков столь сильное вращение не наблюдалось из-за наличия сильного поглощения вблизи центра линии. Нетрудно показать, что смешивание состояний различной четности, так же как и присутствие магнитного поля, приведет к вращению плоскости поляризации 2 π -импульса. В принципе угол поворота здесь может быть сделан достаточно большим, поскольку длина кюветы может быть взята гораздо большей величины обратного коэффициента линейного поглощения. Отметим, однако, что до настоящего времени явление самоиндуцированной прозрачности наблюдалось лишь при не очень больших длинах кюветы, меньших или порядка десяти коэффициентов обратного поглощения. Отметим также, что для вращения плоскости поляризации, обусловленного несохранением четности, необходима частот-

ная отстройка $\Delta\omega \sim \Delta\omega_D$ от центра линии. Кроме того, для выполнения условия (4.16) необходимо использовать весьма мощный лазерный импульс, поскольку матричный элемент магнитно-дипольного перехода M примерно в 137 раз меньше матричного элемента электрического дипольного перехода ea_0 . Поэтому в настоящее время относительно эксперимента с 2π -импульсом трудно сделать какие-либо прогнозы.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для обсуждавшихся выше трех возможных схем измерения эффектов несохранения четности: 1) прямого измерения $\Delta\sigma/\sigma$, 2) измерения угла поворота плоскости поляризации θ и 3) измерения расщепления собственных частот интерферометра ω_+ , ω_- — требования, предъявляемые к лазерному источнику, существенно отличаются. Перечислим еще раз эти требования.

В первом эксперименте необходима точная настройка частоты лазера (в пределах $\Delta\omega_D$) на частоту рабочего перехода. Требования к состоянию поляризации лазерного пучка невысоки. Основные трудности связаны с необходимостью с высокой точностью контролировать интенсивность световых потоков.

Во втором и третьем случаях требуется значительно более грубая настройка лазера на определенную частоту ($\sim 10-100\Delta\omega_D$).

В третьем, интерферометрическом, эксперименте нет необходимости выдерживать с высокой точностью ни интенсивность, ни состояние поляризации лазера. Центр тяжести переносится на частотные измерения. Частота лазера должна быть плавно перестраиваемой, правда в довольно узкой области, порядка Г.

В эксперименте первого типа в принципе можно использовать как непрерывный, так и импульсный лазеры. При измерении угла поворота можно использовать как непрерывный, так и импульсный лазер, хотя, по-видимому, с непрерывным лазером работать значительно удобнее. Наконец, для привязки к собственным частотам интерферометра можно использовать только непрерывный лазер.

Общим для всех обсуждавшихся экспериментов является требование совпадения лазерной частоты с частотой рабочего перехода. В настоящее время перестройка частоты лазерного излучения в видимой области осуществляется с помощью генерации на красителях. В таких генераторах краситель, имеющий широкую полосу усиления ($\Delta\omega/\omega \sim 1/3$), накачивается другим лазером, непрерывным или импульсным. Перестройка частоты генерации на красителе осуществляется изменением параметров резонатора.

Единственным непрерывным источником накачки лазера на красителях является аргоновый ионный лазер (несколько линий в области $\lambda = 0,46-0,51$ мкм). При этом перестраиваемая частота генерации красителя перекрывает область $\lambda = 0,5-0,8$ мкм. Из перечисленных в таблице элементов в эту область длин волн попадают переходы в цезии, рубидии и висмуте. Что касается остальных рассмотренных переходов в видимой области спектра, то на них в настоящее время можно надеяться настроить только с помощью импульсных лазеров, перестраиваемых на красителях и, быть может, с последующим удвоением частоты при генерации второй гармоники. В качестве источников накачки здесь можно указать на азотный лазер, $\lambda = 0,3371$ мкм (см., например, ²¹) и лазер на парах меди, $\lambda = 0,5105$ мкм ²⁶.

В инфракрасной области настройка на частоту перехода в настоящее время представляется несколько более сложной задачей; в принципе

в этой области можно надеяться получить стабильное и перестраиваемое по частоте излучение с помощью полупроводникового лазера.

Проведенное выше рассмотрение показывает, что наблюдение в атомах эффектов несохранения четности, обусловленных нейтральными токами в слабом взаимодействии, является весьма заманчивой, хотя и трудной задачей. Современное состояние квантовой электроники позволяет надеяться на успех этого важнейшего опыта.

В заключение авторы выражают глубокую признательность И. Л. Бейгману и Е. А. Юкову за полезные обсуждения и помощь в расчетах, И. Б. Хриповичу за ценные замечания.

