

КВАДРУПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ АТОМОВ В СОСТОЯНИИ $np_{1/2}$ М.Я.Амусья¹⁾, М.Ю.Кучиев¹⁾, В.Л.Яхонтов²⁾

В настоящей работе впервые показано, что атомы с основным термом $2p_{1/2}$ обладают квадрупольным моментом (КМ), примерно на пять порядков превышающим КМ их ядер.

Известно, что КМ любой частицы, структурной или бесструктурной, обладающей моментом $1/2$ строго равен нулю¹. В данной работе рассмотрен вопрос о КМ атомов третьего столбца периодической системы, электронная оболочка которых имеет $j = 1/2$. Тем не менее, их КМ оказывается отличным от нуля и большим: $Q \sim 10^{-20} \text{ см}^2$.

В Брейтовском потенциале взаимодействия электронов с ядром имеются члены, аналогичные тензорным ядерным силам, приводящим к ненулевому КМ дейтрона. Их существование приводит к появлению КМ и в основном состоянии атома водорода, как впервые было отмечено в работе². Численное значение этого КМ составляет $Q_{1s}^{(H)} = 7,55 \cdot 10^{-25} \text{ см}^2$ ³.

Недавно⁴ было предсказано существование гораздо большего КМ в возбужденном $2p_{1/2}$ состоянии водорода и мезоводорода, где он возникает вследствие примешивания сверхтонким взаимодействием уровня $2p_{3/2}$ к уровню $2p_{1/2}$. Близость по энергии состояний $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ приводит к увеличению КМ примерно в $\alpha^{-2} \sim 2 \cdot 10^4$ раз по сравнению с $Q_{1s}^{(H)}$, а значение, получаемое в результате расчета есть $Q_{2p}^{(H)} = 4 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$. Смешивание $np_{1/2}$ и $np_{3/2}$ состояний объясняет и большую величину КМ атомов, рассмотренных в данной работе.

Наблюдаемая величина КМ определяется средним значением z -компоненты тензора квадрупольного момента системы "электрон + ядро" в исходном $2p_{1/2}$ состоянии. Нетрудно показать, что в пренебрежении сверхтонким взаимодействием W в рассматриваемой системе КМ $Q = 0$.

Учтем теперь примешивание к $np_{1/2}$ под действием W лишь уровня $np_{3/2}$, вследствие его сильной энергетической близости к исходному: $E_{p_{3/2}} - E_{p_{1/2}} = \Delta E_{fs} \sim Z^2 \alpha^2 m_e e^4 / \hbar^2 \ll \ll e^2 / a_B$ ⁵, где Z – заряд ядра, α – постоянная тонкой структуры, a_B – боровский радиус атома водорода. Отличная от нуля величина КМ в состоянии $p_{1/2}$ возникает при учете W в первом порядке теории возмущений и дается выражением

$$\langle Q \rangle = 2\eta \langle np_{1/2} IFM | \hat{Q} | np_{3/2} IFM \rangle. \quad (1)$$

Здесь \hat{Q} – оператор квадрупольного момента, а η – коэффициент смешивания $np_{3/2}$ и $np_{1/2}$ уровней, который имеет вид

$$\eta = \langle np_{1/2} IFM | \hat{W} | np_{3/2} IFM \rangle (E_{p_{1/2}} - E_{p_{3/2}})^{-1}. \quad (2)$$

Расчет КМ можно проводить, пренебрегая малой (пропорциональной α^2) разницей между радиальными функциями $np_{1/2}$ и $np_{3/2}$ состояний, т. е. считая их нерелятивистскими. В этом приближении коэффициент смешивания η , как следует из (2), с точностью до числен-

1) Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе АН СССР, Ленинград.

2) Политехнический институт им. М.И.Калинина, Ленинград.

ного множителя, определяется соотношением

$$\eta \sim \frac{E_{F=1}(np_{1/2}) - E_{F=0}(np_{3/2})}{E_{p_{1/2}} - E_{p_{3/2}}} \sim \frac{\mu m_e}{IZ m_p}, \quad (3)$$

в котором μ — магнитный момент ядра в единицах ядерных магнетонов, а I — его спин.

В работе проведен расчет величин КМ рассматриваемых атомов, используя (1) и (2), как полуэмпирически, т. е. с учетом экспериментальных значений тонкого и сверхтонкого расщеплений $np_{1/2}$ уровня, так и аналитически. В последнем случае результат имеет вид

$$Q = \frac{8 Z m_e^2 - M_{\text{я}}^2}{15 (m_e + M_{\text{я}})^2} \frac{\mu m_e}{Z m_p} \langle r^2 \rangle \begin{cases} 1, & F = I + 1/2 \\ -\frac{I-1}{I} \frac{2I-1}{2I+1}, & F = I - 1/2 \end{cases} \quad (4)$$

где через $M_{\text{я}}$ обозначена масса ядра атома. Расчет $\langle r^2 \rangle$ проведен в рамках нерелятивистского приближения Хартри — Фока. Полученные значения КМ подуровней сверхтонкой структуры с $F = I + 1/2$ атомов ^{27}Al и ^{203}Tl , например, соответственно составляют: $Q = -3,2 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$ и $Q = -3,0 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2$, — при расчете с помощью (4), и $Q = -4,4 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$, $Q = -6,8 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2$ — при полуэмпирическом расчете.

Как показывает анализ, для каждого из подуровней сверхтонкой структуры в исследуемых атомах $Q_{np_{1/2}}$ составляет значения порядка 10^{-21} см^2 ; это почти в 10^4 раз превышает собственные КМ их ядер, а также $Q_{1s}^{(H)}$. Уместно подчеркнуть, что, как следует из (4), $Q_{np_{1/2}}$ для состояний с $F = I + 1/2$ и $F = I - 1/2$ оказывается разных знаков, плавно убывая с ростом Z . При переходе от основного состояния к возбужденным $n'p_{1/2}$ КМ быстро растет — как n'^4 , вследствие роста $\langle r^2 \rangle \sim n'^4$.

Большой КМ атомов с основным термом $^2P_{1/2}$ должен проявляться при их взаимодействии с веществом, ибо, согласно (4), среднее по образцу значение КМ (т. е. полученное с учетом статистического веса $2F + 1$ каждого из подуровней сверхтонкой структуры) отлично от нуля. Его большая величина делает экспериментальное обнаружение и измерение квадратурных моментов вполне доступным.

В заключение авторы считают своим долгом выразить признательность А.Н.Москалеву и И.Б.Хрипловичу за полезные обсуждения и критические замечания.

Литература

1. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977.
2. Барышевский В.Г., Кутень С.А. Тр. Международного симпозиума по проблемам мезонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе, Дубна, 7 — 10 июня, 1977, с. 342.
3. Khriplovich I.B. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1984, 17, L803.
4. Amusia M. Ya., Yakhontov V.L. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1984, 17, L203.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.