

Н. 73

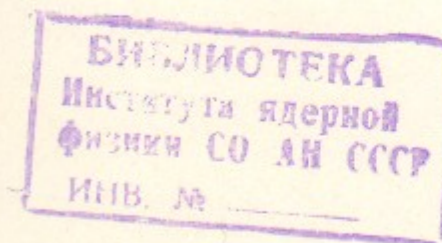
38

И Н С Т И Т У Т  
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СОАН СССР

ПРЕПРИНТ И Я Ф 76 - 63

В.Н.Новиков, О.П.Сушков, И.Б.Хриплович

ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПАРОВ ТЯЖЁЛЫХ  
МЕТАЛЛОВ - ПРОЯВЛЕНИЕ СЛАБОГО ВЗАИМО-  
ДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С НУКЛОНАМИ



Новосибирск

1976

ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПАРОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ  
— ПРОЯВЛЕНИЕ СЛАБОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРО-  
НОВ С НУКЛОНАМИ

В.Н.Новиков, О.П.Сушков, И.Б.Хриплович

А Н Н О Т А Ц И Я

Обсуждается возможность обнаружить несохранение четности в атомных переходах путем наблюдения вращения плоскости поляризации света в парах тяжелых металлов. Углы поворота плоскости поляризации при температуре паров  $1200^{\circ}\text{C}$  составляют  $\sim 10^{-5}$  рад/м в таллии и свинце и  $10^{-7} + 10^{-6}$  рад/м для различных переходов в висмуте. Рассмотрен также аналогичный эффект в переходах между компонентами сверхтонкой структуры. Угол поворота плоскости поляризации радиоволны в парах таллия может достигать  $10^{-9}$  рад.

# OPTICAL ACTIVITY OF HEAVY METAL VAPORS

## AS INDICATION OF WEAK INTERACTION

### OF ELECTRONS WITH NUCLEONS

I.B.Khriplovich, V.N.Novikov and O.P.Sushkov

Institute of Nuclear Physics  
Novosibirsk 90, USSR

#### abstract

We discuss the feasibility of detecting parity nonconservation in atomic transitions by observing the rotation of the polarization plane of light in heavy metal vapors. The angles of rotation constitute at the vapor temperature 1200°C about  $10^{-5}$  rad/m in thallium and lead and  $10^{-7} + 10^{-6}$  in bismuth (see the table 9). Analogous effect in transitions between hyperfine structure components is also considered. The angle of rotation of the radio wave polarization plane in thallium vapor can reach  $10^{-9}$  rad.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время наметилась достаточно реальная возможность обнаружить слабое взаимодействие электронов с нуклонами путем наблюдения эффектов несохранения четности в атомных переходах. Впервые обратил внимание на эти эффекты Я.Б.Зельдович еще в 1959 году [1] и с тех пор они неоднократно обсуждались теоретиками [2-5] (см. также [6,9]). Чрезвычайно важный шаг был сделан Бушиа, указавшими в своей заметке [3], что эффекты несохранения четности в тяжелых атомах оказываются усиленными настолько, что их наблюдение в индуцированных дважды запрещенных  $M1$  переходах оказывается на грани возможного.

Недавно была указана возможность обнаружить несохранение четности в атомных переходах по вращению плоскости поляризации света <sup>\*)</sup> в парах тяжелых металлов [10-12] (см. также заметку [13], где обсуждается аналогичный эффект в радиодиапазоне). В настоящей работе рассмотрен вопрос о том, вблизи каких переходов и в каких химических элементах следует искать оптическую активность. Затем приводится расчет эффекта в оптической области в наиболее подходящих, по-видимому, элементах: таллии, свинце и висмуте. Первоначальные результаты были получены нами летом 1975г., они содержатся в обзоре [14]. Осенью того же года мы ознакомились с заметкой [15] в которой были приведены результаты численного расчета степени циркулярной поляризации в висмуте, существенно отличавшиеся от наших. В связи с этим, нами совместно с В.В.Фламбаумом были проделаны тщательные численные расчеты, которые привели к некоторому уточнению первоначальных результатов. Однако заметное расхождение с работой [15] сохранилось. Обсуждение точности наших расчетов и сравнение со статьёй [15] (а также с недавней работой [16]) содержится в седьмом разделе нашей работы. В восьмом и девятом разделах обсуждаются современные экспериментальные возможности, указываются ограничения на внешнее магнитное поле, имитирующее эффект, а также проводится расчет эффекта в радиодиапазоне в цезии и в таллии.

\*) То обстоятельство, что несохранение четности приводит к появлению оптической активности, было впервые отмечено Я.Б.Зельдовичем [1].

Проведённые расчёты, достаточно трудоёмкие и кропотливые, представляются вполне целесообразными, так как в настоящее время поиски обсуждаемой оптической активности ведутся уже несколькими экспериментальными группами [17-19].

2. В каких атомах и переходах выгодно искать оптическую активность?

Запишем коэффициент преломления для право- и левополяризованных квантов вблизи резонанса на частоте  $\omega_0$  в виде

$$n_{\pm} = 1 - \frac{2\pi N \overline{|M_{\pm}|^2}}{\hbar} \left\langle \frac{1}{\omega - \omega_0 - \frac{v}{c}\omega + i\Gamma/2} \right\rangle \quad (2.1)$$

Здесь  $N$  - плотность атомов среды,  $\Gamma$  - ширина возбужденного уровня. Оператор  $\hat{M}_{\pm}$  для дипольных переходов равен соответствующей проекции дипольного момента. Черта сверху означает суммирование квадрата матричного элемента по конечным и усреднение по начальным поляризациям атомов. Скобками  $\langle \rangle$  обозначено усреднение по  $\vec{v}$  - проекции скорости атома на направление луча света.

Если четность не сохраняется, матричные элементы  $M_{\pm}$  не равны между собой и могут быть представлены в виде

$$M_{\pm} = M \pm FM_1 = M(1 \pm P/2) \quad (2.2)$$

где  $F$  - безразмерный малый параметр;  $M_1$  - примесный матричный элемент неправильной четности;  $P$  - степень циркулярной поляризации излучения, следующим образом связанная с вероятностями испускания право- и левополяризованных квантов  $\omega_{\pm}$ :

$$P = \frac{\omega_+ - \omega_-}{\omega_+ + \omega_-} = \frac{|M_+|^2 - |M_-|^2}{|M_+|^2 + |M_-|^2} = 2F \frac{M_1}{M} \quad (2.3)$$

Плоскость поляризации света поворачивается на длине  $l$  на угол

$$\psi = \frac{1}{2} \frac{\omega}{c} l \operatorname{Re}(n_+ - n_-) = -\frac{2\pi N \omega \overline{|M|^2}}{\hbar c} l P \left\langle \frac{\omega - \omega_0 - \frac{v}{c}\omega}{(\omega - \omega_0 - \frac{v}{c}\omega)^2 + \Gamma^2/4} \right\rangle \quad (2.4)$$

Кроме того, различными оказываются и коэффициенты поглощения для право- и левополяризованных квантов  $\alpha_{\pm}$ :

$$\alpha_{\pm} = 2 \frac{\omega}{c} \operatorname{Im} n_{\pm} = \frac{4\pi N \omega \overline{|M|^2}}{\hbar c} (1 \pm P) \left\langle \frac{\Gamma/2}{(\omega - \omega_0 - \frac{v}{c}\omega)^2 + \Gamma^2/4} \right\rangle \quad (2.5)$$

Поэтому поляризация света из линейной становится эллиптической. Отношение малой полуоси эллипса и большой составляет

$$\chi = \frac{\omega l}{2c} \operatorname{Im}(n_+ - n_-) = \frac{1}{4} l (\alpha_+ - \alpha_-) \quad (2.6)$$

Подчеркнем, что величины  $\psi$  и  $\chi$ , характеризующие в данном случае эффекты несохранения четности, пропорциональны, в отличие от степени циркулярной поляризации  $P$ , не отношению, а произведению основного и примесного матричных элементов. Поэтому, в отличие от эксперимента по наблюдению циркулярной поляризации, предложенного Бушиа [3], невыгодно искать оптическую активность в окрестности сильно запрещенного  $M_1$  перехода. Невыгодна также ситуация, когда основной переход разрешен. Ведь для разрешенных переходов коэффициент поглощения  $\alpha$  очень велик; а поскольку длина пути  $l$  не может заметно превышать  $\alpha^{-1}$ , то достижимые угол поворота  $\psi$  и эллиптичность  $\chi$  оказываются крайне малыми.

Естественно поэтому обратиться к случаю, когда основным является  $M_1$  переход, а примесным  $E_1$ . Как известно,  $M_1$  переход идет без дополнительного подавления лишь между термами, относящимися к одной и той же электронной конфигурации. При этом для наблюдения малых эффектов оптической активности крайне желательно, чтобы этот переход из основного состояния находился в видимой части спектра или вблизи нее. Такая ситуация имеет место в тяжелых элементах. Наконец, вещество должно иметь заметное давление паров при разумной температуре. Если несколько произвольно считать "заметным" давление  $\sim 10$  мм и "разумной" температуру  $\sim 1200^\circ\text{C}$ , то круг подходящих элементов сужается до теллура, иода, европия, таллия, свинца, висмута и полония.

Из перечисленных элементов теллур обладает наименьшим зарядом ядра ( $Z = 52$ ) и поэтому в нем следует ожидать наименьшего эффекта. Этот недостаток не компенсируется какими-либо преимуществами. Обсуждаемые переходы в теллуре лежат в инфракрасной области ( $\lambda = 21048 \text{ \AA}$ ,  $9471 \text{ \AA}$ ). Кроме того, в парах этого элемента несравненно больше молекул  $\text{Te}_2$ , чем атомарного теллура. Поглощение света за счет молекулярной составляющей в

парах теллура может сказаться дополнительным осложнением <sup>ж</sup>). Аналогичные соображения относятся и к иоду ( $Z = 53$ ,  $\lambda = 13152 \text{ \AA}$ ).

Что касается европия, то для него до сих пор неизвестны энергии состояний, относящихся к той же электронной конфигурации, что и основное.

Наконец, полоний ( $Z = 84$ ,  $\lambda = 4613 \text{ \AA}$ ,  $5941 \text{ \AA}$ ) обладает высокой радиоактивностью, что сильно затрудняет возможности работы с ним. Это обстоятельство тем более досадно, что для полония, по-видимому, решается проблема достаточно мощного монохроматического источника света (см. ниже), так как вторая из указанных линий почти совпадает с одной из линий гелий-неонового лазера.

Таким образом, наиболее подходящими элементами для обсуждения опытов в настоящее время представляются таллий ( $Z = 81$ ,  $\lambda = 12833 \text{ \AA}$ ), свинец ( $Z = 82$ ,  $\lambda = 12789 \text{ \AA}$ ) и висмут ( $Z = 83$ ,  $\lambda = 8757 \text{ \AA}$ ,  $6477 \text{ \AA}$ ,  $4616 \text{ \AA}$ ,  $3015 \text{ \AA}$ ).

Остановимся теперь на требованиях, предъявляемых к стабильности частоты и ширине линии источника света. Усреднение в формуле (2.1) по максвелловскому распределению атомов приводит к выражению

$$\left\langle \frac{1}{\omega - \omega_0 - \frac{v}{c}\omega + i\Gamma/2} \right\rangle = \frac{1}{\Delta_D} [g(u, v) + i f(u, v)] = \quad (2.7)$$

$$= - \frac{i\sqrt{\pi}}{\Delta_D} e^{-w^2} [1 - \Phi(-iw)]$$

Здесь  $\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-z'^2} dz'$  - интеграл ошибок, а комплексная величина  $w$  следующим образом выражается через отстройку  $\Delta = \omega - \omega_0$  и доплеровскую ширину  $\Delta_D = \omega_0 \sqrt{\frac{2kT}{Mc^2}}$  ( $M$  - масса атома)

$$w = u + iv = \frac{\Delta}{\Delta_D} + i \frac{\Gamma}{2\Delta_D}$$

(Вывод формулы (2.7) дан в приложении, там же приведены графики функций  $g(u, v)$  и  $f(u, v)$ ) Нас будет интересовать ситуа-

<sup>тяжелые</sup>  
<sup>ж</sup>) Следует заметить, что поиски несохранения четности в электронных спектрах молекул, содержащих атомы, также представляют большой интерес. Однако надежная оценка эффекта здесь весьма затруднительна. Поэтому вопрос о несохранении четности в молекулярных переходах мы не рассматриваем.

ция, когда ширина верхнего уровня  $\Gamma$  (обусловленная резонансной передачей возбуждения при столкновениях с атомами в основном состоянии) много меньше доплеровской ширины  $\Delta_D$  (т.е.,  $v \ll 1$ ). Чтобы угол поворота плоскости поляризации  $\psi$  не был слишком мал, отстройка  $\Delta$  должна быть сравнимой с  $\Delta_D$ . А так как  $\psi$  - нечетная функция отстройки, то стабильность частоты и ширина линии источника должны быть также, по крайней мере, сравнимы с доплеровским уширением, составляющим в нашем случае примерно  $10^{-6} \omega_0$ . Эта величина меньше, чем сверхтонкое расщепление, так что переход будет происходить только между определенными компонентами сверхтонкой структуры уровней.

Заметим, что угол поворота  $\psi$  может быть представлен в следующем виде

$$\psi = \frac{1}{2} \alpha \frac{g}{f}, \quad \alpha = \frac{1}{2} (\alpha_+ + \alpha_-) \approx \alpha_+ \quad (2.8)$$

Поскольку величина  $\alpha l$  заведомо не может намного превышать единицу, угол  $\psi$  отличается от степени циркулярной поляризации  $P$  лишь численным множителем  $\sim g/f$ . Основное же достоинство предлагаемого эксперимента состоит в том, что малые углы поворота плоскости поляризации измерять, по-видимому, несравненно легче, чем малую степень циркулярной поляризации. Дополнительный выигрыш для таллия и свинца состоит в том, что для них фактор  $g/f$  в реальных условиях может составлять 50 - 70 (см. ниже).

Полезно продемонстрировать преимущества обычного М1 перехода с помощью формулы (2.8). Если основной переход является разрешенным, то мы сильно проигрываем в величине  $P$ , и одновременно в эффекте, поскольку в  $\alpha l$  заметно выиграть нельзя. Если же основной переход является сильно запрещенным магнитно-дипольным, то выигрывая линейно по запрету в степени циркулярной поляризации, мы квадратично проигрываем в коэффициенте поглощения  $\alpha$ . А поскольку, по техническим причинам, длину пути  $l$  трудно, по-видимому, сделать больше, чем несколько метров, мы одновременно сильно проигрываем в величине угла поворота  $\psi$ .

Эксперимент на частоте, близкой к частоте М1 перехода между компонентами тонкой структуры, о котором шла речь выше, позволил бы обнаружить в слабом взаимодействии электрона с нуклоном корреляцию между спином электрона и его импульсом, т.е. взаимодействие лётонного аксиального тока с нуклонным

векторным. Не меньший интерес представляло бы обнаружение эффектов несохранения четности, зависящих от спина нуклона. Они вызываются взаимодействием лентонного векторного тока с нуклонным аксиальным. Эти эффекты могли бы проявиться в переходах между компонентами сверхтонкой структуры (СТС), которые также являются обычными М1 переходами и с этой точки зрения удобны для наблюдения вращения плоскости поляризации. К сожалению, эффекты несохранения четности здесь оказываются меньшими, чем в переходах между компонентами тонкой структуры. Из-за того, что эффект вызван взаимодействием электрона с одним неспаренным нуклоном, а не со всеми нуклонами ядра, как в случае оптических переходов, величина его оказывается, грубо говоря, в  $Z$  раз меньше, чем в оптическом диапазоне. Однако точности, достигнутые в современной технике сантиметровых волн, существенно выше, чем в оптике, так что измерение эффектов несохранения четности в радиодиапазоне представляется достаточно реальным <sup>\*</sup>).

### 3. Матричный элемент слабого взаимодействия в тяжелом атоме. Оператор изучения.

Обсуждаемый в нашей работе эффект возникает из-за несохраняющего пространственную четность взаимодействия электрона с ядром, которое обусловлено слабыми нейтральными токами. Мы предполагаем, что это взаимодействие локально и СР-инвариантно и, кроме того, не содержит производных от волновых функций. Наиболее общий вид такого Р-нечетного взаимодействия электрона с нуклонами следующий:

$$H = G_V \bar{N} \gamma_\mu N \bar{e} \gamma_\mu \gamma_5 e + G_A \bar{N} \gamma_\mu \gamma_5 N \bar{e} \gamma_\mu e \quad (3.1)$$

В силу эрмитовости гамильтониана  $H$  константы  $G_A$  и  $G_V$  ве-

<sup>\*</sup> Даже без использования модуляционной методики чувствительность в радиодиапазоне при измерении углов поворота плоскости поляризации достигает  $10^{15}$  рад [21-22]. В оптике модуляционная методика позволяет повысить чувствительность эллипсометрических измерений, во всяком случае, на три порядка величины.

ществены. Первое слагаемое является произведением нуклонного векторного тока на электронный аксиальный, второе — нуклонного аксиала на электронный вектор. Вместо  $G_V$  и  $G_A$  удобно ввести безразмерные константы  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ ,

$$G_V = - \frac{G \hbar^3}{c \sqrt{2}} \alpha_1, \quad G_A = \frac{G \hbar^3}{c \sqrt{2}} \alpha_2 \quad (3.2)$$

где  $G = 10^{-5} m_p^{-2}$  — фермиевская слабая константа,  $m_p$  — масса протона. Величины  $\alpha_i$  в настоящее время неизвестны. Цель обсуждаемых экспериментов как раз и состоит в их определении. В наиболее популярной в настоящее время модели Вайнберга [23] постоянные  $\alpha_i$  таковы (в дальнейшем все численные расчеты проводятся для определенности именно в этой модели):

$$\alpha_{1p} = 1/2 (1 - 4 \sin^2 \theta), \quad \alpha_{1n} = -1/2 \quad (3.3)$$

$$\alpha_{2p} = -\alpha_{2n} = -1/2 (1 - 4 \sin^2 \theta) \lambda$$

где  $\lambda \approx 1,25$  константа перенормировки аксиального тока, а угол смешивания  $\theta$  — параметр модели. Анализ в рамках модели Вайнберга нейтринных экспериментов по изучению нейтральных токов [24], [25] дает  $\sin^2 \theta \approx 0,32$ .

