

ОБ ЭФФЕКТАХ НЕСОХРАНЕНИЯ ЧЕТНОСТИ В МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМАХ

Д.Б. Саахян, И.И. Собельман, Е.А. Юков

Рассмотрен вклад внутренних оболочек в матричные элементы несохраняющего четность слабого взаимодействия. Показано, что возникающая при этом поправка не приводит к компенсации эффекта, а увеличивает его на 20 – 40%.

Эффекты несохранения четности в атомах, предсказываемые моделью Вайнберга – Салама, быстро растут с ростом заряда ядра Z . Поэтому в оптических экспериментах по проверке модели Вайнберга – Салама наибольшее внимание в настоящее время уделяется тяжелым атомам, в частности поиску оптической активности (вращение плоскости поляризации света) в парах висмута [1 – 3]. Расчет искомого эффек-

та в рамках одноконфигурационного приближения для многоэлектронных атомов типа Vi не вызывает особых затруднений. Поэтому при оценке точности и надежности расчетов основным является вопрос о применимости этого приближения. Учет возмущающего влияния нескольких ближайших возбужденных конфигураций дает сравнительно небольшие поправки, порядка нескольких процентов [4, 5]. Значительно большей оказывается поправка на поляризацию электронного бстова атома при вычислении матричных элементов электрического дипольного момента. Для атома Vi , согласно [4, 6], она может составлять 30 – 50%, причем приводит к уменьшению эффекта.

В настоящей работе рассматриваются поправки другого типа, связанные с вкладом в матричные элементы несохраняющего четность слабого взаимодействия электронов внутренних, заполненных, оболочек.

Представляя атомные функции Ψ в виде разложения по одноконфигурационным хартри-фокковским функциям Φ имеем для матричного элемента, смешивающего состояния противоположной четности

$$V'_{ik} = \langle \Psi_i | V | \Psi_k \rangle = V_{ik} + \sum_m \frac{V_{im} U_{mk} + U_{im} V_{mk}}{E_i - E_m}, \quad (1)$$

где $V_{ik} = \langle \Phi_i | V | \Phi_k \rangle$, U_{ik} – матричные элементы взаимодействия конфигураций, а суммирование по m распространяется на все одноконфигурационные состояния атома, включая состояния, соответствующие возбуждению электронов внутренних оболочек. Запишем (1) в виде

$$V'_{ik} = V_{ik} (1 + \sum_{\nu \geq 1} a_{\nu s} + \sum_{\nu \geq 2} b_{\nu p}), \quad (2)$$

где $a_{\nu s}$ и $b_{\nu p}$ – поправки, описывающие вклад заполненных оболочек νs^2 и νp^6 , ν – главные квантовые числа, и рассмотрим в качестве примера, иллюстрирующего дальнейшие вычисления, матричный элемент слабого взаимодействия, смеживающий термы основного состояния $6p^3$ и возбужденного состояния $6p^2 7s$ атома Vi $\langle i | = \langle 6p^3 SLJ |$, $| k \rangle = | 6p^2 [S_1 L_1] 7s S' L' J \rangle$. Используя стандартную процедуру выделения радиальных частей матричных элементов симметричных тензорных операторов, выполняя суммирование по термам промежуточных состояний m и учитывая, что одноэлектронные приведенные матричные элементы $\langle \nu r || V || ns \rangle \sim R_{ns}(0) R'_{\nu p}(0)$, где $R_{ns}(0)$ и $R'_{\nu p}(0)$ – значения радиальной функции ns -электрона и производной радиальной функции νp -электрона при $r \rightarrow 0$ (см., например, [7]) можно получить (в атомных единицах)

$$a_{\nu s} = \frac{1}{I_{\nu s}} \sum_{n \geq 7} \left(\frac{R_{\nu s} R'_{np}}{R_{7s} R'_{6p}} \right) \left[F_0(6p\nu s, np7s) - \frac{1}{3} F_1(6pnp, \nu s 7s) \right], \quad (3)$$

$$b_{\nu p} = \frac{1}{I_{\nu p}} \sum_{n \geq 7} \left(\frac{R_{ns} R'_{\nu p}}{R_{7s} R'_{6p}} \right) \left[F_0(ns 6p, 7s\nu p) - \frac{1}{3} F_1(6p\nu p, ns 7s) \right]. \quad (4)$$

Здесь через F_k обозначены двухэлектронные интегралы от $r_{<}^k / r_{>}^{k+1}$, все энергетические знаменатели в (1) близки к энергии связи $\nu p (\nu s)$ электрона $-I_{\nu p}$ ($I_{\nu s}$) и поэтому вынесены за знак суммы по n ($I_{\nu p}$, $I_{\nu s} > 0$). Оболочка $6s^2$, для которой сказанное несправедливо, рассматривалась отдельно. Кроме того, отдельно рассматривались также возбуждения типа $\nu s^2 6p^3 \rightarrow \nu s 6p^4$, так как в этом случае при интеграле F_1 возникает множитель, зависящий от угловых квантовых чисел термов состояния $\nu s 6p^4$.