ПРИЛОЖЕНИЕ

I. ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНОГО ЭЛЕМЕНТА P-НЕЧЕТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Несохраняющую четность часть гамильтониана слабого взаимодействия электронов с ядром примем равной

$$V = -\frac{G\hbar^3}{c\sqrt{2}} Zq \frac{3}{4\pi r_0^3} \int \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_0 \psi dr; \quad (I.1)$$

здесь интегрирование биспинорных электронных функций $\psi, \bar{\psi}$ ведется по сферическому объему ядра с радиусом r_0 , при этом плотность слабого заряда считается равномерно распределенной по объему ядра $(4/3) \pi r_0^3$; Z — заряд атомного ядра, фактор q , следуя ⁵, принят равным

$$q = 1 - \frac{A}{2Z} - 2 \sin^2 \theta, \quad (I.2)$$

A — атомный вес элемента, $\sin^2 \theta = 0,35$, $q \approx -0,9$. В (I.1) пренебрегается электрон-электронной частью взаимодействия, поскольку взаимодействие электронов с ядром приводит к существенно большим эффектам.

В нерелятивистском приближении для точечного ядра ($r_0 = 0$) взаимодействие (I.1) принимает вид (I.1), приведенный во введении:

$$V = -\frac{G\hbar^3}{c^2 \sqrt{2}} Zq \frac{1}{2m} [(\sigma \mathbf{p}) \delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}) (\sigma \mathbf{p})]. \quad (I.3)$$

Рассмотрим сначала примешивание состояния $s_{1/2}$ к состоянию $p_{1/2}$ под действием нерелятивистского P-нечетного взаимодействия (I.3). Спинорные волновые функции состояний $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ с проекцией момента $j_z = 1/2$ имеют вид

$$\psi(s_{1/2}) = R_s(r) \begin{pmatrix} 1/\sqrt{4\pi} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi(p_{1/2}) = R_p(r) \begin{pmatrix} -(1/\sqrt{3}) Y_{10}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{2/3} Y_{1,1}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (I.4)$$

где $R_s, R_p(r)$ — радиальные части волновых функций, $Y_{10} = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$, $Y_{11} = -\sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{i\varphi}$ — шаровые функции *).

В матричный элемент взаимодействия $\langle s_{1/2} | V | p_{1/2} \rangle$ дает вклад только второе слагаемое из (I.3). В результате получаем

$$\langle s_{1/2} | V | p_{1/2} \rangle = -i \frac{3}{8\pi \sqrt{2}} \frac{G\hbar^4}{mc^2} Zq R_s^*(0) \left(\frac{R_p}{r} \right)_{r \rightarrow 0}. \quad (I.5)$$

Перейдем к вычислению матричного элемента релятивистского гамильтониана возмущения (I.4). Вводя верхние и нижние компоненты биспинора $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$, функции $\psi(s_{1/2})$ и $\psi(p_{1/2})$ запишем в виде

$$\psi(s_{1/2}) = \begin{pmatrix} f_s(r) \begin{pmatrix} 1/\sqrt{4\pi} \\ 0 \end{pmatrix} \\ ig_s(r) \begin{pmatrix} -\sqrt{1/3} Y_{10} \\ \sqrt{2/3} Y_{11} \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad \psi(p_{1/2}) = \begin{pmatrix} f_p(r) \begin{pmatrix} -\sqrt{1/3} Y_{1,0} \\ \sqrt{2/3} Y_{1,1} \end{pmatrix} \\ -ig_p(r) \begin{pmatrix} 1/\sqrt{4\pi} \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \quad (I.6)$$

*) Фазы шаровых функций выбраны, как в ¹².

Подставляя $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ в (I.4) и учитывая (I.6), получим

$$\begin{aligned} \langle s_{1/2} | V | p_{1/2} \rangle &= i \frac{G\hbar^3}{c\sqrt{2}} Zq \frac{3}{4\pi r_0^3} \int d^3r [\varphi^+(s_{1/2}) \chi(p_{1/2}) + \chi^+(s_{1/2}) \varphi(p_{1/2})] = \\ &= -i \frac{G\hbar^3}{c\sqrt{2}} Zq \frac{3}{4\pi r_0^3} \int_0^{r_0} r^2 dr (f_s^*(r) g_p(r) - g_s^*(r) f_p(r)). \end{aligned} \quad (I.7)$$

Таким образом, для вычисления матричного элемента (I.7) необходимо найти релятивистские радиальные функции внутри ядра ($r \leq r_0$). Уравнение Дирака для функций f и g принимает вид

$$\frac{d}{dr} (rf_\kappa) + \frac{\kappa}{r} (rf_\kappa) = \frac{1}{\hbar c} (\varepsilon + 2mc^2 - U(r)) (rg_\kappa), \quad (I.8a)$$

$$\frac{d}{dr} (rg_\kappa) - \frac{\kappa}{r} (rg_\kappa) = -\frac{1}{\hbar c} (\varepsilon - U(r)) (rf_\kappa). \quad (I.8b)$$

Здесь ε — собственное значение энергии (за вычетом энергии mc^2), $U(r)$ — потенциал взаимодействия электронов с ядром и самосогласованным полем остальных электронов атома, $\kappa = -1$ для состояния $s_{1/2}$ и $\kappa = 1$ для состояния $p_{1/2}$. Аналогично тому, как это делается в задаче об изотопическом смещении атомных термов ¹², ²⁸, ²⁹, значения функций f_κ и g_κ внутри ядра можно выразить через параметры формального решения нерелятивистской задачи $R_s(0)$ и $(Rp(r)/r)_{r \rightarrow 0}$. Приведем соответствующие вычисления.