Считая нуклоны бесконечно тяжелыми, из формулы (3.1) легко получить выражение для несохраняющего четность взаимодействия электрона с ядром. Для тяжелых атомов, где  $Z \sim 1$ , релятивистские эффекты существенны. Поэтому взаимодействие запишем для релятивистского электрона:

$$H = - \frac{G \hbar^3}{\sqrt{2} c} [\rho(r) Z q \gamma_5 - \rho'(r) \vec{\Sigma} \vec{\alpha}] \quad (3.4)$$

$$Z q = \alpha_{1p} Z + \alpha_{1n} (A - Z) = Z (1 - \frac{A}{2Z} - 2 \sin^2 \theta)$$

Для таллия, свинца и висмута  $q \approx -0,9$ ,  $\rho(r)$  — плотность нуклонов в ядре, нормированная на 1 (мы пренебрегаем различием распределений протонов и нейтронов). В оболочечной модели, для случая, когда имеется один валентный (неспаренный) нуклон

$$\vec{\Sigma} = \alpha_2 \left( \begin{array}{c} \text{валентного} \\ \text{нуклона} \end{array} \right) \times \vec{\sigma} \left( \begin{array}{c} \text{валентного} \\ \text{нуклона} \end{array} \right)$$

$\rho(r)$  при этом — плотность неспаренного нуклона, так же, как и  $\rho(r)$ , нормированная на 1;  $Z$  и  $A$  — заряд и массовое число ядра;  $\gamma_5$  и  $\alpha$  — дираковские матрицы. В нерелятивистском пределе выражение (3.4) переходит в следующее:

$$H = \frac{G \hbar^3}{2\sqrt{2}mc} \left\{ Zq [\vec{\sigma}_e \vec{p}_e \delta(\vec{r}) + \delta(\vec{r}) \vec{\sigma}_e \vec{p}_e] - \right. \\ \left. - \sum [\vec{p}_e + i[\vec{p}_e \vec{\sigma}_e]] \delta(\vec{r}) + \delta(\vec{r}) (\vec{p}_e + i[\vec{p}_e \vec{\sigma}_e]) \right\} \quad (3.5)$$

$\vec{p}_e$  и  $\frac{1}{2}\vec{\sigma}_e$  — импульс и спин электрона. Ядро в этом случае можно считать точечным.

Нетрудно убедиться, что гамильтониан (3.5) смешивает только  $S_{1/2}$  и  $P_{1/2}$  состояния электрона. (Отметим, что (3.4) и (3.5) не смешивают  $S_{1/2}$  и  $P_{3/2}$  несмотря на то, что в этих гамильтонианах слагаемые, зависящие от спина ядра, являются векторами по электронным переменным). Гамильтониан (3.4) из-за конечного размера ядра примешивает и более высокие волны ( $d, f, \dots$ ), однако соответствующие матричные элементы малы и ими вполне можно пренебречь. Таким образом, нам необходимо вычислить только матричный элемент  $\langle S_{1/2} | H | P_{1/2} \rangle$ .

Для вычисления этого матричного элемента понадобятся значения волновых функций электрона на ядре. Релятивистская волновая функция электрона с полным моментом  $j$ , орбитальным моментом  $l$  и проекцией полного момента на ось  $Z, m$  имеет следующий вид

$$u_{njl} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} g_{njl}(r) \Omega_{jlm} \\ i f_{njl}(r) \Omega_{j, 2j-l, m} \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

Здесь  $\Omega_{jlm}$  — шаровой спинор; что же касается радиальных волновых функций, то на расстояниях  $r \ll a Z^{-1/3}$  полем других электронов, а также полной энергией, можно пренебречь по сравнению с потенциалом ядра, и, следовательно, в этой области функции  $g(r)$

и  $f(r)$  удовлетворяют уравнениям:

$$\frac{dg}{dr} + \frac{\alpha}{r} g - (2m - u(r))g = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{df}{dr} - \frac{\alpha}{r} f - u(r)f = 0$$

где  $\alpha = (-1)^{j+\frac{1}{2}-l} \cdot (j+\frac{1}{2}) \quad (3.8)$

$u(r)$  — потенциальная энергия электрона в поле ядра. Предположим теперь, что заряд ядра равномерно распределен по шару радиуса  $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$  см: \*)

$$\rho(r) = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi r_0^3} \theta(r_0 - r) \quad (3.9)$$

При этом, очевидно,

$$u(r) = \begin{cases} -\frac{Z\alpha}{2r_0} \left(3 - \frac{r^2}{r_0^2}\right) & \text{при } r \leq r_0 \\ -\frac{Z\alpha}{r} & \text{при } r \geq r_0 \end{cases} \quad (3.10)$$

Внутри ядра массой электрона в уравнениях (3.7) можно пренебречь. Решение в этой области удобно строить в виде разложения по степеням  $r/r_0$ . Принимая во внимание то, что  $g$  и  $f$  должны быть регулярными при  $r=0$ , непосредственной подстановкой в (3.7) находим

$$\begin{aligned} g_{\frac{1}{2},0} &= A_s \left[ 2 - \frac{3}{8} Z^2 \alpha^2 \frac{r^2}{r_0^2} \left(1 - \frac{4}{15} \frac{r^2}{r_0^2}\right) \right] \\ f_{\frac{1}{2},0} &= -A_s \frac{Z\alpha}{2} \frac{r^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{5} \frac{r^2}{r_0^2}\right) \\ g_{\frac{3}{2},1} &= A_p \frac{Z\alpha}{2} \frac{r^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{5} \frac{r^2}{r_0^2}\right) \\ f_{\frac{3}{2},1} &= A_p \left[ 2 - \frac{3}{8} Z^2 \alpha^2 \frac{r^2}{r_0^2} \left(1 - \frac{4}{15} \frac{r^2}{r_0^2}\right) \right] \end{aligned} \quad (3.11)$$

\*) Такое приближение оправдано тем, что, как будет видно из дальнейшего, интересующий нас матричный элемент гамильтониана (3.4) сравнительно слабо зависит от "радиуса" ядра  $r_0$ .

Ввиду того, что коэффициенты разложения быстро падают с ростом степени  $r/r_0$ , выписанные полиномы даже при  $r=r_0$  в обоих случаях аппроксимируют решение с точностью порядка нескольких процентов.

Вне ядра (но при  $r \ll a z^{-1/3}$ ) волновые функции выражаются через функции Бесселя:

$$g_{n\ell e}(r) = C_{n\ell e} \left[ (\alpha + \gamma) J_{2\gamma}(x) - \frac{x}{2} J_{2\gamma-1}(x) \right] + C'_{n\ell e} \left[ (\alpha - \gamma) J_{-2\gamma}(x) - \frac{x}{2} J_{-2\gamma-1}(x) \right] \quad (3.12)$$

$$f_{n\ell e}(r) = C_{n\ell e} z^\alpha J_{2\gamma}(x) + C'_{n\ell e} z^\alpha J_{-2\gamma}(x),$$

$$x = \sqrt{\frac{8zr}{a}}, \quad \gamma = \sqrt{\alpha^2 - z^2 \alpha^2}$$

Сшивая (3.11) с (3.12) в точке  $r=r_0$  и пользуясь разложением функций Бесселя при  $x \ll 1$ , найдем

$$C_{n\frac{1}{2}0} = -\frac{2_0 \Gamma(1+2\gamma)}{2\chi_0^\gamma} \left(1 + \frac{z^2 \alpha^2}{40}\right) A_s \quad (3.13)$$

$$C_{n\frac{1}{2}1} = \frac{2_0 \Gamma(1+2\gamma)}{z^2 \chi_0^\gamma} \left(1 - \frac{9}{40} z^2 \alpha^2\right) A_p$$

$$\chi_0 = \left(\frac{8zr_0}{a}\right)^{1/2}$$

Мы не выписываем аналогичные выражения для  $C'_{n\ell e}$ , так как они много меньше  $C_{n\ell e}$  ( $C'_{n\ell e} \sim \chi_0^\delta \ll C_{n\ell e} \sim \chi_0^{-\delta}$ ) и поэтому для дальнейшего несущественны.

Определим теперь нормировочную константу  $C_{n\ell e}$ . Заметим для этого, что при  $r \gg a z^{-1}$  радиальная функция  $g(r)$  должна переходить в обычное квазиклассическое решение нерелятивистского уравнения Шредингера

$$\chi_{n\ell e}(r) = \frac{v_{n\ell e}}{\sqrt{k(r)}} \sin\left(\int_{r_1}^r dr' k(r') + \varphi\right) \quad (3.14)$$

Здесь  $k^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E_{n\ell e} - u(r) - \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{r^2} \right]$ ,  $r_1$  — точка

поворота,  $\varphi$  — постоянная фаза. Константу  $v_{n\ell e}$  нетрудно найти, если учесть, что основной вклад в нормировочный интеграл даст квазиклассическая область, лежащая между двумя точками поворота  $r_1$  и  $r_2$ , так что

$$v_{n\ell e}^2 \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{k(r)} \sin^2\left(\int_{r_1}^r dr' k(r') + \varphi\right) \approx \frac{v_{n\ell e}^2}{2} \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{k(r)} = 1 \quad (3.15)$$

Дифференцируя по  $n_r$  уравнение для боровского правила квантования радиального движения

$$\int_{r_1}^{r_2} dr k(r) = \pi(n_r + \beta) \quad (3.16)$$

и учитывая, что  $k(r_{1,2}) = 0$ , находим [Ж]

$$\frac{m}{\hbar^2} \frac{dE_{n\ell e}}{dn_r} \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{k(r)} = \pi \quad (3.17)$$

Отсюда

$$v_{n\ell e}^2 = \frac{2m}{\pi \hbar^2} \frac{dE_{n\ell e}}{dn_r} = \frac{2}{\pi v^3} \frac{1}{\alpha^2} \left(1 - \frac{d\beta}{dn_r}\right); \quad (3.18)$$

здесь использовано феноменологическое выражение для энергии внешнего электрона

$$E_{n\ell e} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 v^2} = -\frac{Ry}{v^2} \quad (3.19)$$

где  $v$  — эффективное главное квантовое число;  $v = n_r + l + 1 - \sigma_\ell = n - \sigma_\ell$ ;

$\sigma_\ell$  — так называемая поправка Ридберга — слабо зависит от  $n_r$  при фиксированном  $l$ . Сравнивая (3.12) с (3.14) при  $az^{-1} \ll r \ll az^{-1/3}$ , видим, что

$$C_{n\ell e} = \frac{2}{|x|} \left(\frac{\pi a}{2}\right)^{1/2} v_{n\ell e} = \left(\frac{1}{av^3}\right)^{1/2} \frac{2}{|x|} \left(1 - \frac{d\sigma_\ell}{dn_r}\right)^{1/2} \quad (3.20)$$

и отсюда с помощью (3.13), находим  $A_s$  и  $A_p$ :

$$A_s = \frac{2\chi_0^\delta}{2_0 \Gamma(1+2\gamma)} \sqrt{\frac{1}{av^3}} \left(1 - \frac{z^2 \alpha^2}{40}\right) \left(1 - \frac{d\sigma_s}{dn_r}\right)^{1/2} \quad (3.21)$$

$$A_p = \frac{z\alpha \chi_0^\delta}{2_0 \Gamma(1+2\gamma)} \sqrt{\frac{1}{av^3}} \left(1 + \frac{9}{40} z^2 \alpha^2\right) \left(1 - \frac{d\sigma_p}{dn_r}\right)^{1/2}$$



Численные расчеты (см. ниже), которые позволяют вычислить плотность волновой функции в нуле, не апеллируя к квазиклассике, показали, что формулы (3.12), (3.20) и (3.21) правильно определяют волновую функцию на малых расстояниях, если в качестве эффективного главного квантового числа  $6p$  электрона использовать не значение  $\nu_{6p}$ , полученное после усреднения по тонкой структуре, а соответствующее  $\nu_{6pj}$ , ( $E_{npj} = -Ry/\nu_{npj}^2$ ); при этом поправку Ридберга учитывать не следует.

Таким образом, мы полностью определили волновые функции электрона внутри ядра ( (3.6), (3.11) ). Используя эти выражения, вычисляем матричный элемент <sup>\*</sup>

$$\langle S_{1/2} | H | P_{1/2} \rangle = i \frac{G m^2 \alpha^2 Z^2 R}{\pi \sqrt{2}} (\nu_s \nu_p)^{-3/2} \frac{m e^4}{2 \hbar^2} \times \left\{ Z q + g_I \frac{2\gamma+1}{3} [F(F+1) - I(I+1) - \frac{3}{4}] \right\} \quad (3.22)$$

здесь  $F$  - полный момент атома,  $g_I$  - коэффициент пропорциональности между ядерными матричными элементами оператора  $\sum$  и спина ядра  $\bar{I}$ ,  $R$  - фактор релятивистского усиления, определенный так, что  $R \rightarrow 1$  при  $Z\alpha \rightarrow 0$

$$R = \frac{4 \cdot \left( \frac{2r_0 Z}{a} \right)^{2\gamma-2}}{[\Gamma(2\gamma+1)]^2} \left( 1 - \frac{2}{35} Z^2 \alpha^2 \right) \quad (3.23)$$

Этот фактор быстро растет при больших  $Z$ , меняясь от 2.8 для цезия ( $Z = 55$ ) до 8.5, 8.9, 9.4 для таллия, свинца и висмута ( $Z = 81, 82, 83$ ). Отметим, что более грубый учет конечных размеров ядра, состоящий в том, что плотности  $\rho$  и  $\rho'$  (см.

<sup>\*</sup>) Относительно  $g'(r)$  мы предполагаем, что  $\rho'(r) = \rho(r) = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi r_0^3} \theta(r_0 - r)$

Можно было бы, конечно, более аккуратно учесть волновую функцию валентного нуклона. Однако это вряд ли имеет смысл, поскольку все дальнейшие расчеты, скорее всего, не могут претендовать на точность, лучшую, чем 15-20%.

(3.4) ) заменяются  $\delta(\vec{r})$ , а расходимости, появляющиеся при вычислении матричного элемента устраняются введением  $\Gamma_0$ , приводит к выражению

$$R = \frac{4 \left( \frac{2Zr_0}{a} \right)^{2\gamma-2}}{[\Gamma(2\gamma+1)]^2}, \quad (3.23a)$$

которое практически совпадает с (3.23) (Малость численного коэффициента при  $Z^2 \alpha^2$  в (3.23) позволяет вообще пренебречь этим слагаемым по сравнению с единицей. Вносимая таким образом погрешность не превышает 2%).

Заметим, что если мы рассматриваем переход между компонентами тонкой структуры, второе слагаемое в фигурных скобках в формуле (3.22) несущественно, так как первый член пропорционален  $Z$  и поэтому доминирует. Таким образом в этом случае эффект определяется произведением электронного аксиального тока на нуклонный векторный (см. (3.1)). Если же рассмотреть переходы внутри светонной структуры, то здесь, наоборот, работает произведение электронного вектора на нуклонный аксиал, поскольку все члены в формуле (3.22), не зависящие от  $F$ , вклада в эффект не дают.

В дальнейшем нам будет удобно пользоваться представлением вторичного квантования. Гамильтониан (3.4) в этом представлении выглядит так:

$$H = \sum_{n, n'} \langle S_{1/2} | H | P_{1/2} \rangle \sum_m (\hat{a}_{n, m}^\dagger \hat{b}_{n', m} - \hat{b}_{n', m}^\dagger \hat{a}_{n, m}) \quad (3.24)$$

Здесь  $\hat{a}_{n, m}, \hat{a}_{n, m}^\dagger$  - операторы рождения и уничтожения  $n S_{1/2}$  электрона с проекцией полного момента  $m$ .  $\hat{b}_{n', m}, \hat{b}_{n', m}^\dagger$  - аналогичные операторы для  $n' P_{1/2}$  электрона. Все они удовлетворяют обычным соотношениям антикоммутизации.

Рассмотрим гамильтониан электромагнитного взаимодействия. В данной работе мы имеем дело только с  $M1, E1$  и  $E2$  переходами. Взаимодействие электрона с излучением в этом случае имеет вид:

$$H_{em} = -i\sqrt{2\pi\omega} \left\{ \frac{e}{2m} (\vec{l} + 2\vec{s}) [\vec{n} \cdot \vec{e}] + e \vec{r} \cdot \vec{e} + \frac{i e \omega}{6} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (3r_\alpha r_\beta - \delta_{\alpha\beta} r^2) \right\} \quad (3.25)$$

$\vec{r}, \vec{L}$  и  $\vec{S}$  - координата, орбитальный момент и спин электрона;  $\vec{n}$  и  $\vec{e}$  - направление и вектор поляризации излучения. Будем рассматривать процесс поглощения фотона летящего вдоль оси  $Z$ , т.е.,  $\vec{n} = (0, 0, 1)$ . Вектора поляризации, отвечающие положительной и отрицательной спиральностям, таковы:

$$e^{\pm} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\pm 1, +i, 0) \quad (3.26)$$

В этом случае (3.25) переходит в следующее выражение

$$H_{em}^{\pm} = \sqrt{2\pi\omega} \left( \frac{e}{2m} \frac{1}{\sqrt{2}} (j_{\pm} + s_{\pm}) - i e r_{\pm} + \frac{e\omega}{2} z r_{\pm} \right) \quad (3.27)$$

здесь  $\vec{j} = \vec{L} + \vec{S}$ ,  $j_{\pm} = j_1 \pm i j_2$ , а  $r_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mp x - i y)$ . В дальнейшем мы для определенности будем рассматривать взаимодействие с фотоном положительной спиральности ( $H^+$ ), имея в виду, что ответ для отрицательной спиральности получается сменой знака перед интерференционным  $M \times E1$  слагаемым. (Фактически это и есть рассматриваемый в работе эффект, подробнее см. во введении). Учитывая, что нас интересует  $E1$  переход только между  $S$  и  $P$  электронами, а  $E2$  - между  $P$  - электронами, не представляет труда записать  $H_{E1}$  и  $H_{E2}$  в представлении вторичного квантования (для  $H_{M1}$  переход к вторичному квантованию нецелесообразен, поскольку это только усложняет вычисления). В этом представлении  $H_{em}$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} H_{em}^+ &= \sqrt{2\pi\omega} (\mp M^{\pm} - i D^{\pm} + Q^{\pm}) \\ M^{\pm} &= \mp \frac{e}{2m} \frac{1}{\sqrt{2}} (j_{\pm} + s_{\pm}) \\ D^+ &= e \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ z_{nn'} \left[ \frac{1}{\sqrt{3}} a_{1/2}^+ c_{-1/2} - \sqrt{\frac{2}{3}} c_{1/2}^+ a_{-1/2} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + a_{-1/2}^+ c_{-3/2} - c_{3/2}^+ a_{1/2} \right] - \tilde{z}_{nn'} \left[ a_{1/2}^+ b_{-1/2} + b_{1/2}^+ a_{-1/2} \right] \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \right\} \quad (3.28) \\ Q^+ &= -e\omega z_{nn'}^2 \frac{1}{10} \left\{ \sqrt{\frac{2}{3}} c_{3/2}^+ c_{1/2} - \frac{1}{\sqrt{3}} c_{3/2}^+ b_{1/2} + b_{1/2}^+ c_{-1/2} + \right. \\ &\quad \left. + c_{1/2}^+ b_{-1/2} - \sqrt{\frac{2}{3}} c_{-1/2}^+ c_{-3/2} - \frac{1}{\sqrt{3}} b_{-1/2}^+ c_{-3/2} \right\} \end{aligned}$$

В дополнение к ранее введенным операторам  $a_m, a_m^+$  и  $b_m, b_m^+$  мы ввели оператор уничтожения электрона с моментом  $3/2$  и проекцией  $m = C_m$  (и соответственно  $C_m^+$ ).  $r_{kn}$  и  $r_{kn}^2$  - матричные элементы  $r$  и  $r^2$  между радиальными волновыми функциями начального и конечного состояний:

$$r_{kn} = \int_0^{\infty} R_{kP_{3/2}}(r) R_{ns}(r) r^3 dr; \quad \tilde{z}_{kn} = \int_0^{\infty} R_{kP_{3/2}}(z) R_{ns}(z) z^3 dz. \quad (3.29)$$

$$r_{kn}^2 = \int_0^{\infty} R_{kP}(r) R_{ns}(r) r^4 dr$$

Для краткости записи, мы опускаем в операторах  $a, b$  и  $c$  индексы  $n$  и  $n'$ , однако их несложно восстановить - всем операторам с крестом соответствует конечное состояние, т.е.  $n'$ , а без креста - начальное, т.е.  $n$ . В формулах (3.28) подразумевается суммирование по  $n$  и  $n'$ .

