ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 3299

В.А. Онищук

О ВОЗМОЖНОМ ВЛИЯНИИ СЛАБОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРУ МОЛЕКУЛЯРНЫХ УРОВНЕЙ

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

1967г.

Р4 - 3299

5007/3 пр.

В.А. Онищук

О ВОЗМОЖНОМ ВЛИЯНИИ СЛАБОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРУ МОЛЕКУЛЯРНЫХ УРОВНЕЙ

Ниже рассматриваются двухатомные молекулы, обладающие Λ -удвоением. Такие молекулы имеют ось симметрии и их состояния могут быть охарактеризованы квантовым числом Λ -проекцией орбитального момента электронной оболочки на ось молекулы. Если не учитывать влияния вращения молекулы на электронное движение, то электронные состояния с Λ и $-\Lambda$ (при равных прочих квантовых числах) будут вырождены. Взаимодействие электронного движения с вращением приводит к снятию этого вырождения (явление Λ - удвоения) /1/. Уровни образующихся дублетов обладают противоположными четностями. Величина расщепления Λ сравнительно мала. Если, например, электронное состояние имеет $|\Lambda| = 1$ и спин $S = 0$, то Λ может быть порядка 10^{-8} э.в. Близость Λ -дублетных уровней и их противоположная четность позволяют надеяться, что они являлись бы хорошим объектом для выявления некоторых взаимодействий, не сохраняющих четность.

В настоящей работе приведены оценки величины смешивания Λ -дублетных уровней с противоположной четностью, которое имело бы место при существовании не сохраняющего четность слабого взаимодействия через нейтральные токи, а также при наличии у электронов, либо нуклонов электрических дипольных моментов. Это смешивание должно происходить уже в первом порядке по рассматриваемым взаимодействиям, в то время как обычное слабое взаимодействие через заряженные токи может смешивать Λ -дублетные уровни лишь во втором порядке.

Сначала рассмотрим нейтральные токи. С учетом только членов порядка $\frac{V}{C}$, где V - величина скорости электрона, такому взаимодействию между электронами соответствует псевдоскалярный потенциал вида

$$V_{ee} = -\frac{f}{2mc} \sum_{i>j} [(\vec{\sigma}_j - \vec{\sigma}_i)(\vec{p}_j - \vec{p}_i)\delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) + 8(\vec{r}_i - \vec{r}_j)(\vec{\sigma}_i - \vec{\sigma}_j)(\vec{p}_i - \vec{p}_j) +$$

$$+ i[\vec{\sigma}_j \vec{\sigma}_i]((\vec{p}_j - \vec{p}_i)\delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j))], \tag{1}$$

а взаимодействию электронов с протонами и нейтронами ядер – потенциал вида

$$V_{eN} = \frac{f}{2mc} \sum_i \{ (\vec{I}_1 \vec{p}_i)\delta(\vec{r}_i - \vec{R}_1) + (\vec{I}_2 \vec{p}_i)\delta(\vec{r}_i - \vec{R}_2) + \delta(\vec{r}_i - \vec{R}_1)(\vec{I}_1 \vec{p}_i)$$

$$+ \delta(\vec{r}_i - \vec{R}_2)(\vec{I}_2 \vec{p}_i) + ((\vec{\sigma}_i \vec{p}_i)[A_1 \delta(\vec{r}_i - \vec{R}_1) + A_2 \delta(\vec{r}_i - \vec{R}_2)]) + \tag{2}$$

$$+ i\vec{I}_1([\vec{\sigma}_i \vec{p}_i]\delta(\vec{r}_i - \vec{R}_1)) + i\vec{I}_2([\vec{\sigma}_i \vec{p}_i]\delta(\vec{r}_i - \vec{R}_2)) \}.$$

В приведенных выражениях $f \approx \frac{G\hbar^3}{m_p^2 c}$, где G – безразмерная константа слабого взаимодействия через нейтральные токи, m_p – масса протона; $\vec{r}_i$, $\vec{p}_i$, $\vec{\sigma}_i$ – радиус-вектор, оператор-импульс и спиновая матрица i-го электрона, m – масса электрона; A_1, $\vec{I}_1$, $\vec{R}_1$ (A_2, $\vec{I}_2$, $\vec{R}_2$) – атомный номер, спин и координата первого (второго) ядра в молекуле; запись $([\vec{\sigma}_i \vec{p}_i]\delta(\vec{r}_i - \vec{R}_{1,2}))$ и $((\vec{p}_j - \vec{p}_i)\delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j))$ обозначает, что операторы $[\vec{\sigma}_i \vec{p}_i]$ и $(\vec{p}_j - \vec{p}_i)$ действуют только на δ-функцию. Суммирование в формулах (1) и (2) ведется по всем электронам молекулы.