При $r < r_0$ потенциал $|U(r)| \sim Ze^2/r_0 \gg mc^2$. Коэффициент в правой части уравнений (I.8) $U(r)/\hbar c$ меньше центробежного коэффициента κ/r : $|rU(r)/\hbar c| \leq Z\alpha < 1$. Поэтому при решении системы (I.8) в области $r < r_0$ правая часть может быть учтена как возмущение. Вводя новые функции

$$(rf_\kappa) = F_\kappa(r) r^{-\kappa}, \quad (rg_\kappa) = G_\kappa(r) r^{+\kappa}, \quad (I.9)$$

можно формально проинтегрировать систему (I.8):

$$F_\kappa(r) = F_\kappa(0) + \frac{1}{\hbar c} \int_0^r dr' (r')^{2\kappa} (\varepsilon + 2mc^2 - U(r')) G_\kappa(r'), \quad (I.10a)$$

$$G_\kappa(r) = G_\kappa(0) - \frac{1}{\hbar c} \int_0^r dr' (r')^{-2\kappa} (\varepsilon - U(r')) F_\kappa(r'). \quad (I.10b)$$

Из этих формул видно, что для состояния $s_{1/2}$ ($\kappa = -1$) $G_s(0) = 0$, так как в противном случае интеграл в правой части (I.10a) расходится. По аналогичным соображениям для состояния $p_{1/2}$ имеет место $F_p(0) = 0$. В результате для волновых функций с точностью до членов первого порядка по малому параметру αZ включительно имеем

$$\begin{aligned} rf_s &= F_s(0) r, & rg_s &= -F_s(0) Z\alpha \frac{r^2}{r_0} \xi_s(r), \\ rf_p &= G_p(0) Z\alpha \frac{r^2}{r_0} \xi_p(r), & rg_p &= G_p(0) r. \end{aligned} \quad (I.11)$$

Положительные функции $\xi_s(r)$, $\xi_p(r)$ со значениями ~ 1 определены равенствами

$$\begin{aligned} \xi_s(r) &= -\frac{1}{r^3} \frac{r_0}{Ze^2} \int_0^r U(r') dr', \\ \xi_p(r) &= -\frac{1}{r^3} \frac{r_0}{Ze^2} \int_0^r [U(r') - 2mc^2] (r')^2 dr'. \end{aligned} \quad (I.12)$$

Интересующий нас матричный элемент равен

$$\begin{aligned} \langle s_{1/2} | V | p_{1/2} \rangle &= -i \frac{G\hbar^3}{\sqrt{2}c} ZqF^*(0) G_p(0) \frac{3}{4\pi r_0^3} \int_0^{r_0} r^2 dr \left[1 + (Z\alpha)^2 \frac{r^2}{r_0^2} \xi_s(r) \xi_p(r) \right] \approx \\ &\approx -i \frac{G\hbar^3}{\sqrt{2}c} ZqF_s^*(0) G_p(0) \cdot \frac{1}{4\pi}. \end{aligned} \quad (I.13)$$

При записи второго из равенств (I.13) мы пренебрегли слагаемыми $\sim (Z\alpha)^2$ по сравнению со слагаемыми ~ 1 . На языке волновых функций это приближение соответствует подстановке в формулы (I.11) значений $g_s = 0$, $f_p = 0$ при $r < r_0$. Отметим, что величина сохраненных в формуле (I.13) слагаемых не зависит от вида электростатического потенциала внутри ядра.

Таким образом, для вычисления матричного элемента необходимо определить константы $F_s(0)$ и $G_p(0)$. Для этого нужно найти решения уравнения Дирака вне ядра (при $r > r_0$), которые при $r \rightarrow \infty$ переходят в нерелятивистские решения с нужными энергиями и нормировкой, а при $r = r_0$ удовлетворяют граничным условиям

$$\begin{aligned} f_s(r_0) &= F_s(0), & g_s(r_0) &= 0, \\ f_p(r_0) &= 0, & g_p(r_0) &= G_p(0). \end{aligned} \quad (I.14)$$

Вблизи ядра имеется довольно большая область, в которой можно пренебречь экранирующим влиянием атомного остатка и энергией связи ϵ . В этой области общее решение системы (I.8) имеет вид

$$\begin{aligned} (rf_\chi) &= G_\chi \left[(\gamma + \chi) J_{2\gamma} \left(\sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} \right) - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} J_{2\gamma-1} \left(\sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} \right) \right] + \\ &+ D_\chi \left[(\chi - \gamma) J_{-2\gamma} \left(\sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} \right) - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} J_{-2\gamma-1} \left(\sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} \right) \right], \end{aligned} \quad (I.15a)$$

$$(rg_\chi) = \alpha Z C_\chi J_{2\gamma} \left(\sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} \right) + \alpha Z D_\chi J_{-2\gamma} \left(\sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} \right), \quad (I.15b)$$