#### 4. Таллий

Начнем с расчета степени циркулярной поляризации света в таллии. Основное состояние таллия -  $P_{1/2}$ , относится к конфигурации  $6s^2 6p$ . Нас интересует переход в состояние  $P_{3/2}$  той же конфигурации (от наличия сверхтонкого расщепления уровней мы пока отвлекаемся).

Приведенный матричный элемент  $M$  перехода (см. (3.28)) между термами  $P_{1/2}$  и  $P_{3/2}$  находится элементарно. Он равен

$$\langle P_{3/2} || M || P_{1/2} \rangle = -\frac{2}{\sqrt{3}} \mu \quad (4.1)$$

Этот переход в таллии может идти также, как  $E2$ . (Заметим что амплитуда  $E2$  перехода всегда входит в ответ квадратично, поскольку  $E2$  не интерферирует с  $E1$  и  $M1$  из-за разной мультипольности). Численный расчет дает следующее значение матричного элемента квадрата радиуса валентного электрона:  $\langle P_{3/2} || r^2 || P_{1/2} \rangle = 19 a^2$  ( $a$  - боровский радиус). Отсюда нетрудно получить, что квадрупольное поглощение в таллии составляет лишь 6%.

Учтем теперь, что к состояниям, переход между которыми мы рассматриваем, примешаны уровни противоположной четности. Ближайшие такие уровни относятся к конфигурациям  $6s^2 7s, 8s, 9s, 10s, \dots$ . Расчет их вклада в эффект наиболее прост и поэтому мы сделаем его в первую очередь. Через операторы  $b^+$  и  $c^+$  состояния  $P_{1/2}$  и  $P_{3/2}$  из  $6s^2 6p$  выражаются, очевидно, так:

$$|P_{1/2}, j_z = m\rangle = b_{6,m}^+ |\Phi_0\rangle \quad (4.2)$$

$$|P_{3/2}, j_z = m\rangle = c_{6,m}^+ |\Phi_0\rangle$$

где  $|\Phi_0\rangle$  волновая функция остова (все электроны, кроме  $6p$ ). Аналогично, для  $S_{1/2}$  из  $6s^2 n S_{1/2}$

$$|S_{1/2}, j_z = m\rangle = a_n^+ |\Phi_0\rangle \quad (4.3)$$

Эффективные главные квантовые числа  $S$  и  $p$  состояний валентного электрона определяются из спектра таллия [27]:

$$V_{6p_{1/2}} = 1,49; V_{7s} = 2,19; V_{8s} = 3,22; V_{9s} = 4,24; V_{10s} = 5,26$$

Простой расчет с использованием (3.24), (4.2) и (4.3) приводит теперь к следующему результату для волновой функции основного состояния, содержащей примесь состояний

$$|6P_{1/2}\rangle' = |6P_{1/2}\rangle + \sum_{n>7} \alpha_n |n S_{1/2}\rangle \quad (4.4)$$

$$\alpha_7 = i \cdot 1 \cdot 10 \cdot 10^{-10}, \alpha_8 = i \cdot 0,42 \cdot 10^{-10}, \alpha_9 = i \cdot 0,25 \cdot 10^{-10},$$

$$\alpha_{10} = i \cdot 0,14 \cdot 10^{-10}.$$

К верхнему уровню состояния  $n S_{1/2}$  не примешиваются. Теперь, воспользовавшись формулами (3.28), (4.3), (4.2), (4.5), вычислим приведенный матричный элемент  $\bar{D}$  между "правильными" волновыми функциями:

$$\langle 6P_{1/2} || \bar{D} || 6P_{1/2}' \rangle = \sum_{n>7} \alpha_n \langle 6P_{1/2} || \bar{D} || n S_{1/2} \rangle = +e \sum_{n>7} \alpha_n Z_n \quad (4.5)$$

Для определения вклада  $n S$  состояний в циркулярную поляризацию остаётся найти матричные элементы  $Z_n$  между  $6p$  и  $n S$  радиальными волновыми функциями. Модули радиальных интегралов можно определить из экспериментальных данных по  $f_n$  в таллии [28-29].

Известно, что приведенный матричный элемент от электрического дипольного момента  $\bar{D}$  следующим образом связан с силой осциллятора перехода  $a \rightarrow b$

$$f_{ba} = \frac{1}{3} \frac{\omega}{\omega_0} \frac{1}{2J_{нижн} + 1} \left| \frac{\langle b | \bar{D} || a \rangle}{ea} \right|^2, \quad \omega_0 = \frac{me^4}{2\hbar^2} \quad (4.6)$$

Для переходов  $6p_{1/2} \rightarrow n S$  отсюда получаем

$$f_n^2 \equiv (Z_n / a)^2 = 9 \frac{\omega_0}{\omega_{6n}} f_n$$

Радиальные интегралы составляют:

$$\rho_7 = 2,82; \rho_8 = 0,66; \rho_9 = 0,36; \rho_{10} = 0,28.$$

Близкие значения дает также численный расчет [30], из которого определены и знаки этих интегралов.

Элементарный расчет приводит к следующему значению матричного элемента (4.5):

$$\langle 6P_{3/2} || \bar{D} || 6P_{1/2} \rangle = i \cdot 0,40 \cdot 10^{-9} ea.$$

Численный расчет показывает, что более высокими состояниями дискретного спектра можно пренебречь, вклад же непрерывного спектра в  $\langle 6P_{3/2} || \bar{D} || 6P_{1/2} \rangle$  оказывается равным  $0,1 \cdot 10^{-9} ea$ . Таким образом, полный вклад возбуждений  $6p$  электрона в циркулярную поляризацию составляет

$$P' = 2,4 \cdot 10^{-7} \left( \rho' = 2Jm \frac{\langle 6P_{3/2} || \bar{D} || 6P_{1/2} \rangle}{\langle 6P_{3/2} || M || 6P_{1/2} \rangle} \right) \quad (4.7)$$

Наряду с  $6s^2 n S$  большой вклад в эффект дают состояния, относящиеся к конфигурации  $6s 6p^2$  и возникающие при возбуждении  $6s$  электрона. Все они, кроме одного, обладают положительной энергией и являются, таким образом, резонансами в непрерывном спектре.

Волновые функции этих состояний рассчитываются в приближении промежуточной связи. Матричные элементы спин-орбитального и несферического кулоновского взаимодействия между электронами для конфигурации  $S P^2$  приведены, в частности, в книге [31]. Решение соответствующих секулярных уравнений и последующее сравнение с экспериментально известным спектром этих со-

стояний [27, 39] приводит к следующим значениям слэтеровских интегралов  $F^2(1,1)$  и  $G^1(0,1)$  и параметра спин-орбитального взаимодействия  $\zeta$  (используются обозначения книги [31]):

$$\frac{1}{5}F^2(1,1) = 2100 \text{ см}^{-1}, \quad \frac{1}{3}G^1(0,1) = 8800 \text{ см}^{-1}, \quad \zeta = 5500 \text{ см}^{-1} \quad (4.8)$$

Разложение точных волновых функций по рэссель-саундерсовским выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} |^2S'_{1/2}\rangle &= 0,444|^2S_{1/2}\rangle + 0,894|^2P_{1/2}\rangle - 0,056|^4P_{1/2}\rangle, & 76804 \\ |^2P'_{1/2}\rangle &= 0,846|^2S_{1/2}\rangle - 0,439|^2P_{1/2}\rangle - 0,302|^4P_{1/2}\rangle, & 67150 \\ |^4P'_{1/2}\rangle &= 0,295|^2S_{1/2}\rangle - 0,087|^2P_{1/2}\rangle + 0,952|^4P_{1/2}\rangle, & 45220 \\ |^2P'_{3/2}\rangle &= 0,977|^2P_{3/2}\rangle - 0,075|^4P_{3/2}\rangle + 0,201|^2D_{3/2}\rangle, & 81120 \\ |^4P'_{3/2}\rangle &= 0,055|^2P_{3/2}\rangle + 0,993|^4P_{3/2}\rangle + 0,103|^2D_{3/2}\rangle, & 49826 \\ |^2D'_{3/2}\rangle &= -0,207|^2P_{3/2}\rangle - 0,089|^4P_{3/2}\rangle + 0,974|^2D_{3/2}\rangle, & 62000 \\ |^4P'_{5/2}\rangle &= 0,933|^4P_{5/2}\rangle - 0,359|^2D_{5/2}\rangle, & 53050 \\ |^2D'_{5/2}\rangle &= 0,359|^4P_{5/2}\rangle + 0,933|^2D_{5/2}\rangle, & 64740 \end{aligned} \quad (4.9)$$

Рядом с волновой функцией указывается энергия соответствующего термина, отсчитываемая от основного состояния. Положение термов  $|^2P'_{3/2}\rangle$  и  $|^2D'_{5/2}\rangle$  экспериментально неизвестно, для них приводятся расчетные значения энергий. Центр полосы  $6s6p^2$  (т.е., положение рассматриваемых термов при  $F^2(1,1) = G^1(0,1) = \zeta = 0$ )  $E_0(6s6p^2) = 71500 \text{ см}^{-1}$ .

Эффективные главные квантовые числа  $6p_{1/2}$  электрона в конфигурации  $6s6p^2$  ( $\nu'_{6p_{1/2}}$ ) и  $6s$  электрона в конфигурации  $6s^26p$  ( $\nu_{6s}$ ), которые необходимы для расчета смешивания, можно определить, считая соответствующий электрон добавленным к  $6s6p$  конфигурации иона  $Tl II$ . Поскольку  $6s6p$  состояния в  $Tl II$  расщеплены, необходимо знать центр этой полосы. Стандартный расчет (см., напр. [31]) по экспериментально известному спектру дает для энергии центра, отсчитанной от основного состояния

$Tl I : E_0(6s6p) = 115300 \text{ см}^{-1}$ . Воспользовавшись определением):

$$\frac{\omega_0}{\nu_{6s}} = E_0(6s6pTl II) - E_0(6s^26pTl I) = 110100 \text{ см}^{-1},$$

$$\frac{\omega_0}{\nu_{6p_{1/2}}} = E_0(6s6pTl II) - E_0(6s6p^2Tl I) + \zeta(6s6p^2Tl I) = 49300 \text{ см}^{-1},$$

получим

$$\nu_{6s}(6s^26p) = 1.00, \quad \nu_{6p_{1/2}}(6s6p^2) = 1.49 \quad (4.10)$$

Отметим следующее обстоятельство: величины  $\nu_{6p_{1/2}}(6s^26p) = 1.49$  (см. выше) и  $\nu_{6s}(6s6p^2) = 0.99$  (для определения  $\nu_{6s}(6s6p^2)$  нужно воспользоваться данными по уровням конфигурации  $6p^2$  иона  $Tl II$  [27]) практически совпадают с (4.10). Такое совпадение  $\nu$  для  $6p$  и  $6s$  электронов в состояниях  $6s^26p$  и  $6s6p^2$  представляется вполне естественным, так как экранирующие свойства  $nS$  и  $nP$  электронов, грубо говоря, одинаковы.

Прежде чем перейти к дальнейшим вычислениям, перепишем волновые функции (4.9) в  $jj$  схеме. Непосредственное перераспределение рэссель-саундерсовских волновых функций по  $jj$  функциям дает:

$$\begin{aligned} |^2S'_{1/2}\rangle &= -0,202 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right)_{1/2} + 0,698 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right)_{1/2} + 0,687 \left( \cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_{1/2} \\ |^2P'_{1/2}\rangle &= 0,494 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right)_{1/2} - 0,534 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right)_{1/2} + 0,402 \left( \cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_{1/2} \\ |^4P'_{1/2}\rangle &= 0,846 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right)_{1/2} + 0,479 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right)_{1/2} - 0,237 \left( \cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_{1/2} \\ |^2P'_{3/2}\rangle &= -0,330 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} (1) \right)_{3/2} - 0,368 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} (2) \right)_{3/2} + 0,869 \left( \cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_{3/2} \\ |^4P'_{3/2}\rangle &= -0,929 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} (1) \right)_{3/2} + 0,289 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} (2) \right)_{3/2} - 0,231 \left( \cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_{3/2} \\ |^2D'_{3/2}\rangle &= 0,166 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} (1) \right)_{3/2} + 0,884 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} (2) \right)_{3/2} + 0,438 \left( \cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_{3/2} \\ |^4P'_{5/2}\rangle &= -0,831 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right)_{5/2} + 0,555 \left( \cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_{5/2} \\ |^2D'_{5/2}\rangle &= 0,555 \left( \cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right)_{5/2} + 0,831 \left( \cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_{5/2} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Выражение  $(\cdot j_1 j_2)_{J_2}^{J_2}$  обозначает нормированную волновую функцию одного  $S$  и двух  $p$  (с моментами  $j_1$  и  $j_2$ ) электронов, причем полный момент всех трех электронов равен  $J$  (в формулах (4.II) мы для краткости записи опускаем  $J_2$ ). Функции  $(\cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2}(1))_{3/2}$  и  $(\cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2}(2))_{3/2}$  относятся к состояниям, в которых моменты двух  $p$  электронов складываются в 1 и 2 соответственно. В представлении вторичного квантования  $(\cdot j_1 j_2)_{J_2}^{J_2}$  выглядят следующим образом (ограничиваемся максимальными  $J_2$ ):

$$\begin{aligned} (\cdot \frac{1}{2} \frac{1}{2})_{1/2}^{1/2} &= a_{1/2}^+ b_{1/2}^+ b_{-1/2}^+ |\Psi_0\rangle \\ (\cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2})_{1/2}^{1/2} &= \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} a_{-1/2}^+ \left( \frac{1}{\sqrt{3}} b_{1/2}^+ c_{1/2}^+ - b_{-1/2}^+ c_{3/2}^+ \right) + \frac{1}{\sqrt{6}} a_{1/2}^+ \left( b_{-1/2}^+ c_{1/2}^+ - b_{1/2}^+ c_{-1/2}^+ \right) \right\} |\Psi_0\rangle \\ (\cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2})_{1/2}^{1/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} a_{1/2}^+ (c_{3/2}^+ c_{-3/2}^+ - c_{1/2}^+ c_{-1/2}^+) |\Psi_0\rangle \\ (\cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2}(1))_{3/2}^{3/2} &= \frac{1}{2} a_{1/2}^+ (b_{1/2}^+ c_{1/2}^+ - \sqrt{3} b_{-1/2}^+ c_{3/2}^+) |\Psi_0\rangle \\ (\cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2}(2))_{3/2}^{3/2} &= \frac{2}{\sqrt{5}} \left\{ \frac{1}{4} a_{1/2}^+ (b_{-1/2}^+ c_{3/2}^+ + \sqrt{3} b_{1/2}^+ c_{1/2}^+) - a_{-1/2}^+ b_{1/2}^+ c_{3/2}^+ \right\} |\Psi_0\rangle \\ (\cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2})_{3/2}^{3/2} &= \frac{1}{\sqrt{5}} \left( 2a_{-1/2}^+ c_{3/2}^+ c_{1/2}^+ - a_{1/2}^+ c_{3/2}^+ c_{1/2}^+ \right) |\Psi_0\rangle \\ (\cdot \frac{1}{2} \frac{3}{2})_{5/2}^{5/2} &= -a_{1/2}^+ b_{1/2}^+ c_{3/2}^+ |\Psi_0\rangle \\ (\cdot \frac{3}{2} \frac{3}{2})_{5/2}^{5/2} &= a_{1/2}^+ c_{3/2}^+ c_{1/2}^+ |\Psi_0\rangle \end{aligned} \quad (4.I2)$$

Состояние  $|\Psi_0\rangle$  связано с введенным выше  $|\Phi_0\rangle$  (см. (4.2), (4.3)) очевидным соотношением  $|\Phi_0\rangle = a_{1/2}^+ a_{-1/2}^+ |\Psi_0\rangle$ . В этих же обозначениях состояния конфигурации  $6s^2 6p$ , переход между которыми

мы рассматриваем, выглядят так (ср. (4.2)):

$$|6s^2 6p_{1/2}, J_2 = m\rangle = b_m^+ a_{1/2}^+ a_{-1/2}^+ |\Psi_0\rangle \quad (4.I3)$$

$$|6s^2 6p_{3/2}, J_2 = m\rangle = c_m^+ a_{1/2}^+ a_{-1/2}^+ |\Psi_0\rangle$$

Теперь мы имеем все необходимое, чтобы вычислить примесь конфигурации  $6s 6p^2$  к состояниям (4.I3). Воспользовавшись формулами (3.24), (4.I0)–(4.I3), после довольно громоздких расчетов получим:

$$|\text{нижн}\rangle = |^2p_{1/2}\rangle_{6s^2 6p} + i \cdot 10^{-10} \left( -0.26 |^2S'_{1/2}\rangle + 0.72 |^2p'_{1/2}\rangle + 1.83 |^4p'_{1/2}\rangle \right)_{6s 6p^2} \quad (4.I4)$$

$$|\text{верхн}\rangle = |^2p_{3/2}\rangle_{6s^2 6p} + i \cdot 10^{-10} \left( 0.17 |^2p'_{3/2}\rangle - 2.62 |^4p'_{3/2}\rangle - 1.52 |^2D'_{3/2}\rangle \right)_{6s 6p^2}$$

Найдем теперь радиальные интегралы  $Z_c$  и  $\tilde{Z}_c$  (см. (3.29)), которые определяют амплитуды ЕІ переходов  $6s 6p^2 \rightarrow 6s^2 6p$ . Воспользуемся для этого данными по силам осцилляторов переходов  $6s^2 6p^2 p'_{1/2} \rightarrow 6s 6p^2 \ ^2D'_{3/2}$  и  $6s^2 6p^2 p'_{1/2} \rightarrow 6s 6p^2 \ ^4p'_{1/2}$ , полученными в экспериментах по фотоионизации галлия [33, 34]:

$$f_1 = 0.39, \quad f_2 = 0.0011 \quad (4.I5)$$

Согласно численным расчетам [30],  $Z_c \approx \tilde{Z}_c$ . С учетом этого условия, находим по формулам (3.28), (4.II) – (4.I3)

$$\begin{aligned} | \langle 6s 6p^2 \ ^2D'_{3/2} \| D \| 6s^2 6p^2 p'_{1/2} \rangle |^2 &= 1.43 \cdot Z_c^2 \\ | \langle 6s 6p^2 \ ^4p'_{1/2} \| D \| 6s^2 6p^2 p'_{1/2} \rangle |^2 &= 0.004 \cdot Z_c^2 \end{aligned} \quad (4.I6)$$

Сравнивая (4.I5), (4.I6) и (4.6), получим  $Z_c \approx -1.8a$ . Заметим, что численный расчет [30] приводит к заметно большему значению  $|Z_c|$  ( $Z_c = -2.9$ ). Однако, поскольку он завышает и  $\nu_{6s}$  (1,08 вместо экспериментального 1,00), а величина  $|Z_c|$  быстро растет с  $\nu_{6s}$ , мы предпочитаем полагаться на экспериментальные данные, заимствуя из численного расчета лишь знак матричного элемента.