Если обозначить через ψ_+ и ψ_- волновые функции Λ-дублетных состояний с положительной и отрицательной четностью соответственно, то коэффициент смешивания дается выражением $\frac{<\psi_- / V_{ee} + V_{eN} / \psi_+>}{\Delta}$. Можно показать, что по порядку величины он равен

$$(A_1 + A_2) \frac{G\hbar^3}{m_p^2 c \, r_{мол} \Delta} \frac{v}{c} \max\{a, b\}, \tag{3}$$

где a и b есть отношения расстояния между компонентами тонкой структуры и соответственно расстояния между соседними вращательными уровнями к расстоянию между различными электронными термами, $r_{мол}$ объем молекулы. Положив $a \approx \alpha = \frac{1}{137}$, $b \approx 10^{-4}$, $r_{мол} = 10^{-24}$ см^3, $\frac{v}{c} \approx \alpha$, $A_1 + A_2 = 10^2$ и выражая Δ в э.в., мы получим для коэффициента смешивания оценку

$$\gamma_1 = \frac{|<\psi_+ | V_{ee} + V_{eN} | \psi_->|}{\Delta} \approx G \frac{10^{-9}}{\Delta}. \tag{4}$$

Будем теперь считать, что одно из ядер молекулы обладает электрическим дипольным моментом, направленным по спину ядра $\vec{D} = D\vec{I}$ [2], чему в гамильтониане взаимодействия соответствует член $\hat{V} = -D\vec{I}\vec{E}$, где $\vec{E}$ – электрическое поле, действующее в месте расположения ядра, обладающего дипольным моментом. При этом смешивание Λ-дублетных уровней имеет место лишь в приближении, учитывающем сверхтонкое взаимодействие. Коэффициент смешивания по порядку величины равен

$$\gamma_2 = \frac{De}{a_0^2 \Delta} c. \tag{5}$$

Здесь a_0 – боровский радиус, c – отношение величины сверхтонкого расщепления к расстоянию между различными электронными термами. Подставляя вместо D верхнюю экспериментальную границу для электрического дипольного момента протона $D \leq 1{,}3 \cdot 10^{-13}$ см e [3] (для нейтрона $D \leq 2{,}4 \cdot 10^{-20}$ см e [4]) и полагая $c = 10^{-7}$, мы получим следующую оценку

$$\gamma_2 \leq \frac{10^{-11}}{\Delta}, \tag{6}$$

где Δ снова выражено в э.в.

Рассмотрим, наконец, случай, когда электрическим дипольным моментом обладает электрон. Имеются две возможности: либо электрический дипольный момент электрона не зависит от орбитального движения электрона и направлен по его спину, либо дипольный момент существенно зависит от состояния орбитального движения. В приближении Паули первой возможности отвечает взаимодействие [5]

$$V_1 = \zeta \sum_i \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma}_i \vec{E}_i, \tag{7}$$

а второй [6]

$$V_2 = \xi \frac{e\hbar}{2mc} \sum_i [\, i \int [\vec{E}_i\, d\vec{r}_i]\, \vec{\nabla}_i - \frac{3}{2} (\vec{\sigma}_i \vec{E}_i) + \frac{1}{2} \int (\mathrm{div}\, \vec{E}_i) \vec{\sigma}_i\, d\vec{r}_i \,, \qquad (8)$$

где ζ – безразмерная константа, характеризующая величину электрического дипольного момента, $\vec{E}_i$ – поле, действующее на i -ый электрон с координатой $\vec{r}_i$ x). Интегралы в выражении (8) являются неопределенными, а суммирование в обоих выражениях ведется по всем электронам молекулы. Смешивание под действием возмущения V_1 появляется только в приближении, учитывающем спин-орбитальное взаимодействие. Коэффициент смешивания по порядку величины равен

$$\gamma_3 = \zeta \frac{e\hbar}{mc} \frac{e}{a_0^2 \Delta} a \,, \qquad (9)$$

где a имеет тот же смысл, что и в выражении (3).

