УДК 535.518 : 546.683

ТЕНЗОРНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ ТАЛЛИЯ

Ю. И. Сковпень и *В. В. Фламбаум*

Рассчитана тензорная поляризуемость $6p_{1/2}$- и $6p_{3/2}$-состояний таллия.

Поводом для написания данной статьи послужило измерение в работе [1] тензорной поляризуемости (ТП) $6p_{1/2}$-состояния таллия. Как известно, ТП уровня с полным электронным моментом $j=1/2$ отлична от нуля благодаря сверхтонкому взаимодействию электронов с ядром. Ранее в работе [2] была вычислена ТП состояния $3p_{1/2}$ в алюминии. В этом случае ТП определяется сверхтонким смешиванием состояний $3p_{1/2}$ и $3p_{3/2}$. Так как в алюминии мало́ тонкое расщепление $3p$-уровня, то недиагональный матричный элемент от тензорного оператора Штарка между состояниями $3p_{1/2}$ и $3p_{3/2}$ можно выразить через ТП уровня $3p_{3/2}$, известную из эксперимента. Вычисление ТП уровня $6p_{1/2}$ в таллии имеет существенные отличия. Тонкое расщепление уровней $6p_{1/2}$ и $6p_{3/2}$ сравнительно велико, поэтому необходимо учитывать сверхтонкое смешивание других состояний. Особенностью таллия является также то, что при вычислении недиагонального матричного элемента от тензорного оператора Штарка между состояниями $6p_{1/2}$ и $6p_{3/2}$ нельзя использовать экспериментальное значение ТП для уровня $6p_{3/2}$, так как в таллии радиальные интегралы и энергетические знаменатели для возбуждений $6p_{1/2}$- и $6_{3/2}$-электронов заметно различаются. И, наконец, в таллии важную роль играет кулоновское смешивание состояний $6s^2 6p$ и $6sns6p$.

Кроме ТП состояния $6p_{1/2}$, в настоящей работе рассчитана также тензорная поляризуемость состояния $6p_{3/2}$, которая была измерена в [3]. Вычисленные нами значения ТП состояний $6p_{1/2}$ и $6p_{3/2}$ находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [1, 3].

Помимо расчета тензорной поляризуемости самого по себе, наша работа преследует еще одну цель — оценку точности вычислений эффектов несохранения четности в тяжелых атомах [4–10]. Проблема состоит в том, что результаты различных групп по расчету этих эффектов расходятся до двух раз. В связи с этим возникло заблуждение, что такое расхождение лежит в пределах точности вычислений в тяжелых атомах. Мы же считаем, что точность полуэмпирических расчетов [4–6] не хуже $10\div20\%$, что подтверждается результатами данной работы.

Величина эффектов несохранения четности зависит от значения волновой функции внешнего электрона на ядре и матричных элементов электрического дипольного момента. Нетрудно заметить, что сходную структуру имеет тензорная поляризуемость состояний $p_{1/2}$, так как матричный элемент сверхтонкого взаимодействия, так же как и слабого, определяется поведением волновой функции электрона вблизи ядра. Таким образом, согласие между расчетным и экспериментальным значением ТП для состояния $6p_{1/2}$ является аргументом в пользу правильности вычислений эффектов несохранения четности в таллии, свинце и висмуте, проведенных в работах [4–6].

Сдвиг уровней в электрическом поле выражается через скалярную и тензорную поляризуемости следующим образом:

$$\Delta W = -\frac{1}{2}\alpha_s E^2 - \frac{1}{4}\alpha_t \frac{3M^2 - F(F+1)}{3F^2 - F(F+1)}(3E_z^2 - E^2), \tag{1}$$

где α_s — скалярная поляризуемость, α_t — тензорная поляризуемость, F — полный момент атома, M — его проекция.