\*) Нам не удалось установить соответствие между значениями сил осцилляторов и радиальных интегралов, приведенными в [34]. Мы используем силы осцилляторов, поскольку значение  $f_1 = 0.39$  заведомо соответствует данным по сечению, приведенным в [33], с учетом поправки на неточность в определении плотности паров, указанной в [34].

Теперь по формулам (3.28), (4.II) - (4.I3) найдем приведенный матричный элемент между состояниями (4.I4)

$$\langle \text{верхн} || D || \text{нижн} \rangle = i \cdot 0.36 \cdot 10^{-9} e a \quad (4.I7)$$

и вклад состояний  $6s6p^2$  в циркулярную поляризацию  $p'' = 1.7 \cdot 10^{-7}$ . Вклад более глубоких возбуждений составляет, по численным расчетам, менее процента. Полная циркулярная поляризация излучения в переходе  $6p_{3/2} \rightarrow 6p_{1/2}$  в таллии равна, таким образом,

$$p = p' + p'' = 4.1 \cdot 10^{-7} \quad (4.I8)$$

Проведенный нами прямой расчет  $p''$  довольно громоздок. Его можно существенно упростить, если пренебречь расщеплением термов внутри конфигурации  $6s6p^2$ . Это приближение вполне оправдано, так как расстояние между термами указанной конфигурации много меньше среднего расстояния между конфигурациями  $6s6p^2$  и  $6s^26p$ .

Рассмотрим сначала простой случай - вклад состояний  $6s^27s$ . Примесный матричный элемент E1 перехода в этом случае записывается, очевидно, так:

$$\frac{\langle 6s^26p_{3/2} | H_{E1}^{(+)} | 6s^27s_{1/2} \rangle \langle 6s^27s_{1/2} | H_W | 6s^26p_{1/2} \rangle}{E(6s^26p_{1/2}) - E(6s^27s)} + \quad (4.I9)$$

$$+ \frac{\langle 6s^26p_{3/2} | H_W | 6s^27s_{1/2} \rangle \langle 6s^27s_{1/2} | H_{E1}^{(+)} | 6s^26p_{1/2} \rangle}{E(6s^26p_{3/2}) - E(6s^27s)}$$

(второе слагаемое, конечно, равно 0, но мы его пока оставим). В первом слагаемом от  $H_W$  работает та часть, которая уничтожает  $6p$  и рождает  $7s$  электрон, обозначим ее  $H_W(7s^+6p)$ . Аналогично, от  $H_{E1}$  работает  $H_{E1}(6p^+7s)$ . Для операторов  $H_W(7s^+6p)$  и  $H_{E1}(6p^+7s)$  состояния  $|6s^27s_{1/2}\rangle$ , которыми они проложены, являются полным набором и поэтому их можно выбросить. Такую же процедуру сделаем и во втором члене. Формула

(4.I9) переходит в следующую

$$\frac{\langle 6s^26p_{3/2} | H_{E1}^{(+)}(6p^+7s) H_W(7s^+6p) | 6s^26p_{1/2} \rangle}{E(6s^26p_{1/2}) - E(6s^27s)} + \quad (4.20)$$

$$+ \frac{\langle 6s^26p_{3/2} | H_W(6p^+7s) H_{E1}^{(+)}(7s^+6p) | 6s^26p_{1/2} \rangle}{E(6s^26p_{3/2}) - E(6s^27s)}$$

(Сделанное нами преобразование в данном случае является точным, поскольку  $6s^27s$  состояния не расщеплены).

Перейдем к состояниям  $6s6p^2$ . Если пренебречь их расщеплением, то примесный матричный элемент E1 перехода запишется так:

$$\sum_n \frac{\langle 6s^26p_{3/2} | H_{E1}^{(+)} | 6s6p^2 n \rangle \langle 6s6p^2 n | H_W | 6s^26p_{1/2} \rangle}{E(6s^26p_{1/2}) - \bar{E}_{\frac{1}{2}}(6s6p^2)} + \quad (4.21)$$

$$+ \frac{\langle 6s^26p_{3/2} | H_W | 6s6p^2 n \rangle \langle 6s6p^2 n | H_{E1}^{(+)} | 6s^26p_{1/2} \rangle}{E(6s^26p_{3/2}) - \bar{E}_{3/2}(6s6p^2)}$$

Аналогично (4.20), с учетом полноты набора  $6s6p^2$  получим

$$\frac{\langle 6s^26p_{3/2} | H_{E1}(6s^+6p) H_W(6p^+6s) | 6s^26p_{1/2} \rangle}{E(6s^26p_{1/2}) - \bar{E}_{\frac{1}{2}}(6s6p^2)} + \quad (4.22)$$

$$+ \frac{\langle 6s^26p_{3/2} | H_W(6s^+6p) H_{E1}(6p^+6s) | 6s^26p_{1/2} \rangle}{E(6s^26p_{3/2}) - \bar{E}_{3/2}(6s6p^2)}$$

Нетрудно убедиться, что

$$\langle H_{E1}(6p^+7s)H_w(7s^+6p) \rangle = -\langle H_w(6s^+6p)H_{E1}(6p^+6s) \rangle$$

$$\langle H_w(6p^+7s)H_{E1}(7s^+6p) \rangle = -\langle H_{E1}(6s^+6p)H_w(6p^+6s) \rangle \quad (4.23)$$

для любых одночастичных операторов  $H_w$  и  $H_{E1}$ . Таким образом, с точностью до перестановок, (4.22) имеет тот же вид что и (4.21). Вклад состояний  $6s^27s$  (4.19) равен

$$\sqrt{\frac{2}{3}} e r_7 \langle 7s_{1/2} | H_w | 6p_{1/2} \rangle \frac{1}{E(6s^26p_{1/2}) - E(6s^27s)} \quad (4.24)$$

Учитывая (4.23), несложно переписать в таком же простом виде и выражение (4.22), т.е. вклад конфигурации  $6s6p^2$ :

$$-\sqrt{\frac{2}{3}} e r_6 \frac{\langle 6s_{1/2} | H_w | 6p_{1/2} \rangle}{E(6s^26p) - E(6s6p^2)} \quad (4.25)$$

Первое слагаемое в (4.22) обращается в нуль точно так же, как и второе слагаемое в (4.19). Иными словами, состояния  $6s6p^2$  с полным моментом  $I/2$  не дают вклада в циркулярную поляризацию, если пренебречь их расщеплением; используя сложение моментов по  $\uparrow\downarrow$  схеме, в этом довольно просто убедиться и непосредственно. Обратимся теперь к интерпретации (4.25).

Поскольку  $E(6s^26p_{3/2}) \approx E_0(6s^26p) \approx E_0(6s6p) - \frac{1}{\nu_{6s}^2}$ ,  $E_{\frac{3}{2}}(6s6p^2) \approx E_0(6s6p^2) \approx E_0(6s6p) - \frac{1}{\nu_{6p}^2}$ , то (4.25)

перепишется в следующем виде

$$-\sqrt{\frac{2}{3}} e r_6 \frac{\langle 6s_{1/2} | H_w | 6p_{1/2} \rangle}{1/\nu_{6p}^2 - 1/\nu_{6s}^2} \quad (4.26)$$

Таким образом видно, что учет вклада состояний  $6s6p^2$  в циркулярную поляризацию формально эквивалентен учету переходов  $6p$  электрона в заполненную  $6s^2$  оболочку (сравни [15]),

при этом обратный знак в формулах (4.25) и (4.26) по сравнению с (4.24) появится за счет обратного знака энергетического знаменателя.

Очевидно, что аналогичная ситуация имеет место и для возбуждений  $S$  - электронов из более глубоких оболочек, однако вклад этих возбуждений в эффект пренебрежимо мал. Кроме того, поскольку равенства (4.23) справедливы для любых одночастичных операторов, утверждение о том, что учет возбуждений электронов из заполненных оболочек формально эквивалентен учету переходов внешнего электрона в эти оболочки, справедливо для любых сумм типа (4.21), например, для поляризуемости и т.д.

Перейдем к расчету угла поворота  $\psi$  плоскости поляризации света, который связан с  $P$  формулой (2.8). Как уже отмечалось, ширина линии источника должна быть сравнимой с  $\Delta_D$ , которая примерно на 2 порядка меньше сверхтонкого расщепления, поэтому нужно рассматривать переходы между определенными компонентами сверхтонкой структуры (СТС) уровней. Спин ядра  $Tl^{203}$   $I = I/2$ , поэтому уровень  $6p_{1/2}$  расщепляется на два, с полными моментами атома  $F = 0, 1$ , а уровень  $2p_{3/2}$  с моментами  $F' = 1, 2$ . Если учесть это замечание, получим, пренебрегая вкладом электрического квадрупольного момента:

$$n_{\pm} - 1 = \frac{2\pi N_F}{\hbar} \frac{1}{3(2F+1)} |\langle JF || M || J'F' \rangle|^2 (1 \pm \rho) \left\langle \frac{1}{\Delta - \frac{\omega}{c} + i\frac{\Gamma}{2}} \right\rangle \quad (4.27)$$

$$\alpha = \frac{2\omega}{c} \text{Im} n = \frac{4\pi N_F \omega}{3(2F+1)\hbar c} |\langle JF || M || J'F' \rangle|^2 \frac{1}{\Delta_D} f(u, v)$$

Здесь  $F$  - момент основного состояния,  $N_F$  - плотность атомов в этом состоянии; поскольку температура  $T$  много больше СТ - расщепления  $\Delta E \approx 1^\circ K$ , то

$$N_F = \frac{2F+1}{(2I+1)(2J+1)} N \quad (4.28)$$

Функция  $f(u, v)$  определена выше (см. (2.7)). Приведенные матричные элементы  $M$  перехода между компонентами СТС и компонентами тонкой структуры, связаны формулой:

$$|\langle JIF || M || J'IF' \rangle|^2 = (2F+1)(2F'+1) \left\{ \begin{matrix} J & J' & 1 \\ F' & F & I \end{matrix} \right\}^2 \quad (4.29)$$

$$|\langle J || M || J' \rangle|^2 = A_1^2 |\langle JIF || M || J'IF' \rangle|^2$$

Фигурные скобки означают  $6j$  символ (см., например, [35], стр. 397). Множитель  $A_1^2$  максимален, как известно, при наибольших  $F$  и  $F'$ . Поэтому мы рассматриваем лишь переход между состояниями с  $F = J+I = 1$  и  $F' = J'+I = 2$ . При этом  $A_1^2 = 5/4$ .

При температуре  $T = 1200^\circ\text{C}$  давление паров таллия составляет  $100 \text{ мм}$  [36], плотность атомов  $N = 0,646 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Если принять для определенности, что сечение  $\sigma$  рассеяния таллия на таллии, приводящее к уширению линии  $\Gamma_{yz}$ , составляет  $0,5 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$  (согласно экспериментальным данным [37],  $\sigma < 10^{-14} \text{ см}^2$ ), то  $\Gamma_{yz} = 4\sqrt{2/\pi} N \sigma \sqrt{\frac{2kT}{mc^2}} = 0,5 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1}$ .

Доплеровская ширина  $\Delta_D = \omega \sqrt{\frac{2kT}{mc^2}} = 1,69 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1}$ . Параметр  $\nu = \Gamma_{yz}/2\Delta_D$  при этом равен  $0,15$ . Отстройку  $\Delta$  выберем так, чтобы в этих условиях коэффициент поглощения  $\alpha$  равнялся  $1 \text{ м}^{-1}$ . Воспользовавшись графиками функции  $f(u, v)$  и  $g(u, v)$ , данными в Приложении, находим, что  $f = 0,00375$ ,  $g = 0,189$ ,  $u = \Delta/\Delta_D = 5,3$ . С этими значениями  $g$  и  $f$  по формуле (2.7) получаем

$$\chi/e = 1,04 \cdot 10^{-5} \text{ рад/м} \quad (4.30)$$

## 5. Свинец

Основное и первое возбужденное состояния свинца, переход между которыми мы будем рассматривать, относятся к configura-

ции  $6s^2 6p^2$  и обладают полными моментами  $0$  и  $1$  соответственно. Схема уровней приведена на рис. 1.

4	30354,23 $\text{см}^{-1}$	$1S'$
3	38363,27	$1D'_2$
2	49170,77	$3P'_2$
1	52001,85	$3P'_1$
0	59821,00 $\uparrow 12788,8 \text{ \AA}$	$3P'_0$

Рис. 1.

Схема уровня конфигурации  $6s^2 6p^2$  в  $Pb$ .

Расчет конфигурации  $p^2$  в приближении промежуточной связи хорошо известен [35, 31, 38, 39], и мы на нем останавливаться не будем.

Нужны волновые функции в  $jj$  связи имеют вид

$$\begin{aligned} |3P'_0\rangle &= 0,974 \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right)_0 - 0,227 \left( \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_0 \\ |3P'_1\rangle &= \left( \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right)_1 \end{aligned} \quad (5.1)$$

где

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right)_0 &= \frac{1}{2} \left( \psi_{\frac{1}{2}}^+ \psi_{-\frac{1}{2}}^+ \right) \\ \left( \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right)_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( c_{\frac{3}{2}}^+ c_{-\frac{3}{2}}^+ - c_{\frac{1}{2}}^+ c_{-\frac{1}{2}}^+ \right) \psi_0 \\ \left( \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right)_1 &= \frac{1}{2} \left( \sqrt{3} c_{\frac{3}{2}}^+ \psi_{-\frac{1}{2}}^+ - c_{\frac{1}{2}}^+ \psi_{\frac{1}{2}}^+ \right) \psi_0 \end{aligned} \quad (5.2)$$

Приведенный матричный элемент  $M$  перехода равен

$$\langle 1 || M || 0 \rangle = -1,31 \mu \quad (5.3)$$

Мы ограничимся рассмотрением четного изотопа свинца, например,  $Pb^{208}$ , где из-за отсутствия СТС вращение плоскости поляризации света будет наибольшим.

Давление паров свинца при температуре  $1200^\circ\text{C}$  составляет  $17 \text{ мм}$  [36]. Экспериментальные данные по ударному уширению



свинца нам не известны. Примем для определенности, ориентируясь на данные по таллию, что сечение рассеяния свинца на свинце, приводящее к уширению линии, равно  $0,5 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$ . Доплеровская ширина  $\Delta_D = 1,67 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1}$ ,  $N = 1,10 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , параметр  $V = \Gamma_{49}/2\Delta_D = 0,018$ . Отсюда получаем (см. (4.27)), что коэффициент поглощения  $\alpha = 1 \text{ м}^{-1}$  при  $f = 0,0054$ ; тогда  $u = \Delta/\Delta_D = 2,6$ ;  $g = 0,42$ .

Расчет примеси состояний, относящихся к конфигурации  $6p7s$  и  $6p8s$ , не вызывает затруднений. Все они хорошо описываются приближением  $jj$  связи. Из четырех волновых функций  $^1P_0 = (\cdot \frac{1}{2})_0$ ,  $^3P_1' = (\cdot \frac{1}{2})_1$ ,  $^1P_1' = (\cdot \frac{3}{2})_1$ ,  $^3P_2 = (\cdot \frac{3}{2})_2$  нас интересуют только первая и третья, поскольку, очевидно,  $(\cdot \frac{1}{2})_1$  не примешивается одночастичным гамильтонианом слабого взаимодействия к  $^3P_1 = (\frac{1}{2} \frac{3}{2})_1$ . Нужные волновые функции имеют вид

$$\begin{aligned} (\cdot \frac{1}{2})_0 &= b^{-\frac{1}{2}} a^{\frac{1}{2}} |\psi_0\rangle \\ (\cdot \frac{3}{2})_1 &= \frac{1}{2} (\sqrt{3} c_{3/2}^+ a_{-1/2}^+ - c_{1/2}^+ a_{1/2}^+) |\psi_0\rangle \end{aligned} \quad (5.4)$$

Для нахождения  $\nu_{6p_{1/2}}$  необходимо знать центр полосы и параметр тонкого расщепления конфигурации  $6p^2$  в  $P6I$ , а также центр полосы  $6p$  в  $P6II$ . Эти величины равны соответственно  $16070 \text{ см}^{-1}$ ;  $7200 \text{ см}^{-1}$ ;  $69210 \text{ см}^{-1}$ ; так что  $\nu_{6p_{1/2}} = 1,35$ . Центры полос конфигураций  $6p7s$  и  $6p8s$  равны  $44570 \text{ см}^{-1}$  и  $57990 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{7s} = 2,11$ ,  $\nu_{8s} = 3,13$ . С учетом примеси указанных состояний волновые функции основного и первого возбужденного состояний таковы:

$$\begin{aligned} |6p^2, ^3P_0\rangle + i \cdot 10^{10} [-1,52 |6p7s, ^3P_0\rangle - 0,61 |6p8s, ^3P_0\rangle] \\ |6p^2, ^3P_1\rangle + i \cdot 10^{10} [0,93 |6p7s, ^1P_1\rangle + 0,39 |6p8s, ^1P_1\rangle] \end{aligned} \quad (5.5)$$

Необходимые для расчета радиальные интегралы находятся численно [30]:  $\rho_7 = 2,6$ ;  $\rho_8 = 0,9$ . Эти значения хорошо согласуются с экспериментальными данными по силам осцилляторов, полученными в работах [40, 41].