где C_χ , D_χ — постоянные, $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - (\alpha Z)^2}$, $a_0 = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус для водорода, J_ν — функция Бесселя. Приравнявая волновые функции (I.15) и (I.14) при $r = r_0$, можно найти выражения для C_χ и D_χ через $F_s(0)$ и $G_p(0)$, в частности

$$C_s = -\Gamma(2\gamma) r_0 \left(\frac{2Zr_0}{a_0} \right)^{-\gamma} F_s(0), \quad (I.16a)$$

$$C_p = \Gamma(2\gamma) \frac{r_0}{\alpha Z} \left(\frac{2Zr_0}{a_0} \right)^{-\gamma} (\gamma + 1) G_p(0). \quad (I.16b)$$

При нахождении коэффициентов C_χ , D_χ мы воспользовались малостью аргумента функций Бесселя $(2Zr_0/a_0)^{1/2} \lesssim 0,14$ при $Z \lesssim 80$ и $r_0 = 6 \cdot 10^{-13}$ см и сохранили лишь первые члены разложения по этому параметру. Из малости этого параметра следует также, что $D_\chi/C_\chi \sim (2Zr_0/a_0)^{2\gamma} \approx 0,01$.

Для нахождения C_s и C_p заметим, что существует область значений r , $\alpha^2 Z a_0 \lesssim r \lesssim a_0 Z^{-1/3}$, в которой, во-первых, решение становится нерелятивистским, а, во-вторых, все еще можно пренебречь энергией связи и экранирующим действием атомного остатка. Общее решение уравнения Шрёдингера с орбитальным моментом l в этой области имеет вид $\psi = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, где

$$R_l(r) = \tilde{C}_l \sqrt{\frac{2Z}{a_0 r}} J_{2l+1} \left(\sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} \right) + \tilde{B}_l \sqrt{\frac{2Z}{a_0 r}} N_{2l+1} \left(\sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} \right). \quad (I.17)$$

В решение (I.17) должны переходить функции f_χ из (I.15). Аргументы функций Бесселя в (I.15) и (I.17) совпадают, и в области $r \gtrsim \alpha^2 a_0 Z$ этот аргумент много больше единицы. Поэтому можно воспользоваться асимптотическим разложением всех фигурирующих в (I.15a) и в (I.17) функций Бесселя. При этом в (I.15a) можно оставить лишь член, пропорциональный $J_{2\gamma-1}$ (поскольку $D_\chi/C_\chi \approx 0,01$). Спивка амплитуд и фаз синусоидальных осцилляций решений (I.15a) и (I.17) дает

$$\tilde{C}_l = -C_\chi \cos[\pi(l - \gamma + 1)], \quad \tilde{B}_l \approx C_\chi \sin[\pi(l - \gamma + 1)]. \quad (I.18)$$

Формальное нерелятивистское решение задачи с точечным ядром соответствует случаю $\tilde{B}_l = 0$, в чем можно убедиться, устремляя в (I.17) $\alpha Z \rightarrow 0$. При этом параметры

$C_s = -\tilde{C}_s$ и $C_p = \tilde{C}_p$ определяют поведение нерелятивистских волновых функций в начале координат:

$$C_s = -\frac{1}{2} \frac{a_0}{Z} R_s(0), \quad C_p = \frac{3}{2} \frac{a_0^2}{Z^2} \left(\frac{R_p}{r} \right)_{r \rightarrow 0}. \quad (I.19)$$

Как видно из (I.17), (I.18) отношение $\tilde{B}_l/\tilde{C}_l = -\text{tg} [\pi(l - \gamma + 1)]$ определяет фазу синусоидальных осцилляций волновой функции и не зависит от общей нормировки волновой функции. Сшивка логарифмической производной функции (I.17) (которая зависит только от отношения \tilde{B}_l/\tilde{C}_l) с такой же производной решения уравнения Шрёдингера в области экранировки позволяет в принципе определить положение уровней энергии. Амплитуда синусоидальных осцилляций $\sqrt{\tilde{C}_l^2 + \tilde{B}_l^2}$ определяется нормировкой волновой функции. В нормировочный интеграл волновой функции оптического электрона вносит основной вклад область нерелятивистского движения в экранированном кулоновском потенциале. Поэтому амплитуда осцилляции волновой функции $|C_\kappa|$ практически не зависит от релятивистских поправок и поправок на конечный размер ядра, и вычисление C_κ можно проводить по формулам (I.19), которые были выписаны в предположении $\tilde{B}_l = 0$.