Как указывалось выше, ТП состояния $6p_{1/2}$ возникает благодаря сверхтонкому смешиванию, т. е. возникает в третьем порядке теории возмущений

$$\alpha_{ik} = -2\sum_{n,\,m}\left[2\frac{\langle 0 | H^{hfs} | n\rangle\langle n | d_\alpha | m\rangle\langle m | d_\beta | 0\rangle}{(E_0 - E_n)(E_0 - E_m)} + \frac{\langle 0 | d_\alpha | n\rangle\langle n | H^{hfs} | m\rangle\langle m | d_\beta | 0\rangle}{(E_0 - E_n)(E_0 - E_m)}\right]\times$$
$$\times\left[\frac{1}{2}(\delta_{\alpha i}\delta_{\beta k} + \delta_{\alpha k}\delta_{\beta i}) - \frac{1}{3}\delta_{ik}\delta_{\alpha\beta}\right], \tag{2}$$
$$\alpha_t \equiv \alpha_{zz}(F = 1,\ M = 1),$$

где H^{hfs} — гамильтониан сверхтонкого взаимодействия, d_i — оператор электрического дипольного момента. Основной вклад в ТП дают следующие переходы:

$$\left.\begin{aligned}
&5d^{10}6s^26p_{1/2} \xrightarrow{H^{hfs}} 5d^{10}6s^2np_{3/2} \xrightarrow{d} i \xrightarrow{d} 5d^{10}6s^26p_{1/2},\ \ n \geqslant 6,\ \ i = 5d^{10}6s^2ms,\ \ 5d^{10}6s^2md,\\
&\qquad 5d^{10}6s6p_{1/2}^2,\ \ 5d^96s^26p_{1/2}^2,\ \ m \geqslant 7;\\
&6s^26p_{1/2} \xrightarrow{d} 6s^2ns \xrightarrow{H^{hfs}} 6s^2ms \xrightarrow{d} 6s^26p_{1/2},\ \ n,\ m \geqslant 7;\\
&6s^26p_{1/2} \xrightarrow{d} 6s6p_{1/2}^2 \xrightarrow{H^{hfs}} 6s6p_{1/2}^2 \xrightarrow{d} 6s^26p_{1/2};\\
&6s^26p_{1/2} \xrightarrow{d} 6s6p_{1/2}6p_{3/2} \xrightarrow{H^{hfs}} 6s6p_{1/2}^2 \xrightarrow{d} 6s^26p_{1/2};\\
&6s^26p_{1/2} \xrightarrow{d} 6s6p_{1/2}^2 \xrightarrow{d} 6s6p_{1/2}ns \xrightarrow{H^{hfs}} 6s^26p_{1/2},\ \ n \geqslant 7;\\
&6s^26p_{1/2} \xrightarrow{d} 6s^2ns \xrightarrow{d} 6s6p_{1/2}ns \xrightarrow{H^{hfs}} 6s^26p_{1/2},\ \ n \geqslant 7.
\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

Матричные элементы сверхтонкого взаимодействия удобно записать в виде [11]

$$\langle 6p_{1/2} | H^{hfs} | np_{3/2}\rangle = \frac{1}{9\sqrt{2}}\frac{\Omega}{\nu_6^{3/2}\nu_n^{3/2}} R_{13}k_{13}N_{13}I_z, \tag{4}$$

$$\langle ns_{1/2} | H^{hfs} | ms_{1/2}\rangle = \frac{8}{3}\frac{\Omega}{\nu_n^{3/2}\nu_m^{3/2}} R_1K_{ns,\,ms}\mathbf{Ij}, \tag{5}$$