Для приведенного матричного элемента  $E1$  перехода между состояниями (5,5) получаем

$$\langle ^3P_1' || D || ^3P_0 \rangle = i \cdot 0,31 \cdot 10^{-9} ea$$

Согласно численным расчетам, вклад более высоких возбуждений  $6p$ -электрона в  $\langle ^3P_1' || D || ^3P_0 \rangle$  (обусловленный, главным образом, непрерывным спектром) равен  $+i \cdot 0,12 \cdot 10^{-9} ea$ . Таким образом, полный вклад возбуждений  $6p$ -электрона в циркулярную поляризацию составляет

$$\rho' = 1,8 \cdot 10^{-7}$$

Перейдем теперь к оценке вклада состояний, относящихся к конфигурации  $6s6p^3$ , которые вообще экспериментально не наблюдались. Эффективное квантовое число  $6p$ -электрона в этой конфигурации примем таким же, как и в конфигурации  $6s^26p^2$ :  $\nu_{6p_{1/2}}' = 1,35$ , подобно тому, как это имеет место в таллии. Для  $6s$ -электрона в конфигурации  $6s^26p^2$   $\nu_{6s}$  найдем, считая его добавленным к иону  $P6II$  в состоянии  $6s6p^2$ . Центр полосы  $6s6p^2$  иона  $P6II$   $E_0 = 153370 \text{ см}^{-1}$ ; отсчет ведется от основного состояния  $P6I$ . При этом  $\nu_{6s} = 0,89$ .

Для соответствующего радиального интеграла численный расчет дает значение  $-2,6$ , завывая при этом  $\nu_{6s}$  ( $0,98$  вместо экспериментального  $0,89$ ). Поскольку в таллии аналогичный расчет завывает величину  $|\rho_6|$  по сравнению с экспериментальным значением в  $1,6$  раза, нам представляется разумным и здесь соответственно уменьшить расчетное значение. Мы примем  $\rho_6 = -2,6/1,6 = -1,6$ .

Вклад состояний  $6s6p^3$  в циркулярную поляризацию  $P''$ , нетрудно вычислить, если учесть, что, как было показано выше, он формально равен вкладу от переходов  $6p$  электрона в заполненную  $6s$  оболочку. В результате расчетов получим:

$$P'' = 1,3 \cdot 10^{-7}$$

Полная циркулярная поляризация в переходе  $|6p^2 \ ^3P_0\rangle - |6p^2 \ ^3P_1\rangle$  в свинце равна, таким образом,

$$P' + P'' = 3,1 \cdot 10^{-7} \quad (5.8)$$

Поворот плоскости поляризации в четном изотопе свинца при отстройке  $\Delta = 2,6 \Delta_2$  составляет  $\psi/2 = 1,15 \cdot 10^{-5}$  рад/м.

## 6. Висмут

Основное состояние атома висмута относится к конфигурации  $6s^26p^3$ , которая состоит из пяти термов. Их расположение показано на рисунке 2.

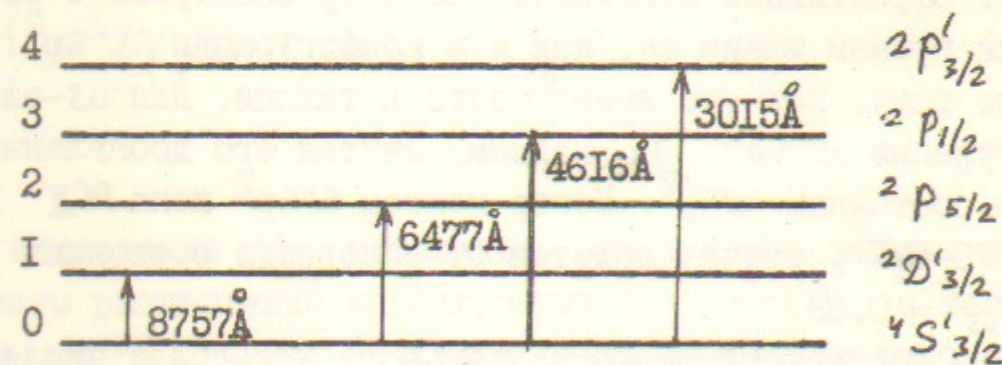


Рис. 2.

Расчет конфигурации  $P^3$  в промежуточной связи хорошо известен [35, 31, 38, 42].  $^2D_{5/2}$  и  $^2P_{1/2}$  являются чистыми состояниями и в  $LS$ , и в  $jj$  схеме, так как нет других термов с такими же моментами. Коэффициенты разложения волновых функций с  $J = 3/2$  по  $LS$  функциям мы заимствовали из [38], эти состояния в  $jj$  схеме мы получили простым переразложением  $LS$  - функций. Значения коэффициентов  $a_i$  и  $b_i$ , опреде-

ленных равенствами

$$|3/2\rangle = a_s |^4S_{3/2}\rangle + a_p |^2P_{3/2}\rangle + a_D |^2D_{3/2}\rangle = \\ = b_1 \left(\frac{3}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{3/2} + b_2 \left(\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2}\right)_{3/2} + b_3 \left(\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{3}{2}\right)_{3/2} \quad (6.1)$$

приведены в таблице I. В (6.1) выражения  $(d_1 d_2 d_3)_J^m$  - нормированные волновые функции трех  $P$  - электронов в  $jj$  схеме

	$^4S^3/2$	$^2D^3/2$	$^2P^3/2$
$a_s$	0,7520	- 0,5820	0,3084
$a_p$	- 0,5391	- 0,2759	0,7964
$a_D$	0,3780	0,7648	0,5221
$b_1$	- 0,9348	- 0,3238	0,1428
$b_2$	0,3085	- 0,9437	- 0,1117
$b_3$	- 0,1724	0,0664	- 0,9836

Табл. I

Разложение волновых функций конфигурации  $6p^3$  с  $J=3/2$  по  $LS$  и  $jj$  - функциям.

В представлении вторичного квантования они имеют следующий вид

$$\left(\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{3}{2}\right)_{3/2} = C_{3/2}^+ C_{1/2}^+ C_{-1/2}^+ |\psi_0\rangle \\ \left(\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2}\right)_{3/2} = \frac{1}{\sqrt{5}} \left(2 b_{-1/2}^+ C_{3/2}^+ C_{1/2}^+ - b_{1/2}^+ C_{3/2}^+ C_{-1/2}^+\right) |\psi_0\rangle \\ \left(\frac{3}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)_{3/2} = b_{1/2}^+ b_{-1/2}^+ C_{3/2}^+ |\psi_0\rangle \quad (6.2)$$

$$\left(\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2}\right)_{5/2} = b_{1/2}^+ c_{3/2}^+ c_{1/2}^+ |\psi_0\rangle$$

$$\left(\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2}\right)_{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} b_{1/2}^+ (c_{3/2}^+ c_{-1/2}^+ - c_{1/2}^+ c_{-1/2}^+) |\psi_0\rangle$$

Матричные элементы M1 и E2 переходов в основное состояние вычисляются стандартным образом, если воспользоваться формулами (3.28), (6.1), (6.2). Результаты вычислений приведены в первых столбцах таблицы 2. Здесь оператор  $T_{2\alpha}$  - сферический тензор второго ранга, следующим образом связанный с оператором квадрупольного момента:  $T_{20} = D_{33}$ , где  $D_{\alpha\beta} = 3z_{\alpha}z_{\beta} - d_{\alpha\beta}^2$ , или, что то же самое,  $T_{21} = \frac{4\sqrt{3}}{e\omega} Q^+$ , где  $Q^+$  введен в (3.28).

Переход	$\frac{\langle \sigma'    M    \sigma \rangle}{\mu}$	$\frac{\langle \sigma'    T_2    \sigma \rangle}{\langle z^2 \rangle}$	$\frac{\omega^2 \cdot 10^{-2}}{\omega_0^2}$	$A_1^2$	$A_2^2$	$\left[\frac{E2}{M1}\right]^2$
1	-1,723	-1,24	1,10	9I/40	9I/88	0,004
2	-0,584	1,976	2,02	5/2	10/7	0,20
3	-0,622	-0,907	3,95	13/4	9I/100	0,035
4	0,191	0,047	9,25	9I/40	9I/88	0,004

Таблица 2.

Определим теперь отстройку, соответствующую коэффициенту поглощения  $\alpha = I \text{ м}^{-1}$ , для каждого из переходов. Формула для  $\alpha$  имеет вид

$$\alpha = 2 \frac{\omega}{c} I m n = \frac{4\pi N \omega}{\hbar c 3(2F+1)} \left[ \left| \langle J' F' || M || J F \rangle \right|^2 + \frac{\alpha \hbar \omega^2}{80c} \left| \langle J' F' || T_2 || J F \rangle \right|^2 \right] I m \left( \frac{1}{\Delta - \frac{\nu}{c} \omega + i \frac{\Gamma}{2}} \right) \quad (6.3)$$

мы учли здесь, что переходы идут между определенными компонентами СТС. Матричные элементы таких переходов связаны с матричными элементами переходов между компонентами тонкой структуры следующей формулой (см., например, [35]):

$$\left| \langle J' F' || T_K || J F \rangle \right|^2 = (2F+1)(2F'+1) \left\{ \begin{matrix} J & J' & K \\ F' & F & I \end{matrix} \right\}^2 \quad (6.4)$$

$$* \left| \langle J || T_K || J \rangle \right|^2 = A_K^2 \left| \langle J' || T_K || J \rangle \right|^2$$

где  $T_K$  - сферический тензор  $K$  - ранга; напомним, что наиболее выгодны (см. выше) переходы между состояниями с наибольшими полными моментами  $F$  и  $F'$ :  $F = I + J$ ,  $F' = I + J'$ . Как и в таблице, мы ограничимся рассмотрением только таких переходов. Значения соответствующих факторов  $A_1^2$  и  $A_2^2$  также приведены в табл. 2. Формулу (6.3) теперь можно записать в следующем виде:

$$\alpha = \frac{\pi N \omega A_1^2}{30} \left| \langle J || M || J \rangle \right|^2 \left[ 1 + \left[ \frac{E2}{M1} \right]^2 \right] \frac{1}{\Delta_0} f(u, v) \quad (6.5)$$

Через  $\left[ \frac{E2}{M1} \right]^2$  мы обозначили относительный вклад E2 -перехода в поглощение. Значения этой величины содержатся в последнем столбце таблицы 2. При ее вычислении мы использовали расчетное значение  $\langle z^2 \rangle = 11a^2$ . Видно, что квадрупольное поглощение пренебрежимо мало во всех переходах, кроме второго, где для  $F = 6$ ,  $F' = 7$  оно составляет 20% от магнитодипольного.

Парциальное давление паров атомарного висмута при температуре 1200°C составляет, согласно справочнику [36], 23 мм.рт.ст. (По тому же источнику, парциальное давление молекул  $Bi_2$  равно при этой температуре 24 мм). Ориентируясь на экспериментальные данные по таблице [37], примем  $\delta < 10^{-14} \text{ см}^2$ . Плотность  $N = 1,49 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Значения величин  $\Delta_0$  и  $\nu = \Gamma/2 \Delta_0$  даны в табл. 3. Там же приведены величины  $f$ ,  $u = \Delta/\Delta_0$  и  $g$ , найденные из условия  $\alpha = I \text{ м}^{-1}$ . Для четвертого перехода поглощение мало, и даже при  $\Delta = 0$   $\alpha = 0,5 \text{ м}^{-1}$ . Поэтому здесь мы выбрали  $u$  так, чтобы угол поворота плоскости поляризации  $\psi$  на пути  $l \sim I \text{ м}$  был максимален.

	$\Delta_D \cdot 10^2, \text{ см}^{-1}$	$u$	$v$	$g$	$f$
1	1,29	2,0	0,03	0,64	0,05
2	1,74	1,4	0,02	0,95	0,32
3	2,45	1,5	0,02	0,90	0,25
4	3,75	0,9	0,01	1,07	0,79

Таблица 3.

Перейдем к расчету степени циркулярной поляризации. Ближайшие уровни противоположной четности относятся к конфигурации  $6p^2 7s$ . Приведем расчет вклада этой конфигурации в циркулярную поляризацию излучения в рассматриваемых переходах с учетом ее расщепления \*).

Расчет конфигурации  $6p^2 7s$  осуществлялся так же, как и конфигурации  $6p^2 6s$  в таблице. Результаты следующие:  $\frac{1}{3} F^2(1,1) = 5300 \text{ см}^{-1}$ ,  $\frac{1}{3} G^1(0,1) = 670 \text{ см}^{-1}$ ,  $\zeta = 11000 \text{ см}^{-1}$ . Центр конфигурации  $E_0 = 56710 \text{ см}^{-1}$ . (См. также [43]).

Волновые функции в  $jj$  представлении имеют вид

$$\begin{aligned}
 |J=\frac{1}{2}\rangle &= a_1 \left( \begin{matrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right)_{1/2} + a_2 \left( \begin{matrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right)_{1/2} + a_3 \left( \begin{matrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right)_{1/2} \\
 |J=\frac{1}{2}\rangle &= b_1 \left( \begin{matrix} 1 & 3(1) \\ 2 & 2 \end{matrix} \right)_{1/2} + b_2 \left( \begin{matrix} 1 & 3(2) \\ 2 & 2 \end{matrix} \right)_{1/2} + b_3 \left( \begin{matrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right)_{1/2} \\
 |J=\frac{5}{2}\rangle &= c_1 \left( \begin{matrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right)_{5/2} + c_2 \left( \begin{matrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right)_{5/2}
 \end{aligned} \tag{6.6}$$

\*). Приближенный расчет, состоящий в том, что мы пренебрегаем расщеплением состояний  $6p^2 7s$  (см. (4.19), (4.20)) совпадает с точным в пределах 10% для всех переходов, кроме третьего, где ответы отличаются примерно в 2 раза. Причина этого ясна: приближенный расчет не учитывает аномальную близость уровней  $6p^3 2p_{1/2}$  и  $6p^3 7s \frac{1}{2}$  (расстояние  $\sim 11000 \text{ см}^{-1}$ ) и поэтому дает заниженный ответ.

Значения коэффициентов  $a_i, b_i, c_i$  и энергии соответствующих уровней приведены в табл. 4. Энергии уровней выражены в  $\text{см}^{-1}$ .

	$E$	$a_1$	$a_2$	$a_3$
$4p'_{1/2}$	32588	0,980	0,064	-0,186
$2p'_{1/2}$	45916	-0,066	0,998	-0,001
$2s'_{1/2}$	73778	0,185	0,014	0,983

		$b_1$	$b_2$	$b_3$
$4p'_{3/2}$	44865	-0,994	0,108	-0,045
$2p'_{3/2}$	49457	0,114	0,979	-0,159
$2d'_{3/2}$	67117	-0,026	0,163	0,987

		$c_1$	$c_2$
$4p'_{5/2}$	48490	-0,977	0,217
$2d'_{5/2}$	68086	0,217	0,977

Табл. 4

Коэффициенты разложения волновых функций конфигурации  $6p^2 7s$  в  $jj$  связи. (Для энергии уровня  $2s'_{1/2}$  приведено его расчетное значение).

Определение волновых функций  $(j_1 j_2)_J^m$  см. в гл. 4. Их выражения через операторы рождения и уничтожения электронов даны в формулах (4.1<sup>2</sup>).

Вычислив матричные элементы слабого гамильтониана (3.24) между состояниями конфигураций  $6p^3$  (см. (6.1) и табл. 1) и  $6p^2 7s$  (см. (6.6) и табл. 4), а также используя значения энергий уровней, находим волновые функции  $6p^3 s$  с учетом примеси  $6p^2 7s$ :

$$\begin{aligned}
|{}^4S'_{3/2}\rangle &= i \cdot 10^{-10} [1,04 |{}^4P'_{3/2}\rangle + 1,00 |{}^2P'_{3/2}\rangle - 0,09 |{}^2D'_{3/2}\rangle] \\
|{}^2D'_{3/2}\rangle &= i \cdot 10^{-10} [0,42 |{}^4P'_{3/2}\rangle + 0,22 |{}^2P'_{3/2}\rangle + 0,90 |{}^2D'_{3/2}\rangle] \\
|{}^2D'_{5/2}\rangle &= i \cdot 10^{-10} [0,33 |{}^4P'_{5/2}\rangle + 0,94 |{}^2D'_{5/2}\rangle] \\
|{}^2P'_{1/2}\rangle &= i \cdot 10^{-10} [0,85 |{}^4P'_{1/2}\rangle - 0,95 |{}^2S'_{1/2}\rangle] \\
|{}^2P'_{3/2}\rangle &= i \cdot 10^{-10} [0,63 |{}^4P'_{3/2}\rangle + 0,50 |{}^2P'_{3/2}\rangle - 0,13 |{}^2D'_{3/2}\rangle]
\end{aligned} \quad (6.9)$$

При вычислении матричных элементов смешивания использовались следующие значения для эффективных главных квантовых чисел  $6p$  и  $7s$  электронов:  $\nu_{6p_{1/2}} = 1,23$ ;  $\nu_{7s} = 2,00$ . Центр полосы и параметр тонкого расщепления конфигурации  $6p^3$  в  $Bi I$ , а также центры полос конфигураций  $6p^2 7s$  в  $Bi I$  и  $6p^2$  в  $Bi II$ , необходимые для их определения, соответственно равны 21660, 10000, 56710 и 142500  $\text{cm}^{-1}$ .