Используя свойство полноты одноэлектронных функций можно записать (3), (4) в другом виде, устранив суммирование по высоковозбужденным состояниям n и непрерывному спектру.

Так для $b_{\nu p}$ имеем наряду с (4)

$$b_{\nu p} = \frac{1}{I_{\nu p}} \left\{ \left(\frac{R'_{\nu p}}{R'_{6p}} \right) \langle R_{6p} | \frac{1}{r} | R_{\nu p} \rangle - \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{R_{ns} R'_{\nu p}}{R_{7s} R'_{6p}} \right) \left[F_0(ns 6p, 7s \nu p) - \frac{1}{3} F(6p \nu p, ns 7s) \right] \right\}. \quad (5)$$

Возможность использовать в численных расчетах две формы записи для $a_{\nu s}$ и $b_{\nu p}$ дает дополнительную возможность контроля качества расчетов.

Вероятность нахождения электрона вблизи ядра a , следовательно, и значения функций $R_{\nu s}$ и $R'_{\nu p}$ тем больше, чем меньше ν . Поэтому малость величин $F_k / I_{\nu p}$, $F_k / I_{\nu s}$ в определенной мере компенсируется множителями $R_{\nu s} / R_{7s}$ и $R'_{\nu p} / R'_{6p}$ в (3), (4), а также большим числом поправочных членов в (2) — (4). Численные расчеты поправок $a_{\nu s}$, $b_{\nu p}$ проводились для матричных элементов $\langle 6s^2 6p^3 | V | 6s^2 6p^2 7s \rangle$, $\langle 6s^2 6p^3 | V | 6s^2 6p^2 8s \rangle$ и $\langle 6s^2 6p^3 | V | 6s 6p^4 \rangle$ с использованием двух типов радиальных функций — хартри-фоковских [8] и полуэмпирических [9]. Поскольку относительная величина поправки к первым двум

из этих матричных элементов оказалась практически одинаковой, такая же относительная поправка вводилась и для матричных элементов $\langle 6s^2 6p^3 | V | 6s^2 6p^2 \epsilon s \rangle$, где ϵs — состояние непрерывного спектра. В основном использовались выражения для $a_{\nu s}$, $b_{\nu p}$ типа (5). В качестве контроля вычислялись также первые члены суммы по n в (3) и (4).

Расчеты дали следующие результаты¹⁾. Суммарная поправка к каждому из матричных элементов, а также к экспериментально определяемой величине $R = \text{Im } E1 / M1$, где $E1$, $M1$ — матричные элементы электрического и магнитного моментов перехода, положительна, т. е. увеличивает эффект. Наибольший вклад в поправку дают оболочки $5p^6$, $5s^2$ и $6s^2$. При использовании полуэмпирических функций вклад оболочек $5p^6$ и $6s^2$ относительно снижается. Суммарная поправка к R составляет 20 — 40% (верхнее значение получено с хартри-фоковскими функциями [8] и, по-видимому, несколько завышено), т. е. частично компенси-

¹⁾ Подробное изложение результатов расчетов будет опубликовано отдельно.

рует уменьшение R за счет поправки на поляризацию электронного остова в матричном элементе электрического диполя [4, 6]. Мы не видим каких-либо возможностей существенного подавления эффекта несохранения четности в тяжелых атомах типа Bi по сравнению с результатами расчетов в одноконфигурационном приближении.

Мы благодарим Л.А.Вайнштейна, О.Я.Зельдовича и Н.В.Пичкурова за помощь в расчетах.

Физический институт
им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
18 января 1979 г.

Литература

- [1] P.E.G.Baird, et al. Phys. Rev. Lett., **39**, 798, 1977.
 - [2] L.L.Lewis, et al. Phys. Rev. Lett., **39**, 795, 1977.
 - [3] Л.М.Барков, М.С.Золотарев. Письма в ЖЭТФ, **27**, 379, 1978; **28**, 544, 1978.
 - [4] В.Н.Новиков, О.П.Сушков, И.Б.Хрипович. ЖЭТФ, **71**, 1665, 1976.
 - [5] E.M.Henley, M.Klapisch, L.Wilets. Phys. Rev. Lett., **39**, 994, 1977.
 - [6] M.J.Harris, C.E.Loving, P.G.H.Sanders. J. Phys. B, 1978.
 - [7] В.А.Алексеев, Б.Я.Зельдович, И.И.Собельман. УФН, **118**, 385, 1976.
 - [8] F.Herman, S.Skillman. Atomic Structure Calculations. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1963.
 - [9] Л.А.Вайнштейн. Труды ФИАН. **15**, 3, 1961.
-