Объединение формул (I.13), (I.16a), (I.16b), (I.19) позволяет представить точный матричный элемент взаимодействия (I.1) в виде произведения нерелятивистского матричного элемента (I.5) на поправочный множитель $\lambda_{\text{рел}}$:

$$\langle s_{1/2} | V | p_{1/2} \rangle = \lambda_{\text{рел}} (-i) \frac{3}{8\pi} \frac{G\hbar^4}{\sqrt{2}} \frac{ZqR_s^*(0)}{mc^2} \left(\frac{R_p}{r} \right)_{r \rightarrow 0}, \quad (I.20)$$

$$\lambda_{\text{рел}} = \frac{2}{\Gamma^2(2\gamma)(\gamma+1)} \left(\frac{a_0}{2Zr_0} \right)^{2-2\gamma}. \quad (I.21a)$$

Напомним, что этот результат для релятивистской поправки $\lambda_{\text{рел}}$ получен в пренебрежении малыми добавками порядка $(\alpha Z)^2$. Для получения выражения для $\lambda_{\text{рел}}$ с относительной точностью до членов порядка $(\alpha Z)^2$ включительно нужно продолжить итерации по степеням αZ в формулах (I.11) и использовать получаемые волновые функции в формулах (I.13), (I.14), (I.16). Эти вычисления уже зависят от распределения электрического заряда в ядре и для постоянной плотности дают

$$\lambda'_{\text{рел}} = \frac{2}{\Gamma^2(2\gamma)(\gamma+1)} [1 + 0,577(\alpha Z)^2] \left(\frac{a_0}{2Zr_0} \right)^{2-2\gamma}. \quad (I.21b)$$

Это выражение интересно сравнить с формулой для $\lambda_{\text{рел}}$, полученной в работе Бухия⁵. В этой работе релятивистская поправка рассчитывалась для такой (формально выбранной) модели ядра, в которой весь электрический заряд сосредоточен в центре ядра, а весь слабый заряд — на поверхности сферического ядра с радиусом r_0 . Процедура вычисления в такой модели упрощается, так как используются релятивистские функции для точечного кулоновского центра, однако довольно трудно заранее оценить точность расчета. Выражение из работы⁵ для $\lambda_{\text{рел}}$ имеет вид

$$\lambda_{\text{рел}}^{\text{Б}} = \frac{1}{\Gamma^2(2\gamma)\gamma^2} \left(\frac{a_0}{2Zr_0} \right)^{2-2\gamma}. \quad (I.21в)$$

Погрешность формулы (I.21в) можно оценить, сравнивая с более точным выражением (I.21б):

$$\frac{\lambda_{\text{рел}}^{\text{Б}}}{\lambda'_{\text{рел}}} = 1 + 0,17(\alpha Z)^2. \quad (I.21г)$$

Последнее равенство выписано в пренебрежении членами порядка $(\alpha Z)^4$ и выше.

Перейдем к обсуждению параметров нерелятивистских ψ -функций $R_s(0)$ и $(R_p/r)_{r \rightarrow 0}$. Для s -состояния с главным квантовым числом n имеем¹²

$$|R_s(0)|^2 = 4\pi |\psi_s(0)|^2 = \frac{4Z_a^2 Z}{a_0^3 n_*^3} \left(1 + \left| \frac{\partial \Delta}{\partial n} \right| \right); \quad (I.22)$$

здесь Δ — квантовый дефект, $|\partial \Delta / \partial n| \ll 1$, $n_* = \sqrt{Ry/E_s}$ — эффективное главное квантовое число, $Ry = me^4/2\hbar^2$; для нейтральных атомов $Z_a = 1$. В случае водородоподобного иона с зарядом Z следует считать $Z_a = Z$, $n_* = n$, $\partial \Delta / \partial n = 0$, и формула (I.22) переходит в точную. Применимость этой формулы для многоэлектронных атомов проверена на огромном экспериментальном материале по сверхтонкому расщеплению атомных уровней.

Для определения $\langle R_p/r \rangle_{r \rightarrow 0}$ поступим следующим образом (ср. с ¹²). Величина тонкого расщепления состояний $P_{1/2}$ и $P_{3/2}$ из-за спин-орбитального взаимодействия $V_{с.-о.} = (Z\alpha\hbar^3/2m^2c) r^{-3} (1s)$ равна

$$\frac{3}{2} \zeta_p = \varepsilon(P_{3/2}) - \varepsilon(P_{1/2}) = \frac{3}{2} Z\alpha^2 \text{Ry} a_0^3 \int_0^\infty r^{-3} |R_p|^2 r^2 dr. \quad (1.23)$$

При этом предполагается, что основной вклад в расщепление дает область незэкранированного кулоновского потенциала ядра, для которой и записано выражение $V_{с.-о.}$. В этой же области нерелятивистское решение $R_p(r)$ имеет вид (1.17) при $B_p = 0$. Поэтому

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int_0^\infty r^{-1} |R_p|^2 dr = |\tilde{C}_p|^2 \int_0^\infty r^{-1} \frac{2Z}{a_0 r} J_3^2 \left(\sqrt{\frac{8Zr}{a_0}} \right) dr = |\tilde{C}_p|^2 \frac{Z}{6a_0}. \quad (1.24)$$

Из (1.24), (1.23) и (1.19) найдем

$$|R_p/r|_{r \rightarrow 0} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{3\zeta_p}{\text{Ry}}} \frac{Z^{1/2}}{\alpha a_0^{5/2}}. \quad (1.25)$$