В висмуте, в отличие от таллия и свинца, для расчета эффекта необходимо знать наряду с радиальным интегралом  $Z_7 = \int dr z^3 R_{7s} R_{6p_{3/2}}$  величину  $\tilde{Z}_7 = \int dr z^3 R_{7s} R_{6p_{3/2}}$  (см. (3.28), (3.29)). Численный расчет [30] приводит к следующим значениям:  $\rho_7 = 2,2$ ;  $\rho_8 = 1,5$ , что согласуется с экспериментальными данными по временам жизни возбужденных состояний висмута [44,45]. Теперь уже можно найти приведенные матричные элементы оператора дипольного момента для интересующих нас переходов за счет примеси конфигурации  $6p^2 7s$ . Они равны  $i \cdot 0,35 \cdot 10^{-9} ea$ ,  $i \cdot 0,11 \cdot 10^{-9} ea$ ,  $i \cdot 0,35 \cdot 10^{-9} ea$ ,  $-i \cdot 0,15 \cdot 10^{-9} ea$ .

Для вклада более высоких возбуждений  $6p$ -электрона, включая непрерывный спектр, численный расчет дает  $i \cdot 0,22 \cdot 10^{-9} ea$ ,  $i \cdot 0,08 \cdot 10^{-9} ea$ ,  $i \cdot 0,15 \cdot 10^{-9} ea$ ,  $-i \cdot 0,07 \cdot 10^{-9} ea$ . Теперь легко вычислить полный вклад возбуждений  $6p$ -электрона в циркулярную поляризацию. Соответствующие величины  $P'$  приведены в таблице 5.

Состояния, соответствующие возбуждению  $6s$ -электрона, относящиеся к конфигурации  $6s 6p^4$ , в висмуте вообще не наблюдались, так же как и аналогичные состояния в свинце. Однако их учет ока-

зывается возможным. Для  $6p$  электрона в этой конфигурации примем то же значение  $\nu_{6p_{1/2}}$ , что и в конфигурации  $6s^2 6p^3$ :  $\nu_{6p_{1/2}} = 1,23$ . Экспериментальные данные по спектру  $Bi II$  недостаточны для однозначного определения  $\nu_{6s}$ . Поэтому мы воспользуемся расчетным значением 0,9, внося такую же поправку  $-0,09$ , как в свинце:  $\nu_{6s} = 0,81$ . Наконец  $\rho_c$  оценим, внося в расчетное значение  $-2,41$  поправочный фактор  $1/1,6$ , так же как в таллии и свинце:  $\rho_c = -1,5$ . Теперь рассчитать вклад состояний  $6s 6p^4$  уже несложно. Его значения для разных переходов приведены во втором столбце таблицы 5. Полная степень циркулярной поляризации  $P = P' + P''$  приведена в третьем столбце этой же таблицы.

	$P' \cdot 10^7$	$P'' \cdot 10^7$	$P \cdot 10^7$	$\psi // \cdot 10^7 \text{ рад/м}$
1	1.8	1.5	3.3	26
2	1.8	2.4	4.2	6
3	4.4	3.1	7.5	15
4	6.3	5.3	11.6	2

Таблица 5.

Углы поворота плоскости поляризации легко находятся по формуле (2.8) с использованием величин  $P, g, f$  из таблиц 3 и 5. Значения  $\psi //$  помещены в последний столбец таблицы 5. Существенно меньшие углы поворота в парах висмута обусловлены меньшим, чем в таллии, давлением паров, меньшими, чем в свинце, амплитудами  $M I$  перехода и, наконец, большим спином ядра, который приводит к сложной сверхтонкой структуре.

Окончательные результаты для циркулярной поляризации излучения и для оптической активности паров таллия, свинца и висмута сведены в таблицу 9.

## 7. Обсуждение точности расчёта. Сравнение с другими результатами

Результаты различных расчётов эффекта заметно отличаются друг от друга. Для удобства сравнения они сведены в таблицу 6.

Заметное отличие результатов данной работы от наших первоначальных обусловлено, главным образом, следующими причинами. Во-первых, численные расчёты позволили учесть вклад высоких возбуждений  $6p$  электрона, включая непрерывный спектр.

Таблица 6

Результаты расчета циркулярной поляризации по разным работам. Приведены значения  $P \cdot 10^7$  (в работах [15],[16] используются величины, равные  $P/2$ )

	данная работа	наш первоначальный результат [14]	[15]	[16]
Tl	4,1	3,1		- 5,1
Pb	3,1	2,1		
Bi	3,3	2,0	7,0	6,9
	4,2	2,3	9,2	
	7,5	4,5	-12,4	
	11,6	7	19,2	

Во-вторых, они показали, что в формуле (3.22) в качестве эффективного главного квантового числа  $6r_{1/2}$  -электрона следует использовать непосредственно  $\nu_{ср1/2}$ , а не значение  $\nu_{ср}$ , полученное после усреднения по тонкой структуре, как это делалось ранее.

Численное решение уравнения Дирака, с помощью которого получены наши результаты, проводилось с двухпараметрическим потенциалом

$$V(r) = -\frac{2}{Z} \left[ \frac{Z-1}{M(e^{2\mu r} - 1) + 1} + 1 \right], \quad Z - \text{заряд ядра}, \quad (7.1)$$

предложенным в работе [46]. Исходя из требования наилучшей подгонки термов основной конфигурации  $6s^2 6p^k$ , включая тонкую структуру, а также конфигурации  $6s^2 6p^{k-1} ns$ , были выбраны следующие значения параметров:

$$\begin{aligned} M_{Tl} &= 15,041 & M_{Pb} &= 14,045 & M_{Bi} &= 12,049 \\ d_{Tl} &= 1,580 & d_{Pb} &= 1,538 & d_{Bi} &= 1,401 \end{aligned} \quad (7.2)$$

При этом, как уже отмечалось выше, расчетные значения радиальных интегралов для возбуждений  $6p$  - электрона хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Это означает, что полученные функции валентного электрона на больших расстояниях ведут себя правильно. Поведение волновых функций на малых расстояниях проверено путем расчета [47] сверхтонкой структуры таллия, свинца и висмута с учетом смешивания конфигураций. Эти вычисления приводят также к хорошему согласию с экспериментом. Несколько менее надежным является учет вклада в эффект от конфигурации  $6s 6p^{k+1}$ , поскольку значения радиальных интегралов  $\rho_0$  мы выбираем, основываясь на единственном эксперименте по таллию [33,34], причем численные расчеты с ним не согласуются. С нашей точки зрения, вопрос о величине этих интегралов убедительно может быть решен только в эксперименте, например, путем точного измерения поляризуемости атомов таллия, свинца и висмута (см. расчет в [30]) или прямым определением сил осцилляторов. Заметим, что если бы правильными оказались значения радиальных интегралов, полученные численным расчетом, то наши предсказания для эффекта возросли бы на 30-40%.

Несомненным источником неточности нашего расчета, впрочем, так же, как и расчетов [15,16] является использование одночастичного приближения. Однако, как показывают оценки, основанные на расчете сверхтонкой структуры [47], учет смешивания

вания конфигураций едва ли может изменить ответ более, чем на 15-20%.

Что касается расхождения наших результатов с результатами работ [15,16], то мы затрудняемся указать их причину, ввиду отсутствия в указанных статьях достаточно подробного изложения численных расчетов. Отметим только, что процедура, использованная в этих работах, предполагает один и тот же эффективный потенциал для электронов как в обычных конфигурациях ( $6S^2 6p^k$  и  $6S^2 p^{k-1} ns$ ), так и в конфигурации  $6S 6p^{k+1}$ . Однако, возможность описания этих состояний с помощью единого эффективного потенциала отнюдь не очевидна. Во всяком случае, используя потенциал (7.1) (такая же форма потенциала принята в работе [15]), нам не удалось одновременно подогнать все необходимые для расчета уровни энергии включая тонкую структуру. В заключение заметим, что у нас не вызывает ни каких сомнений правильность полученного нами знака эффекта (см. табл. 6) для всех переходов.

#### 8. Экспериментальные возможности. Ограничения на случайное внешнее магнитное поле

В настоящее время эксперименты с висмутом уже ведутся [17-19]. В связи с этим, мы хотели бы обратить внимание на то, что в разумных условиях угол поворота в парах таллия и свинца может быть существенно большим, чем в висмуте, несмотря на то, что степени циркулярной поляризации для этих трех атомов близки (см. табл. 9). Соответствующие переходы лежат в диапазоне, перекрываемом перестраиваемыми параметрическими генераторами.

Кроме того, таллий и свинец, в отличие от висмута, имеют стабильные изотопы. Сравнивая эффект на разных изотопах (соответствующая разность мала  $\sim 1/Z$ ), можно было бы, в принципе, определить не только величину  $q$  - результат усреднения слабого взаимодействия по всем нуклонам ядра, но и сами константы слабого взаимодействия нейтрона и протона  $\chi_n$  и  $\chi_p$  (см. (3.4)). Неточность атомных расчетов, очевидно, не препятствует получению такой информации из опытов с изотопами одного элемента.

Наконец, сравнивая эффект в переходах между различными

сверхтонкими компонентами (эти разности также относительно малы  $\sim 1/Z$ , см. (3.22)) можно было бы, в принципе, определить и константы связи электронного векторного тока с протонным и нейтронным аксиальными токами, используя соответственно таллий и нечетный изотоп свинца.

Обратим теперь внимание на достаточно сложную проблему, которую представляет устранение случайного внешнего магнитного поля, также приводящего, как известно, к вращению плоскости поляризации света. Существует несколько механизмов, за счет которых магнитное поле вызывает оптическую активность. Остановимся на двух наиболее опасных.

Во-первых, внешнее магнитное поле приводит к смешиванию различных сверхтонких состояний. Возникающая поляризация по порядку величины равна

$$P_1 \sim \frac{\mu H}{\Delta E} \approx 10^{-4} H(\text{гс}),$$

где  $\Delta E$  - типичное сверхтонкое расщепление:  $\Delta E \sim 0,1 + 1 \text{ см}^{-1}$ . Во-вторых, возникает зеемановское расщепление компонент СТС. Соответствующая поляризация  $P_2 \sim \frac{\mu H}{\Delta} \approx \frac{\mu H}{\Delta_2} \sim 10^{-3} H(\text{гс})$ . Ниже идет более точный расчет ограничений на случайное внешнее магнитное поле для каждого из рассматриваемых нами переходов. Поскольку поправки к коэффициенту преломления, связанные с магнитным полем, малы, то два рода поправок - за счет смешивания по  $F$  и за счет Зееман-эффекта - можно учитывать независимо друг от друга.

Смешивание магнитным полем компонент СТС с разными полными моментами  $F$  приводит к тому, что коэффициент преломления  $n$  становится разным для право- и левополяризованных квантов:

$$n_{\pm} - 1 = (n-1)(1 \pm AH) \quad (8.1)$$

Ограничение на магнитное поле следует из сравнения (8.1) с выражением  $n_{\pm} - 1 = (n-1)(1 \pm P)$ :  $AH < P$ . Обозначим через  $H_1$  то поле, при котором  $AH_1 = P$ . Для расчета величины  $A$  найдем  $n_{\pm} - 1$  в магнитном поле. Если магнитное поле направлено по оси  $Z$ , то

$$|FJM\rangle' = |FJM\rangle + \frac{\langle F-1JM | \mu_3 H | FJM \rangle}{E_{FJ} - E_{F-1,J}} |F-1JM\rangle \quad (8.2)$$

(Здесь, как обычно,  $F$  - максимально:  $F = J + I$ ). Простой расчет дает следующие выражения для волновых функций:

Таллий.

$$|{}^2P_{3/2}, F=2, M\rangle = \frac{\sqrt{(2+M)(2-M)}}{3} \frac{\mu H}{\Delta E} |{}^2P_{3/2}, F=1, M\rangle \quad (8.3)$$

$$\Delta E = 0.018 \text{ см}^{-1}.$$

Висмут

$$|J=\frac{3}{2}, F=6, M\rangle = \frac{g_{0,1,4} \mu H}{\Delta E_{0,1,4}} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{3}{11}} \sqrt{(6+M)(6-M)} |J=\frac{3}{2}, F=5, M\rangle \quad (8.4)$$

$$|{}^2D_{5/2}, F=7, M\rangle = \frac{g_2 \mu H}{\Delta E_2} \frac{3}{14} \sqrt{\frac{5}{13}} \sqrt{(7+M)(7-M)} |{}^2D_{5/2}, F=6, M\rangle$$

Здесь  $\Delta E_i$  - интервалы СТС между смешивающимися компонентами; их значения заимствованы из статей [42, 48];  $i$  - номер электронного термина в  $Bi$  (см. рис. 2),  $g_i$  - гиромагнитное отношение для этого термина.

терм	$\Delta E, \text{см}^{-1}$	$g_i$
0	-0,10	1,63
1	-0,26	1,24
2	0,59	1,20
3	1,90	0,67
4	0,12	1,26

Таблица 7

$g$  - факторы и СТС висмута.

Легко понять, что можно не учитывать примесь к состояниям  $|{}^2P_{1/2}, F=1\rangle$  таллия и  $|{}^2P_{1/2}, F=5\rangle$  висмута. В четном изотопе свинца  $Pb^{208}$  нет СТС, а смешивание компонент тонкой структуры приводит к ограничению, которое по очевидной причине на 4 порядка слабее.

Зная волновые функции (8.3) и (8.4), легко вычислить  $n_{\pm} - 1$  для каждого перехода. Особого рассмотрения требует переход  ${}^2D_{5/2} - {}^4S_{3/2}$  в висмуте. Если  $S$  - оператор перехода ( $M$  или  $Q$ ), то его матричный элемент, входящий в  $n_{\pm}$ , равен

$$\langle {}^4S_{3/2}, 6M | S | {}^2D_{5/2}, 7M \rangle = \frac{g_0 \mu H}{\Delta E_0} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{3}{11}} \sqrt{(6+M)(6-M)} \times$$

$$\times \langle {}^4S_{3/2}, 5M | S | {}^2D_{5/2}, 7M \rangle = \frac{g_2 \mu H}{\Delta E_2} \frac{3}{14} \sqrt{\frac{5}{13}} \sqrt{(7+M)(7-M)} \times$$

$$\times \langle {}^4S_{3/2}, 6M | S | {}^2D_{5/2}, 6M \rangle$$

Здесь второй член входит с существенно большим весом, чем третий, поскольку  $\Delta E_2 \approx 6 \Delta E_0$ . Однако, матричный элемент во втором члене отличен от нуля лишь для E2 перехода. В результате квадруполь и диполь дают примерно одинаковый вклад. Во всех остальных переходах такого случайного усиления роли электрического квадрупольного перехода нет и его вкладом можно пренебречь.

Приведем выражения для  $(1 \pm AH)$  (см. (8.1)) и ограничение на магнитное поле:

Таллий

$$1 \mp \frac{1}{3} \frac{\mu H}{\Delta E}$$

Поле, достаточное для имитации эффекта

$$H_1 = 0.48 \cdot 10^{-3} \text{ э}$$

Висмут

Номер строки соответствует номеру возбужденного уровня.

$$1. \quad 1 \pm \frac{3}{4} \left( \frac{g_0}{\Delta E_0} - \frac{g_1}{\Delta E_1} \right) \mu H, \quad H_1 = 0.82 \cdot 10^{-3} \text{ э}$$

$$2. \quad 1 \mp \frac{9}{14} g_2 \frac{\mu H}{\Delta E_2} + 0.20 \left( 1 \pm \frac{1}{2} \frac{g_0 \mu H}{\Delta E_0} \right), \quad H_1 = 3.3 \cdot 10^{-3} \text{ э}$$

$$3. \quad 1 \pm \frac{3}{4} \frac{g_0 \mu H}{\Delta E_0}, \quad H_1 = 1.3 \cdot 10^{-3} \text{ э}$$

$$4. \quad 1 \pm \frac{3}{4} \left( \frac{g_0}{\Delta E_0} - \frac{g_4}{\Delta E_4} \right) \mu H, \quad H_1 = 1.2 \cdot 10^{-3} \text{ э}$$



Найдем теперь ограничения на магнитное поле, возникающие из-за Зееман-эффекта. С его учетом коэффициент преломления имеет вид:

$$n_{\pm} - 1 = \frac{2\pi N_F}{\hbar(2F+1)} \sum_{M, M'} (M_{\pm})_{M, M'}^2 \cdot \left\langle \frac{1}{\omega - \omega_0 - \frac{v}{c} \omega_0 - i \frac{\Gamma}{2}} \right\rangle \Big|_{H=0} + \frac{\partial}{\partial \omega_0} \left\langle \frac{1}{\omega - \omega_0 - \frac{v}{c} \omega_0 - i \frac{\Gamma}{2}} \right\rangle \Big|_{H=0} \delta \omega_0 \quad (8.5)$$

Вспоминая (2.7), формулу (8.5) можно записать в виде

$$\text{Re}(n_{\pm} - 1) = \frac{2\pi N_F}{\hbar(2F+1)\Delta_D} g \sum_{M, M'} |M_{\pm}|_{M, M'}^2 \left( 1 + \frac{\partial \ln g}{\partial u} \Big|_{H=0} \cdot \delta \omega_0 \right)$$

График функции  $\frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial u}$  приведен на рисунке 5 в приложении. Величина  $\delta \omega_0$ , вызванная магнитным полем, равна  $g_0 \mu_N \frac{M}{F}$ . Матричные элементы  $M_{\pm}$  берутся между волновыми функциями без магнитного поля. Суммирование по  $M, M'$  производится элементарно. В результате получаем:

Таллий

$$1 \pm \frac{4}{3} \frac{\mu_N}{\Delta_D} \varepsilon, \quad \text{где} \quad \varepsilon = \varepsilon(u) = \frac{\partial}{\partial u} \ln g(u, v)$$

Поле, достаточное для имитации эффекта

$$H_2 = 5.9 \cdot 10^{-5} \frac{1}{\varepsilon} \text{ эв}$$

Свинец

$$1 \pm \frac{3}{2} \frac{\mu_N}{\Delta_D} \varepsilon, \quad H_2 = 4.0 \cdot 10^{-5} \frac{1}{\varepsilon} \text{ эв}$$

Висмут

$$1. \quad 1 \pm \frac{1}{8} (g_0 + g_1) \frac{\mu_N}{\Delta_D} \varepsilon \quad H_2 = 28 \cdot 10^{-5} \frac{1}{\varepsilon} \text{ эв}$$

$$2. \quad 1 \pm \left( \frac{10}{7} g_2 - \frac{3}{4} g_0 \right) \frac{\mu_N}{\Delta_D} \varepsilon \quad H_2 = 33 \cdot 10^{-5} \frac{1}{\varepsilon} \text{ эв}$$

$$3. \quad 1 \pm \left( \frac{7}{8} g_0 - \frac{1}{4} g_3 \right) \frac{\mu_N}{\Delta_D} \varepsilon, \quad H_2 = 32 \cdot 10^{-5} \frac{1}{\varepsilon} \text{ эв}$$

$$4. \quad 1 \pm \frac{1}{8} (g_0 + g_4) \frac{\mu_N}{\Delta_D} \varepsilon, \quad H_2 = 270 \cdot 10^{-5} \frac{1}{\varepsilon} \text{ эв}$$

Заметим, что поворот плоскости поляризации в магнитном поле за счет Зееман-эффекта, в отличие от поворота, возникающего из-за несохранения четности, является четной функцией отстройки  $\Delta$ . Это обстоятельство может быть эффективно использовано для борьбы с таким фоном.