Смешивание под действием возмущения V_2 может иметь место даже в приближении, не учитывающем спин-орбитального взаимодействия. В этом случае коэффициент смешивания имеет порядок величины

$$\gamma_4 = \zeta \frac{e\hbar}{mc} \frac{e}{z a_0^2 \Delta} \,. \qquad (10)$$

Смешивание исследуемых уровней можно было бы обнаружить по наблюдению оптически запрещенных переходов. Действительно, рассмотрим какие-либо Λ-дублетные уровни возбужденного электронного состояния, с одного из которых возможен E1 переход на третий уровень (на рис. 1 сбоку уровней выписаны их четности). Теперь, если в результате некоторого взаимодействия произойдет смешивание верхних уровней, то станет возможным запрещенный ранее переход $(-) \to (-)$ xx). Следует однако, иметь в виду, что отделить запрещенную линию от разрешенной можно лишь в том случае, если величина Δ больше или сравнима с нею, например, при $\Lambda \gtrsim 10^{-7}$ э.в.

x) Выражение (8) не содержится явным образом в работе /6/, но легко может быть получено из формулы (31) упомянутой работы.

xx) Мы пренебрегаем M1 и E2 переходами $(-() \to (-)$, вероятность которых приблизительно в 10^{-8} раз меньше вероятности E1-перехода $(+) \to (-)$.

Подставляя в выражения (4), (6), (9) и (10) $\Lambda = 10^{-7}$ э.в., мы получим для коэффициентов смешивания следующие оценки

$$\gamma_1 \leq G\, 10^{-2} ; \quad \gamma_2 \leq 10^{-4} ; \quad \gamma_3 < 10^{4} \zeta ; \quad \gamma_4 < 10^{6} \zeta \,.$$

Константа G заведомо меньше безразмерной константы слабого взаимодействия через заряженные токи $G \ll 10^{-5}$, а как было найдено в работе /7/, в предположении, что дипольный момент электрона направлен по его спину, $\zeta \leq 10^{-10}$. Поэтому смешивание уровней, которое возникло бы при существовании взаимодействий $\dot{V}_{ee} + V_{eN}, V_1$ и V было бы ненаблюдаемо мало. Смешивание уровней при наличии взаимодействия V_2 могло бы оказаться и наблюдаемым – в данном случае все зависит от величины константы ζ в выражении для V_2.

Таким образом не исключено, что измерение величины смешивания Λ -дублетных уровней может дать сведения о дипольном моменте электрона. Заметим, однако, что для проведения такого измерения необходимо полностью изолировать молекулу от влияния внешних электрических полей.

В заключение автор рад поблагодарить М.И. Подгорецкого за предложение темы работы и за многочисленные дискуссии и В.Л. Любошица за обсуждение и критические замечания.

Литература

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика § 88 Физматгиз, 1963.
2. L.I.Shiff. Phys.Rev., 132, 2194(1963).
3. R.M.Sternheimer. Phys.Rev., 113, 828(1959).
4. I.H.Smith, E.M.Purcele and N.F.Rams'ey. Phys.Rev., 108, 120(1957).
5. E.E.Salpeter. Phys.Rev., 112, 1642(1958).
6. M.Sachs. Ann.Phys., 6, N 3(1959).
7. Sandars and Lipworth. Phys.Rev.,Lett., 13, 718(1965).

Рукопись поступила в издательский отдел
24 апреля 1967 г.

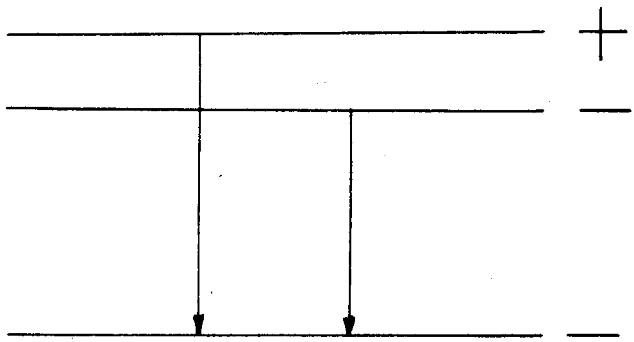

Рис. 1