Проведенные вычисления позволяют найти коэффициент примешивания β состояния $n's_{1/2}$ к состоянию $np_{1/2}$:

$$\psi = \psi(np_{1/2}) + \beta \psi(n's_{1/2}), \quad (1.26)$$

$$\begin{aligned} \beta &= \left| \frac{\langle s_{1/2} | V | p_{1/2} \rangle}{\varepsilon(p_{1/2}) - \varepsilon(s_{1/2})} \right| = \\ &= \lambda_{\text{рел}} \frac{1}{\pi} 10^{-5} \left(\frac{m}{m_p} \right)^2 \alpha q Z_a Z^2 \frac{\sqrt{1 + |\partial \Delta / \partial n|}}{n_*^{3/2}} \frac{\text{Ry}}{\Delta \varepsilon(np_{1/2}, n's_{1/2})} \sqrt{\frac{3\zeta_p}{2 \text{Ry}}}. \end{aligned}$$

II. АТОМЫ С НЕСКОЛЬКИМИ ОПТИЧЕСКИМИ ЭЛЕКТРОНАМИ

Оператор V есть симметричный по атомным электронам оператор типа $\sum v$, причем одноэлектронный оператор есть скалярное произведение сферических тензорных операторов первого ранга, действующих соответственно на координаты и спин электрона. С помощью метода генеалогических коэффициентов и формул для матричных элементов тензорных операторов (см. ¹²) можно получить

$$\begin{aligned} Q(l_a^n L_a S_a J; l_b^{n-1} [L_1 S_1] l_b S_b J) = \\ = (-1)^{L_a + L_b + 2S_a + L_1 + S_1 + J + 3/2} \sqrt{6} \cdot \sqrt{n} G_{S_1 L_1}^{S_a L_a} \sqrt{(2L_a + 1)(2L_b + 1)(2S_a + 1)(2S_b + 1)} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} L_a & S_a & J \\ S_b & L_b & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_a & L_a & L_1 \\ l_b & l_b & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1/2 & S_a & S_1 \\ S_b & 1/2 & 1 \end{matrix} \right\}, \quad (11.1) \end{aligned}$$

где $G_{S_1 L_1}^{S_a L_a}$ — генеалогические коэффициенты, формулы для G - и 6_j -символов $\left\{ \begin{matrix} x & y & z \\ y & x & 1 \end{matrix} \right\}$ содержатся в работе ¹²,

$$Q(a; b) = Q(b; a). \quad (11.2)$$

Для конфигураций s^2, ss, p^5

$$\begin{aligned} Q(s^2 {}^1S_0; sp {}^3P_0) &= -\sqrt{2}, \\ Q(ss {}^1S_0; sp {}^3P_0) &= -1, \quad Q(ss {}^3S_1; sp {}^1P_1) = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad Q(ss {}^3S_1; sp {}^3P_1) = -\sqrt{\frac{2}{3}}, \\ Q(p^5 {}^2P_{3/2}; p^4 [{}^3P] s {}^2P_{3/2}) &= \frac{1}{3\sqrt{2}}, \\ Q(p^5 {}^2P_{3/2}; p^4 [{}^1D] s {}^2D_{3/2}) &= -\sqrt{\frac{5}{6}}, \\ Q(p^5 {}^2P_{1/2}; p^4 [{}^1S] s {}^2S_{1/2}) &= \frac{1}{\sqrt{3}}, \\ Q(p^5 {}^2P_{1/2}; p^4 [{}^3P] s {}^2P_{1/2}) &= -\frac{\sqrt{2}}{3}. \end{aligned}$$

Приведенные матричные элементы $(a \| D \| b)$ выражаются через одноэлектронные с помощью следующих формул ¹²:

$$(l_a^n L_a S_a J_a \| D \| l_a^{n-1} [L_1 S_1] l_b L_b S J_b) = \\ = \sqrt{n} G_{S_1 L_1}^{S L a} (-1)^{S+J_b+L_1+l_b} \sqrt{(2J_a+1)(2J_b+1)(2L_a+1)(2L_b+1)} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} L_a & J_a & S \\ J_b & L_b & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_a & L_a & L_1 \\ L_b & l_b & 1 \end{matrix} \right\} (l_a \| D \| l_b), \quad (\text{II.3})$$

$$(a J_a \| D \| b J_b) = (-1)^{J_a - J_b} (b J_b \| D \| a J_a), \quad (\text{II.4})$$

$$(s^2 {}^1S_0 \| D \| s p {}^1P_1) = \sqrt{2} (s \| D \| p),$$

$$(ss {}^3S_1 \| D \| s p {}^3P_0) = \frac{1}{\sqrt{3}} (s \| D \| p),$$

$$(p^5 {}^2P_{3/2} \| D \| p^4 [{}^1S] s^2 S_{1/2}) = \frac{2}{3} (p \| D \| s),$$

$$(p^5 {}^2P_{3/2} \| D \| p^4 [{}^3P] s^2 P_{1/2}) = \sqrt{\frac{2}{3}} (p \| D \| s),$$

$$(p^5 {}^2P_{1/2} \| D \| p^4 [{}^3P] s^2 P_{3/2}) = -\sqrt{\frac{2}{3}} (p \| D \| s),$$

$$(p^5 {}^2P_{1/2} \| D \| p^4 [{}^1D] s^2 D_{3/2}) = \sqrt{\frac{10}{3}} (p \| D \| s),$$

$$(p \| D \| s) = -(s \| D \| p) = -e \int_0^\infty R_s R_p r^3 dr, \quad (\text{II.5})$$