### 9. Несохранение четности в переходах между компонентами СТС тяжелых атомов

Как уже отмечалось во введении, наблюдение несохранения четности в переходах между компонентами СТС дало бы информацию о другом взаимодействии - аксиального нуклонного тока с векторным электронным. В переходах между компонентами СТС работает, очевидно лишь та часть гамильтониана (3.4), которая содержит спин нуклона. Поскольку мы считаем, что гамильтониан взаимодействия электрона с ядром равен простой сумме взаимодействий электрона с нуклонами, составляющими ядро, то, для оболочечной модели, в этой части гамильтониана из всей суммы остаются лишь члены, соответствующие неспаренному нуклону ядра. (В рассматриваемых ниже стабильных изотопах таллия ( $\text{Tl}^{203}, \text{Tl}^{205}$ ) и цезия ( $\text{Cs}^{133}$ ) неспаренным является протон). Соответственно, степень циркулярной поляризации падает примерно в  $Z$  раз по сравнению с переходами между компонентами тонкой структуры.

Вычисление угла поворота плоскости поляризации радиоволны производится аналогично тому, как это было сделано для света в предыдущих разделах. Выражение для показателя преломления  $n_{\pm}$  упрощается, поскольку в переходах между компонентами СТС основного уровня при давлении паров от одного мм и выше доплеров-

ское уширение линии  $\Delta_2 \sim 10^5 \text{ сек}^{-1}$  много меньше ударного  $\Gamma_{\text{уд}} \gg 10^9 \text{ сек}^{-1}$  и поэтому оказывается несущественным. Пренебрегая в выражении для  $n_{\pm} - 1$  сдвигом  $\frac{\nu}{c} \omega$  в знаменателе, находим

$$n_{\pm} - 1 = \frac{2\pi N_F}{\hbar(2F+1)} \sum_{M, M'} \frac{|M_{\pm}|_{M, M'}^2}{\Delta + i\frac{\Gamma}{2}} = \frac{2\pi N_F \omega |\langle F || M || F' \rangle|^2}{3(2F+1)(\Delta + i\frac{\Gamma}{2}) \hbar} (1 \pm P) \quad (9.1)$$

Величина  $\text{Re}(n_{\pm} - 1)$  пропорциональна  $\frac{\Delta}{\Delta^2 + \Gamma^2/4}$  и имеет максимум при  $\Delta = \Gamma/2$ . Для такой отстройки угол поворота плоскости поляризации и коэффициент поглощения  $\alpha$  равны:

$$\alpha = \frac{4\pi N_F}{3(2F+1)\Gamma\hbar} |\langle F || M || F' \rangle|^2 \frac{\Delta E}{T} \quad (9.2)$$

$$\psi_{\text{max}} = \frac{1}{2} \alpha \ell P$$

Эти значения не зависят фактически от плотности атомов  $N$ , поскольку  $\Gamma \sim N$ . Фактор  $\Delta E/T \approx 10^{-3}$  учитывает то обстоятельство, что эффект пропорционален разности заселенностей нижнего и верхнего уровней  $N(1 - e^{-\Delta E/T}) \approx N \frac{\Delta E}{T}$ . Напомним, что  $\Delta E \approx 10^{-4} \text{ эВ} \approx 1^\circ \text{К}$ ; а  $T \approx 10^3 \text{ К}$ . С учетом этого фактора  $\ell_0 = \alpha^{-1}$  достигает нескольких километров (см. ниже). Соответствующего уменьшения эффекта, однако можно избежать, если сделать путь  $\ell$ , который проходит радиоволна в парах металла, сравнимым с  $\ell_0$ , так что  $\alpha \ell \approx 1$  и  $\psi \approx P$ . Увеличить путь до нескольких километров можно, например, используя кольцевой резонатор, или заставляя радиоволну многократно проходить один и тот же промежуток, на концах которого установлены четвертьволновые отражатели. Благодаря этим элементам, эффект при прохождении радиоволной промежутка в противоположных направлениях будет складываться, а не вычитаться. Кроме того, при наличии четвертьволновых отражателей углы поворота плоскости поляризации за счет магнитного поля при движении туда и обратно вычитаются, так что значительно снижается и ограничение на магнитное поле.

Заметим, также, что разная заселенность верхнего и нижнего уровней СТС может быть достигнута с помощью лазерного возбуждения одного из этих уровней. При этом, чтобы исключить

возможность оптической ориентации атомов, величина круговой поляризации лазерного излучения  $\xi$  должна быть, вообще говоря, меньше, чем  $P$ . Если у нижнего уровня СТС полный момент  $F=0$ , как, например, в  $Tl$ , то ограничение на  $\xi$  более слабое:  $\xi < P \cdot \frac{N_H}{N_B}$  где  $N_H$  и  $N_B$  заселенности нижнего и верхнего уровней СТС при наличии лазерного излучения,  $N_H \gg N_B$ . Фактор  $N_H/N_B$  возникает потому, что поворот плоскости поляризации, вызванный слабым взаимодействием, пропорционален  $N_H$ , а вызванный ориентацией атомов -  $N_B$ .

Перейдем к расчету  $\alpha$  и  $\psi_{\text{max}}$ .

Цезий.

Cs имеет  $Z = 55$ . Основное состояние атома  $6S_{1/2}$ , неспаренный протон в ядре находится в состоянии  $g_{7/2}$ . Компоненты СТС основного уровня имеют  $F = 3, 4$ , расстояние между ними  $\Delta E = 0,307 \text{ см}^{-1}$ . Ударная ширина линии в переходе между ними измерялась непосредственно в работе [49]. При температуре  $T = 540^\circ \text{К}$ ,  $\Gamma = 1.8 \cdot 10^{-9} N \text{ сек}^{-1}$ , плотность  $N$  должна здесь браться в  $\text{см}^{-3}$ . Приведенный матричный элемент  $M$  перехода равен

$$\langle 6S_{1/2} F=3 || M || 6S_{1/2} F=4 \rangle = -\frac{3\sqrt{7}}{2} \mu \quad (9.3)$$

По формуле (9.2) получаем  $\alpha = 0.082 \Delta E/T \text{ м}^{-1}$ . При указанной температуре это равно  $0,67 \cdot 10^{-4} \text{ м}^{-1}$ .

Вычислим теперь степень циркулярной поляризации  $P$ . Основной вклад в нее дает примешивание состояний  $|n P_{1/2}, F\rangle$ ,  $n \gg 6$ , которые образует возбужденный  $6S$  электрон. Состояния  $|n P_{3/2}, F\rangle$  (в нерелятивистском по электрону приближении) не примешиваются. Это легко показать следующим образом. В матричном элементе  $\langle 6S_{1/2} F | H_w | n P_{3/2}, F \rangle$  угловая часть нерелятивистского гамильтониана  $H_w$ , зависящая от спина, имеет вид  $(\vec{e}_p \vec{e}_e)(\vec{e}_e \vec{n})$ ,  $\vec{n} = \vec{r}/r$ .

Поскольку  $(\vec{e}_n) \Omega_{j'm} = \Omega_{j'e'm}$ , где  $\ell' = 2j - \ell$ , то при  $J = \frac{1}{2}$   $\vec{e}_n \Omega_{\frac{1}{2}1m} = \Omega_{\frac{1}{2}0m}$ , а при  $J = \frac{3}{2}$ ,  $\vec{e}_n \Omega_{\frac{3}{2}1m} = \Omega_{\frac{3}{2}2m}$ ; получающиеся справа сферические функции  $Y_{2m}$ , свертываясь в матричном элементе с  $Y_{00}$ , дают нуль.

Эффективные главные квантовые числа  $6s$  и  $6p$  электронов найдены по значениям энергий уровней, приведенных в [27]. Релятивистский фактор  $R = 2,8$ ;  $g$ -фактор  $g = -2/9$ . Используя формулу (3.22) для матричного элемента смешивания, легко найти примесь волновых функций другой четности к  $6s_{1/2}$  обусловленную той частью  $H_w$ , которая содержит спин ядра:

$$|6s_{1/2}, F\rangle' = |6s_{1/2}, F\rangle - i[F(F+1) - 33/2] \cdot 0,8 \cdot 10^{-13} \cdot (|6p_{1/2}, F\rangle + 0,26|7p_{1/2}, F\rangle + 0,15|8p_{1/2}, F\rangle + \dots) \chi_{2p} \quad (9.4)$$

Радиальные матричные элементы  $\tilde{P}_n = \int R_{6s} R_n P_{1/2} r^3 dr$  приведены в таблице 8. Их значения согласуются с силами осцилляторов из [50]. Для приведенного матричного элемента E1 перехода между компонентами СТС основного уровня получим

$$\langle 6s_{1/2}, F=3 || D || 6s_{1/2}, F=4 \rangle = +iea \cdot 0,53 \cdot 10^{-11} \chi_{2p} (1 + 0,015 + \dots) \quad (9.5)$$

Здесь кроме  $6p, 7p, 8p$  возбуждений учтены возбуждения  $6s$  электрона в непрерывный спектр, а также возбуждения  $5p$  электрона в  $6s$  оболочку, вклад которых составляет 15%. Используя (9.3) и (9.5) находим  $P$ :

$$P = -0,8 \cdot 10^{-9} \chi_{2p} \quad (9.6)$$

Снайденным ранее значением  $\alpha$  формула (9.2) даёт

$$\chi_{\max}/l = -0,3 \cdot 10^{-10} \chi_{2p} \frac{\Delta E}{T} \text{ рад/м} \approx -0,2 \cdot 10^{-13} \chi_{2p} \text{ рад/м} \quad (9.7)$$

	$\gamma$	$\tilde{P}_n$
6S	1,87	
6P	2,32	- 5,9
7P	3,36	- 0,35
8P	4,40	- 0,20

Табл. 8  
Эффективные гл. кв. числа и радиальные интегралы в  $C_s$ .

Таллий.

Спин ядра  $I = 1/2$ . Частота перехода между компонентами СТС с  $F = 0$  и  $F = I$  равна  $0,707 \text{ см}^{-1}$ . Ударная ширина линии в этом переходе неизвестна. Для оценки коэффициента поглощения возьмем ее такой же, как в цезии. Приведенный матричный элемент M1 перехода между компонентами СТС равен

$$\langle {}^2P_{1/2}, F=1 || M || {}^2P_{1/2}, F=0 \rangle = \frac{1}{3} \mu \quad (9.8)$$

Из (9.2) получаем:  $\alpha = 0,028 \frac{\Delta E}{T} \text{ м}^{-1}$ .

Как и в оптическом диапазоне, основной вклад в поляризацию  $P$  дают состояния  $|nS_{1/2}, F\rangle$ ,  $n \gg 7$ , а также автоионизационные состояния, образуемые конфигурацией  $6s6p^2$ . Несмотря на то, что теперь запрета по моменту нет, автоионизационные состояния с  $J = 3/2$  вклада не дают. Действительно, легко видеть, что из волновых функций

$$\left( \begin{array}{c} 1 \\ 2 \end{array} \frac{1}{2} \right)_{\frac{1}{2}}, \left( \begin{array}{c} 1 \\ 2 \end{array} \frac{3}{2} \right)_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}}, \left( \begin{array}{c} 3 \\ 2 \end{array} \frac{3}{2} \right)_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}}$$

которые образует конфигурация  $P^2S$  в  $jj$ -связи, одноэлектронным псевдоскалярным оператором лишь первая может примешиваться к волновой функции  $\left( \begin{array}{c} 1 \\ 2 \end{array} \frac{1}{2} \right)_{1/2}$  конфигурации  $S^2P$ . Используя формулу (3.22) и эффективные главные квантовые числа, приведенные в гл. 4, находим правильные волновые функции без учета автоионизационных:

$$|6p_{1/2}, F\rangle' = |6p_{1/2}, F\rangle - i[F(F+1) - 3/2] \cdot 10^{-12} \{ 3,04 \cdot |7s_{1/2}, F\rangle + 1,17|8s_{1/2}, F\rangle + 0,67|9s_{1/2}, F\rangle + 0,46|10s_{1/2}, F\rangle \} \chi_{2p} \quad (9.9)$$

Необходимые для расчетов радиальные интегралы таковы:

$$P_7 = 2,23; P_8 = 0,67; P_9 = 0,37; P_{10} = 0,28.$$

С учетом вклада непрерывного спектра состояния с возбужденным  $6p$  электроном вызывают циркулярную поляризацию излучения  $P' = 1,0 \cdot 10^{-8} \chi_{2p}$ . Вклад автоионизационных состояний находится точно также, как в разделе 4. Он равен  $P'' = +1,1 \cdot 10^{-8} \chi_{2p}$ . Соответственно, полная степень циркулярной поляризации равна  $P = P' + P'' = +2,1 \cdot 10^{-8} \chi_{2p}$ . По формуле (2.8) теперь получаем

$$\chi_{\max}/l = 2,9 \cdot 10^{-10} \chi_{2p} \frac{\Delta E}{T} \text{ рад/м} \approx 5 \cdot 10^{-13} \chi_{2p} \text{ рад/м} \quad (9.10)$$

В данном случае основное ограничение на магнитное поле возникает из-за смешивания компонент СТС с разными  $F$ ; при оптимальной расстройке Зееман-эффект не даёт вклада во вращение плоскости поляризации

Цезий

Правильные волновые функции

$$\begin{aligned} |6S_{1/2}, F=3, M\rangle &= \frac{\sqrt{16-M^2}}{4} \frac{\mu H}{\Delta E} |6S_{1/2}, F=4, M\rangle \\ |6S_{1/2}, F=4, M\rangle &+ \frac{\sqrt{16-M^2}}{4} \frac{\mu H}{\Delta E} |6S_{1/2}, F=3, M\rangle \end{aligned} \quad (9.II)$$

$$\Delta E = E(F=4) - E(F=3) = 0,307 \text{ см}^{-1}$$

$$n_{\pm} - 1 \sim \left( 1 \mp 2 \frac{\mu H}{\Delta E} \right)$$

Ограничение на магнитное поле  
Таллий

$$H_1 = 2,3 \cdot 10^{-6} \text{ эрст}$$

$$\begin{aligned} |6P_{1/2}, F=0\rangle' &= |6P_{1/2}, F=0\rangle - \frac{1}{3} \frac{\mu H}{\Delta E} |6P_{1/2}, F=1\rangle \\ |6P_{1/2}, F=1\rangle' &= |6P_{1/2}, F=1\rangle + \frac{1}{3} \frac{\mu H}{\Delta E} |6P_{1/2}, F=0\rangle \end{aligned} \quad (9.I2)$$

$$\Delta E = E(F=1) - E(F=0) \approx 0,707 \text{ см}^{-1}$$

$$n_{\pm} - 1 \sim 1 - \frac{2}{3} \frac{\mu H}{\Delta E}, \quad H_1 = 5,1 \cdot 10^{-4} \text{ эрст}$$

Мы глубоко благодарны Л.М.Баркову и М.С.Золоторёву за неизменный интерес к работе и ценные стимулирующие дискуссии, а также В.В.Фламбауму, совместно с которым были проведены численные расчёты. Мы искренне признательны У.К.Мартину и Е.Я.Шрейдер за сведения о спектрах редкоземельных элементов; Е.Я.Шрейдер обратила также наше внимание на принципиальную возможность использования полония в обсуждаемых экспериментах.