где ν_i — эффективное главное квантовое число электрона, $\Omega = (\mu/I)Z\alpha^2(m_e/m_p)(m_e e^4/2\hbar^2)$, μ — магнитный момент ядра, I — полный момент ядра, $R_1 = 3/\gamma_1^2(4\gamma_1^2 - 1)$ и $R_{13} = -4\sin[\pi(\gamma_3 - \gamma_1)]/\pi(Z\alpha)^2$ — релятивистские факторы, $\gamma = \sqrt{\varkappa^2 - (Z\alpha)^2}$, $\varkappa = (-1)^{j+\frac{1}{2}-l}\left(j + \frac{1}{2}\right)$, j и l — полный и орбитальный моменты электрона, K_i — отношение точного матричного элемента сверхтонкого взаимодействия к матричному элементу, вычисленному в квазиклассическом приближении Ферми—Сегрэ [12], N_{13} — параметр, учитывающий влияние кулоновского смешивания между $6s^2np$ и $6sksmp$ на матричный элемент (4). Параметры K_{13} и N_{13} вычислены в работе [11] (отметим, что $K_{13} \approx \sqrt{K_1K_3}$, K_1 и K_3 — соответствующие коэффициенты для электронов $p_{1/2}$ и $p_{3/2}$), Величина сверхтонкого расщепления уровня $7s$ известна из эксперимента [13]: $\Delta E_{7s} = 0.417$ см$^{-1}$. Отсюда находим, что $K_{7s,\,7s} \approx 0.86$. В статье [14] было показано, что $K_{6s,\,6s} \approx 1$. Остальные K_i мы определяем следующим образом: $K_{ms,ns} = K_{7s,\,7s}$, $K_{6s,\,ms} = \sqrt{K_{7s,\,7s}}$; $n,\ m \geqslant 7$. Необходимые для расчета ТП матричные элементы дипольного момента найдены в работе [14]. Вклад непрерывного спектра вычисляется с помощью волновых функций, полученных численным решением уравнения Дирака с эффективным потенциалом, предложенным в работе [15].

Используя (2), (3), (4) и (5), получим следующее значение ТП состояния $6p_{1/2}$:

$$\alpha_t(6p_{1/2}) = -3.7 \cdot 10^{-8} \text{ Гц/(В/см)}^2.$$

Экспериментальное значение из [1]

$$\alpha_t(6p_{1/2}) = -(3.74 \pm 0.09) \cdot 10^{-8} \text{ Гц/(В/см)}^2.$$

Столь хорошее совпадение расчета с экспериментом является, по-видимому, случайным, так как из-за сильных сокращений различных вкладов в (2) вряд ли можно было ожидать точность лучше, чем $10 \div 20\%$.

Расчет ТП состояния $6p_{3/2}$ существенно проще, чем для $6p_{1/2}$, так как она отлична от нуля и без учета сверхтонкого взаимодействия. Результат наших вычислений

$$\alpha_t(6p_{3/2}) = -5.85 \cdot 10^{-3} \text{ Гц/(В/см)}^2$$

хорошо согласуется с экспериментальным значением

$$\alpha_t(6p_{3/2}) = -(6.04 \pm 0.08) \cdot 10^{-3} \text{ Гц/(В/см)}^2.$$

Мы благодарны О. П. Сушкову и И. Б. Хрипловичу за многочисленные обсуждения.

Литература

[1] H. Gould. Phys. Rev., *14A*, 922, 1976.
[2] J. R. P. Angel, P. G. H. Sandars, G. K. Woodgate. Proc. Roy. Soc. (Lond.), *A338*, 95, 1974.
[3] F. R. Petersen, H. G. Palmer, J. H. Shirley. Bull. Am. Phys. Soc., *13*, 1674, 1968.
[4] В. Н. Новиков, О. П. Сушков, И. Б. Хриплович. ЖЭТФ, *71*, 1665, 1976.
[5] О. П. Сушков, В. В. Фламбаум, И. Б. Хриплович. Письма ЖЭТФ, *24*, 502, 1976.
[6] В. В. Фламбаум. Ядерная физика, *24*, 383, 1976.
[7] M. Brimicombe, C. E. Loving, P. G. H. Sandars. J. Phys. B, *9*, L 237, 1976.
[8] E. M. Henley, L. Wilets. Phys. Rev., *A14*, 1411, 1976.
[9] P. G. H. Sandars, R. M. Sternheimer. Phys. Rev. *A11*, 473, 1975.
[10] E. M. Henley, M. Klapisch, L. Wilets. Phys. Rev. Lett., *39*, 994, 1977.
[11] О. П. Сушков, В. В. Фламбаум, И. Б. Хриплович. Опт. и спектр., *44*, 3, 1978.
[12] E. Fermi, E. Segre. Mem. Acad. d'Italia, *4*, 131, 1933.
[13] S. Pollack, E. Wong. Am. J. Phys., *39*, 1388, 1971.
[14] O. P. Sushkov, V. V. Flambaum. J. Quant. Spectr. Rad. Tr., 1978.
[15] D. V. Neuffer, E. D. Commins. Phys. Rev., *16A*, 844, 1977.

Поступило в Редакцию 15 февраля 1978 г.