где $e > 0$ — заряд электрона, R_s , R_p — радиальные функции. Формулы, связывающие параметр ζ с экспериментальным значением тонкого расщепления, содержатся в работе ¹². Из них следует:

$$\text{конфигурация } p: \zeta_p = \frac{2}{3} [E({}^2P_{3/2}) - E({}^2P_{1/2})],$$

$$\text{конфигурация } p^5, \zeta_p = -\frac{2}{3} [E({}^2P_{3/2}) - E({}^2P_{1/2})],$$

$$\text{конфигурация } sp: \zeta_p = 2 [E({}^3P_1) - E({}^3P_0)].$$

III. ПОЯСНЕНИЯ К ТАБЛИЦЕ

Знаки коэффициентов примеси β и матричных элементов дипольных моментов зависят от выбора знаков радиальных волновых функций $R_s(r)$ и $R_p(r)$. Знак вклада соответствующих переходов в наблюдаемую величину $W_+ - W_-$ от этого выбора, естественно, не зависит. Однако для нахождения знака этого вклада необходимо произвольно зафиксировать знаки радиальных функций R_s и R_p и по этим функциям вычислять как величину β , так и величину $(a \| D \| b)$. Для определения знаков мы пользовались таблицами Бейтса и Дамгаард ²² (эти таблицы приведены в книге ¹²), в которых сохранен знак матричных элементов дипольных моментов, а функции R_s и R_p выбраны положительными при $r \rightarrow \infty$. При этом для состояний с главным квантовым числом n по теореме о числе нулей радиальной функции имеем

$$\frac{R_{ns}(0)}{|R_{ns}(0)|} = (-1)^{n+1}, \quad \frac{R_{np}(r)}{|R_{np}(r)|} \Big|_{r \rightarrow 0} = (-1)^n.$$

Величина приведенного матричного элемента $|(j \| D \| k)| = |(k \| D \| j)|$ пересчитывалась по силе осциллятора $f(j, k)$ соответствующего радиационного перехода по формуле

$$|(j \| D \| k)|^2 = \frac{3}{2} g_j \frac{e^2 \hbar}{m \omega_{jk}} f(j, k),$$

где сила осциллятора $f(j, k)$ определена таким образом, что $E_j > E_k$ и вероятность спонтанного излучения

$$W_{jk} = \frac{2\omega^2 e^2}{mc^3} \frac{1}{g_j} f(j, k).$$

Приведем также силы осцилляторов переходов и результаты промежуточных вычислений, которые были использованы при получении окончательных величин, приведенных в таблице.

Р у б и д и й Rb_{85}^{37} . $\lambda_{\text{рел}} = 1,55$. К нижнему состоянию примешиваются термы: $5p_{1/2}$, $|\beta| = 0,225 \cdot 10^{-11}$, $f(6s_{1/2}, 5p_{1/2}) = 0,19^{22}$, $4\chi = -1,0 \cdot 10^{-4}$; $6p_{1/2}$, $|\beta| = 0,64 \cdot 10^{-12}$, $f(6p_{1/2}, 6s_{1/2}) = 0,52^{22}$, $4\chi = 0,74 \cdot 10^{-4}$. К верхнему состоянию примешиваются термы: $5p_{1/2}$, $|\beta| = 0,19 \cdot 10^{-11}$, $f(5p_{1/2}, 5s_{1/2}) = 0,33^{22, 23}$, $4\chi = -0,92 \times 10^{-4}$; $6p_{1/2}$, $|\beta| = 0,225 \cdot 10^{-11}$, $f(6p_{1/2}, 5s_{1/2}) = 0,015^{22}$, $4\chi = 0,50 \cdot 10^{-5}$.

Ц е з и й Cs_{133}^{55} . $\lambda_{\text{рел}} = 2,5$. К нижнему состоянию примешиваются термы: $6p_{1/2}$, $|\beta| = 0,117 \cdot 10^{-10}$, $f(7s_{1/2}, 6p_{1/2}) = 0,17^{22}$, $4\chi = -4,92 \cdot 10^{-4}$; $7p_{1/2}$, $|\beta| = 0,346 \cdot 10^{-11}$, $f(7p_{1/2}, 7s_{1/2}) = 0,48^{22}$, $4\chi = +3,76 \cdot 10^{-4}$. К верхнему состоянию примешиваются термы: $6p_{1/2}$, $|\beta| = 10^{-11}$, $f(6p_{1/2}, 6s_{1/2}) = 0,33^{23}$, $4\chi = -4,78 \cdot 10^{-4}$; $7p_{1/2}$, $|\beta| = 1,35 \cdot 10^{-11}$, $f(7p_{1/2}, 6s_{1/2}) = 10^{-3}^{22}$, $4\chi = 0,26 \cdot 10^{-4}$.