Пусть  $v$  - проекция скорости атома на направление излучения. Тогда за счет эффекта Доплера  $\omega_0 \rightarrow \omega_0 - \frac{v}{c} \omega_0$  и усреднение по максвелловскому распределению скоростей атомов означает следующее

$$\left\langle \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}} \right\rangle = \int_0^{\infty} \frac{W(v) dv}{\omega - \frac{v}{c} \omega_0 - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}} \quad (III)$$

где  $W(v)$  - максвелловская функция распределения, которая, как известно, равна

$$W(v) = \frac{1}{\sqrt{\pi} v_0} e^{-v^2/v_0^2}, \quad v_0 \equiv \sqrt{\frac{2KT}{m_{ат}}} \quad (2II)$$

Через безразмерные  $u$  и  $v$  формула (III) перепишется в следующем виде

$$\left\langle \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}} \right\rangle = \frac{1}{v_0 \omega} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2} dx}{u - x + iv} \quad (3II)$$

Сравнивая с (2.7) видим, что

$$\left. \begin{aligned} g(u, v) \\ f(u, v) \end{aligned} \right\} = \left. \begin{aligned} \text{Re} \\ \text{Im} \end{aligned} \right\} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2} dx}{u - x + iv} \quad (4II)$$

Чтобы свести получившийся интеграл к функции  $\Phi(z)$  воспользуемся параметризацией

$$\frac{1}{u - x + iv} = -i \int_0^{\infty} e^{is(u-x+iv)} ds \quad (5II)$$

Изменив порядок интегрирования и вычислив сначала интеграл по  $x$ , а затем по  $s$ , после простых преобразований получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2} dx}{u - x + iv} &= -i \sqrt{\pi} e^{-z^2} \left( 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-t^2} dt \right) = \\ &= -i \sqrt{\pi} e^{-z^2} (1 - \Phi(-iz)) \end{aligned} \quad (6II)$$

где  $Z = u + i v$ . Величины  $g$  и  $f$  несложно теперь определить с помощью численного интегрирования или по таблицам функции  $\Phi(z)$  [51]. Графики функций  $g(u, v)$  и  $f(u, v)$  приведены на рисунках 3 и 4. При  $u \gg 1$ ,  $v \ll 1$  можно также воспользоваться следующими приближенными выражениями:

$$g(u, v) \approx 1/u$$

$$f(u, v) \approx \sqrt{\pi} e^{-u^2} \operatorname{sign}(v) + v/u^2 \quad (7\Pi)$$

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Я.Б.Зельдович. ЖЭТФ 36, 964, 1959.
2. F.Curtis Michel. Phys.Rev. 138B, 408, 1965.
3. M.A.Bouchiat and C.C.Bouchiat. Phys.Lett. 48B, 111, 1974.
4. А.Н.Москалёв. Письма в ЖЭТФ 19, 229, 1974.
5. И.Б.Хриплович. ЯФ 21, 1046, 1975.
6. А.Н.Москалёв. Письма в ЖЭТФ 19, 394, 1974.
7. G.Feinberg and M.Y.Chen. Phys.Rev. 10D, 190, 1974.
8. J.Bernabeau, T.E.O.Ericson and C.Jarlskog. Phys.Lett. 50B, 467, 1974.
9. А.И.Вайнштейн, И.Б.Хриплович. Письма в ЖЭТФ 20, 80, 1974. ЖЭТФ 68, 3, 1975.
10. И.Б.Хриплович. Письма в ЖЭТФ 20, 686, 1974.
11. P.G.H.Sandars. Atomic Physics IV (Plenum Press, New York) 1975.
12. D.C.Soreide and E.N.Fortson. Bull.Am.Phys.Soc. 20, 491, 1975.
13. В.Н.Новиков, И.Б.Хриплович. Письма в ЖЭТФ 22, 162, 1975.
14. А.Н.Москалёв, Р.М.Рындин, И.Б.Хриплович. УФН 118, 409, 1976.
15. M.Brimicombe, C.E.Loving and P.G.H.Sandars. Oxford preprint, 1975.
16. E.M.Henley and L.Wilets. University of Washington preprint, 1976.
17. D.C.Soreide, D.E.Roberts, E.G.Lindahl, L.L.Lewis, G.R.Apperson and E.N.Fortson. Phys.Rev.Lett. 36, 352, 1976.
18. Л.М.Барков, М.С.Золоторёв. Доклад на XVIII Международной конференции по физике высоких энергий, Тбилиси, 1976.
19. P.G.H.Sandars, private communication.
20. Н.Н.Непримеров. Известия АН СССР 18, 368, 1954.
21. A.M.Portis and D.Teaney. J.Appl.Phys. 29, 1692, 1958.
22. С.Е.Бреслер, Э.Н.Казбеков, В.Н.Фомичев. ЖТФ 41, 1237, 1971.
23. S.Weinberg. Phys.Rev. 5D, 1412, 1972.
24. F.J.Nasert et al. Phys.Lett. 46B, 138, 1973.
25. A.Benvenuti et al. Phys.Rev.Lett. 32, 800, 1974.
26. И.И.Гольдман, В.Д.Кривченков. "Сборник задач по квантовой механике" стр.174, Москва, 1957.

27. Ch.E.Moore. Atomic Energy Levels, vol.3. NBS 467, Washington, 1958.
28. Н. П. Пенкин, Л.Н.Шабанова. Опт. и спектр. I4, I67, 1963.
29. A.Gallagher and A.Lurio. Phys.Rev. 136A, 87, 1964.
30. О.П.Сушков, В.В.Фламбаум. Опт. и спектр., в печати.
31. Е.Кондон, Г.Шортли. Теория атомных спектров. Москва, ИЛ, 1949.
32. W.R.S.Garton, W.H.Parkinson and E.M.Reeves. Can.J.Phys. 44, 1745, 1966.
33. G.V.Marr. Proc.Roy.Soc. 224A, 83, 1954.
34. G.V.Marr and R.Heppinstall. Proc.Phys.Soc. 87, 293, 1966.
35. И.И.Собельман. Введение в теорию атомных спектров. Москва, Физматгиз, 1963.
36. R.Hultgren et al. Selected Values of the Thermodynamic Properties of the Elements. American Society for Metals, 1973.
37. A.Flusberg, R.A.Weingarten and S.R.Hartman. Phys.Lett. 43A, 433, 1973.
38. G.H.Shortley, L.H.Aller, J.G.Baker and D.H.Menzel. Astrophys. J. 93, 178, 1941 (см. перевод в сборнике "Физические процессы в газовых туманностях", Москва, ИЛ, 1948).
39. E.Gerjuoy. Phys.Rev. 60, 233, 1941.
40. Н.П.Пенкин, И.Ю.Ю.Славенас. Опт. и спектр. I5, I54, 1963.
41. A.Baghdadi, J.B.Halpern and E.B.Salomon. Phys.Rev. 7A, 403, 1973.
42. D.A.Landman and A.Lurio. Phys.Rev. 1A, 1330, 1970.
43. L.Holmgren. Physica Scripta. 11, 15, 1975.
44. T.Andersen, O.H.Madsen and G.Sørensen. J.Opt.Soc.Am. 62, 1118, 1972.
45. S.Svanberg. Thesis. University of Gothenburg, May 1972 (цитируется по [44]).
46. A.E.S.Green, D.L.Sellin and A.S.Zachor. Phys.Rev. 184, 1, 1969.
47. О.П.Сушков, В.В.Фламбаум, И.Б.Хриплович. Опт. и спектр., в печ.
48. G.Gould. Phys.Rev. 101, 1828, 1956.
49. H.W.Moos and R.H.Sands. Phys.Rev. 135, 591, 1964.
50. P.M.Stone. Phys.Rev. 127, 1151, 1962.
51. К.А.Карпов. Таблицы функций  $W(z) = e^{-z^2} \int_0^z e^{x^2} dx$  в комплексной области. Москва, 1954.

Таблица 9

АТОМ	J	F	J'	F'	$\lambda, \text{Å}$	$\frac{\langle JFMDF \rangle}{3(2i+1)(2j+1)}$	$P \cdot 10^7$	$6 \cdot 10^{14} \text{ см}^2$	$\Delta/\Delta_D$	$\psi/1 \cdot 10^2 \text{ рад/м}$
Tl	1/2	1	3/2	2	12832,8	0,139	4,1	0,5	5,3	104
Pb <sup>208</sup>	0	0	1	1	12788,93	0,572	3,1	0,5	2,6	115
Bi	3/2	6	3/2	6	8757,45	0,056	3,3	$\leq 1$	2,0	26
			5/2	7	6477,23	0,007	4,2	$\leq 1$	1,4	6
			1/2	5	4616,39	0,010	7,5	$\leq 1$	1,5	15
			3/2	6	3015,22	0,0007	11,6	$\leq 1$	0,9	2

$$\operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{u-x-iV} dx$$

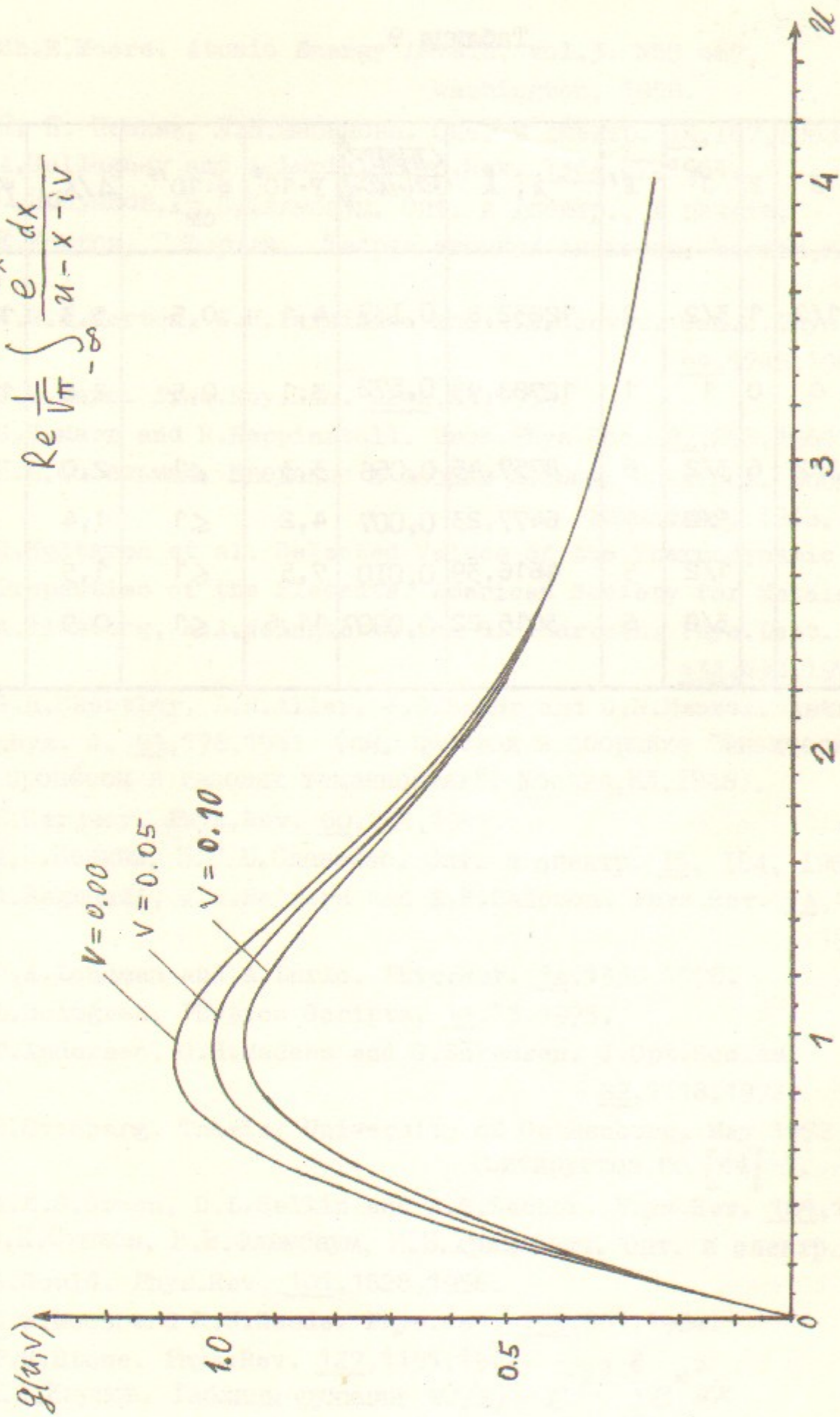
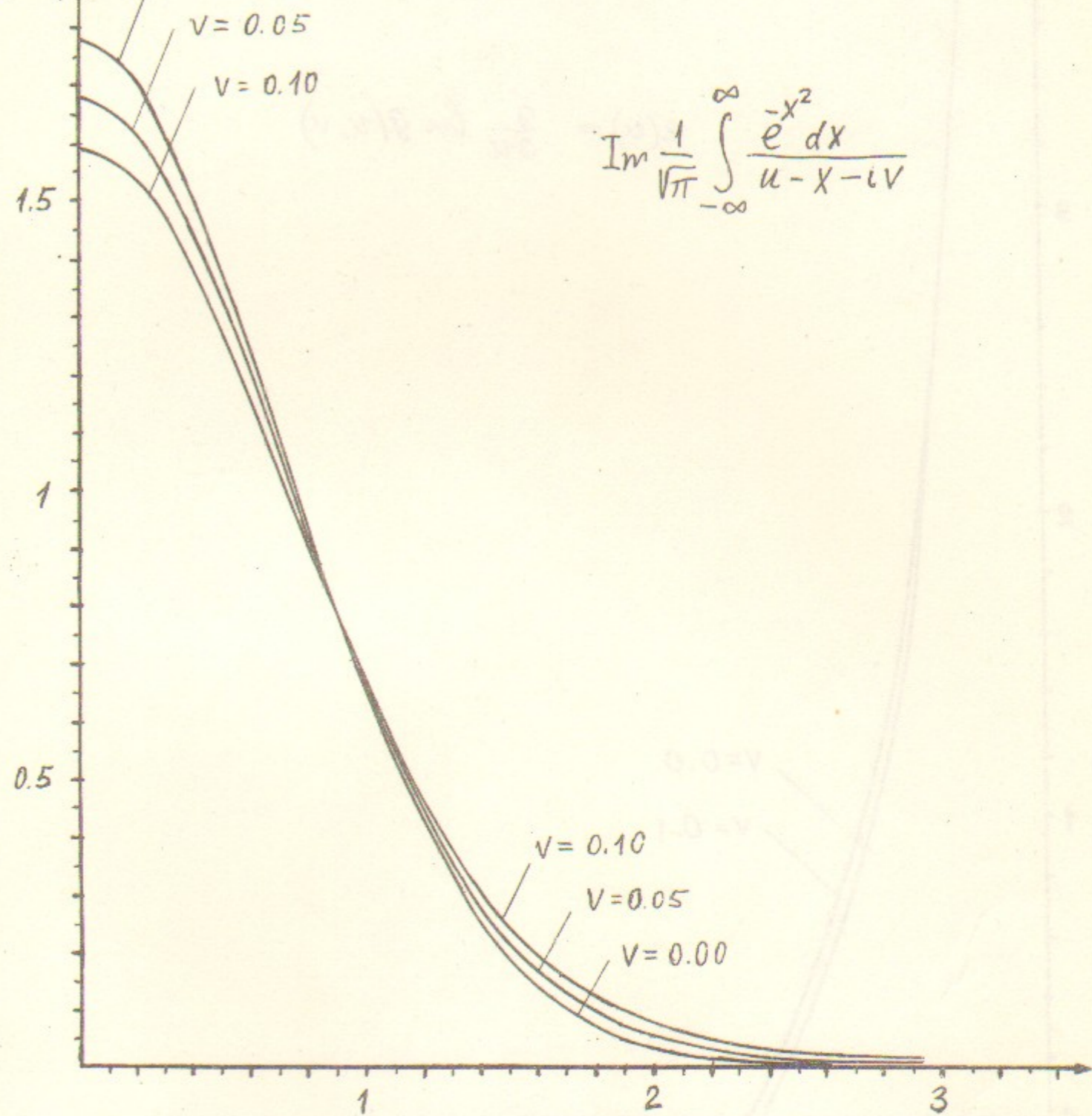


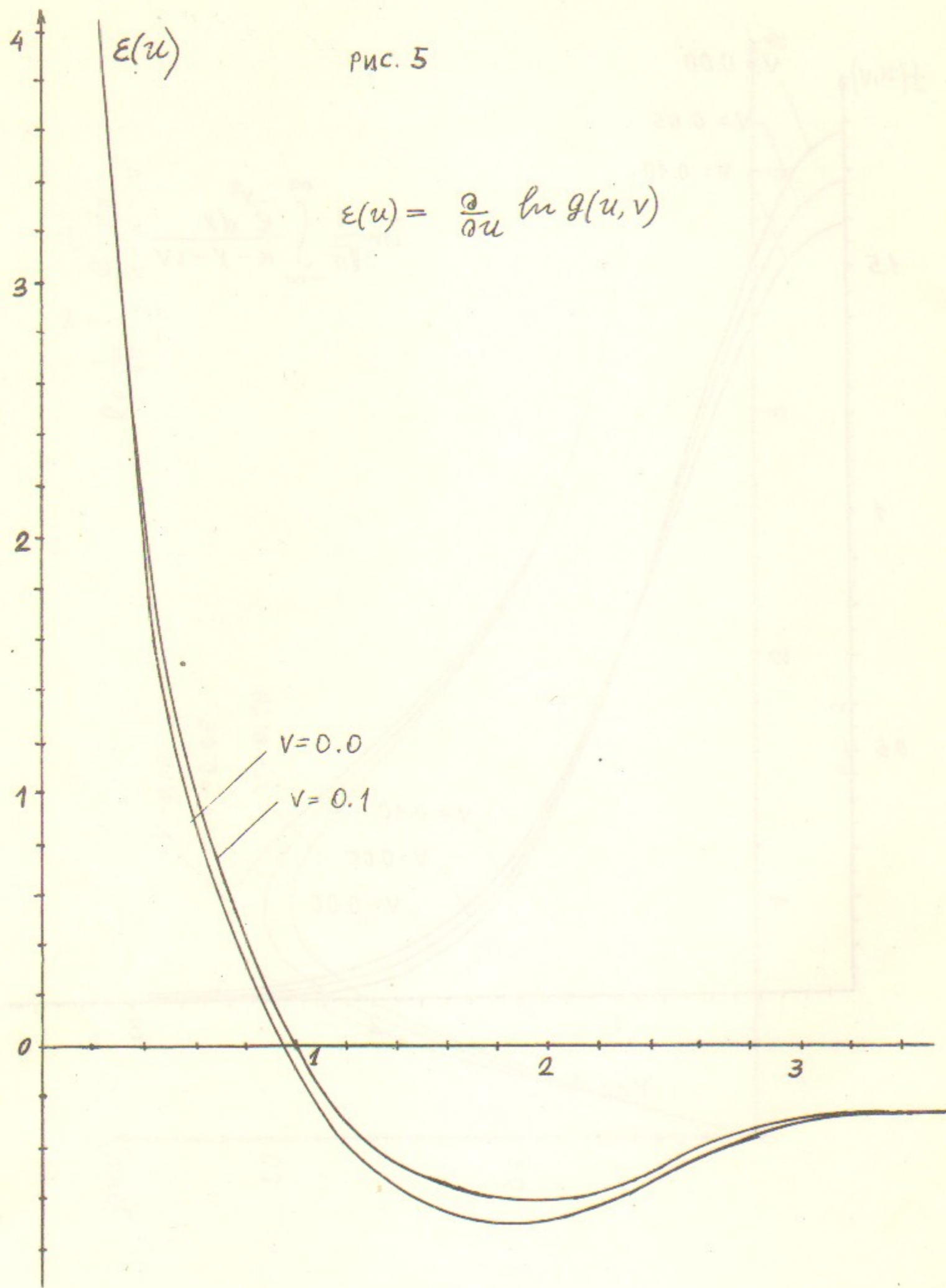
Рис. 3

$$f(u, V)$$



$$\operatorname{Im} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{u-x-iV} dx$$

Рис. 4



Работа поступила - 17 сентября 1975 г.

Ответственный за выпуск - С.Г.ПОПОВ

Подписано к печати 2.УП-1976г. МН 02852

Усл. 3,0 уч.-изд.л., тираж 150 экз. Бесплатно  
Заказ № 63.

Отпечатано на роталпринте ИЯФ СО АН СССР