С т р о н ц и й Sr_{88}^{38} . $\lambda_{\text{рел}} = 1,55$. К нижнему состоянию примешивается терм $5s5p^3P_0$, $|\beta| = 0,555 \cdot 10^{-11}$, $f(5s6s^3S_1, 5s5p^3P_0) = 0,06^{23}$, $4\chi = -2,0 \cdot 10^{-4}$. К верхнему состоянию примешивается терм $5s5p^1P_1$, $|\beta| = 2,0 \cdot 10^{-11}$, $f(5s5p^1P_1, 5s^2^1S_0) = 0,51^{23}$, $4\chi = -1,05 \cdot 10^{-4}$.

Б а р и й Ba_{137}^{56} . $\lambda_{\text{рел}} = 2,5$. К нижнему состоянию примешивается терм $6s6p^3P_0$, $|\beta| = 2,82 \cdot 10^{-11}$, $f(6s7s^3S_1, 6s6p^3P_0) = 0,17^{23}$, $4\chi = 3,66 \cdot 10^{-5}$. К верхнему состоянию примешивается терм: $6s6p^1P_1$, $|\beta| = 1,03 \cdot 10^{-11}$, $f(6s6p^1P_1, 6s^2^1S_0) = 0,47^{23}$, $4\chi = -1,86 \cdot 10^{-5}$.

Р т у т ь Hg_{200}^{80} . $\lambda_{\text{рел}} = 6,1$. К нижнему состоянию примешивается терм $6s6p^3P_0$, $|\beta| = 1,28 \cdot 10^{-10}$, $f(6s7s^3S_1, 6s6p^3P_0) = 0,07^{23}$, $4\chi = 4,3 \cdot 10^{-5}$. К верхнему состоянию примешивается терм $6s6p^1P_1$, $|\beta| = 1,16 \cdot 10^{-10}$, $f(6s6p^1P_1, 6s^2^1S_0) = 0,4^{23}$, $4\chi = -6,0 \cdot 10^{-5}$.

Й о д I_{127}^{53} . $\lambda_{\text{рел}} = 2,36$. К нижнему состоянию примешиваются термы *): $5p^3P$, $6s^2P_{3/2}$, $|\beta| = 0,18 \cdot 10^{-11}$; $5p^4[D]$, $6s^2D_{3/2}$, $|\beta| = 1,1 \cdot 10^{-11}$. К верхнему состоянию примешиваются термы $5p^4^3P$, $6s^2P_{1/2}$, $|\beta| = 0,36 \cdot 10^{-11}$, $5p^4^1S$, $6s^2^2S_{1/2}$, $|\beta| = 0,45 \cdot 10^{-11}$. Силы осцилляторов примешиваемых переходов были оценены в работе ²⁴: $f \sim 0,15$. Относительные знаки вкладов соответствующих переходов установлены не удалось. Поэтому приведенная в таблице величина 4χ отвечает вкладу единственного примешиваемого состояния $5p^4[D]$, $6s^2D_{3/2}$.

Т а л л и й Tl_{204}^{81} . $\lambda_{\text{рел}} = 6,1$. К нижнему состоянию примешивается терм $7s_{1/2}$, $|\beta| = 0,86 \cdot 10^{-10}$, $f(7s_{1/2}, 6p_{3/2}) = 0,28^{23}$, $4\chi = -2,63 \cdot 10^{-7}$.

С в и н е ц Pb_{207}^{82} . $\lambda_{\text{рел}} = 6,1$. К нижнему состоянию примешивается терм $6p7s^3P_0$, $|\beta| = 0,9 \cdot 10^{-10}$, $f(6p7s^3P_0, 6p^2^3P_1) \sim 5 \cdot 10^{-2}^{24}$, $4\chi \sim 1,3 \cdot 10^{-6}$. К верхнему состоянию примешивается терм $6p7s^3P_1$, $|\beta| \sim 1,0 \cdot 10^{-10}$, $f(6p7s^3P_1, 6p^2^3P_0) \sim 5 \cdot 10^{-2}^{24}$, $4\chi \sim 1,0 \cdot 10^{-6}$. В этом элементе выполняется промежуточный тип связи, и поэтому величина ζ_p из (1.26) была взята равной $\zeta_p = 7290 \text{ см}^{-1}$ по ¹⁷. Величины β и силы осцилляторов были оценены весьма грубо, без учета Q-факторов.

В и с м у т Bi_{209}^{83} . $\lambda_{\text{рел}} = 6,1$. Выполняется промежуточный тип связи, $\zeta_p = 10\,400 \text{ см}^{-1}$ ¹⁷. Надежное вычисление сил осцилляторов и Q-факторов затруднено. Поэтому для всех примешиваемых термов была взята усредненная оценка $|\beta| \sim 2 \cdot 10^{-10}$, $f \sim 10^{-1}$.

В заключение отметим, что более точное вычисление параметра χ является довольно трудоемкой процедурой; такое вычисление целесообразно предпринимать лишь в связи с экспериментами, проведенными на конкретном элементе.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
АН СССР

*) Обозначения термов и их энергии взяты по ²⁵.

