

$z$	$\chi_{\text{He}}$	$A/\bar{A}$	$\chi_{\text{He}}^{[10]}$	$\chi_{\text{He}}^{[11]}$
2	-0.18625 (-4)	1.0004	-0.21031 (-4)	-0.21185 (-4)
3	-0.74885 (-5)	1.0010	-0.79021 (-5)	-0.79217 (-5)
4	-0.39893 (-5)	1.0017	-0.41150 (-5)	-0.41193 (-5)
5	-0.24668 (-5)	1.0027	-0.25184 (-5)	-0.25200 (-5)
10	-0.57140 (-6)	1.0107		
20	-0.13474 (-6)	1.0428		
30	-0.57030 (-7)	1.0969		
40	-0.30240 (-7)	1.1736		
50	-0.17951 (-7)	1.2741		
60	-0.11325 (-7)	1.3997		
70	-0.73623 (-8)	1.5521		
80	-0.48174 (-8)	1.7332		
90	-0.30985 (-8)	1.9453		
100	-0.18962 (-8)	2.1910		

Учет межэлектронного взаимодействия в первом порядке теории возмущений приводит к возрастанию  $\chi_{\text{He}}$  по сравнению с  $\chi_{\text{He}}^{(0)}$ . При  $z=2$  это возрастание составляет  $\sim 40\%$ , с ростом  $z$  его роль уменьшается ( $\sim 2\%$  при  $z=100$ ). Как видно из таблицы, вклад релятивистских эффектов в  $A$  существенно зависит от заряда ядра  $z$  ( $\sim 0.3\%$  при  $z=5$ ) и ( $\sim 100\%$  при  $z=100$ ). Релятивистские поправки к  $\chi_{\text{He}}$  при этих значениях  $z$  составляют  $\sim 0.2\%$  и  $\sim 60\%$  соответственно. Отличие численных значений  $\chi_{\text{He}}$  от расчетов [10, 11] обусловливается тем, что вклад следующих порядков теории возмущений по  $1/z$  (второй и выше) в данной работе не учитывался.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Б. Тейлор, В. Паркер, Д. Лангенберг. «Фундаментальные константы и квантовая электродинамика». Атомиздат, М., 1972.
- [2] M. W. Dravin, J. Ramette. Z. Naturforsch., 34A, 1041, 1979.
- [3] A. R. Edmonds. J. Phys., 6B, 1663, 1973.
- [4] Я. И. Грановский, В. И. Нечет. Сб. докл. Всес. сем. по теории атомов и атомных спектров. Рига, 1, 71, 1974.
- [5] N. L. Manakov, S. A. Zaryagaev. Phys. Lett., 58A, 23, 1976.
- [6] M. Sternheim. Phys. Rev., 128, 676, 1962.
- [7] Н. Л. Манаков, В. Г. Пальчиков. Опт. и спектр., 46, 1216, 1979.
- [8] В. Г. Пальчиков. Изв. вузов, Физика, 23, 105, 1980.
- [9] С. А. Запругаев, Н. Л. Манаков. Ядерная физика, 23, 917, 1976.
- [10] С. С. Baker, К. Е. Vanuward. Phys. Rev., 188, 57, 1969.
- [11] J. T. Ajif, H. S. J. Vedene. Phys. Rev., 15A, 1, 1977.

Поступило в Редакцию 30 марта 1981 г.

УДК 539.184.26

### О ВКЛАДЕ НЕКОНТАКТНЫХ ЧЛЕНОВ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СДВИГИ ЛИНИЙ СВЕРХТОНКИХ ПЕРЕХОДОВ В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ ЩЕЛОЧНЫХ АТОМОВ И ВОДОРОДА

В. В. Батыгин и И. М. Соколов

Оператор, ответственный за сверхтонкое (СТ) расщепление энергетических уровней атома, может быть представлен в виде [1]

$$H_{\text{СТ}} = -4\mu\mu_e \sum_{i=1}^N \left( \frac{8\pi}{3} S_i I_i \delta(r_i) + \frac{I_i I}{r^3} - \frac{S_i I r_i^2 - (S_i r_i)(I r_i)}{r_i^5} \right), \quad (1)$$

где  $S_i, I_i$  — операторы спина и орбитального момента  $i$ -го электрона,  $I$  — оператор спина ядра,  $\mu_e$  — электронный магнетон Бора,  $\mu$  — магнитный момент ядра, суммирование ведется по всем валентным электронам системы. Первое слагаемое называют контактным членом Ферми, остальные описывают диполь-дипольное взаимодействие ядерного и электронного моментов. В случае изолированного атома, находящегося в  $s$ -состоянии, энергия СТ-перехода определяется в силу сферической симметрии электронной оболочки только контактным взаимодействием. В квантовых стандартах частоты, магнетометрах и некоторых других приборах, где используются переходы между СТ-уровнями, обычной является ситуация, когда излучающие атомы находятся в буферной газовой среде. Столкновения с инертными атомами среды приводят к примешиванию других состояний, в том числе и состояний, не обладающих сферической симметрией, поэтому необходимо при исследовании сдвигов и уширений линий СТ структуры учесть также диполь-дипольное взаимодействие. В известных нам опубликованных работах [2] такого учета проведено не было, несмотря на отсутствие параметра малости, позволяющего пренебречь неконтактными членами. Целью данной работы является аккуратный учет неучтенных ранее членов взаимодействия и ликвидация таким образом имеющегося пробела.

Учет дополнительного члена в  $H_{от}$  приводит к появлению дополнительного слагаемого  $\delta\omega_{g-g}$  в выражении для локального сдвига  $\delta\omega$  [2], который представляет собой разность между частотами СТ-перехода в квазимолекуле, образуемой активным и буферным атомами, расположенными на расстоянии  $R$ , и частоты СТ-перехода в изолированном активном атоме.

$$\delta\omega_{g-g} = \frac{1}{\rho_0(1-S_0)} \frac{3}{N} \frac{1}{16\pi} \sum_k' \frac{V_{0k} - U_{0k}}{E_0 - E_k} \langle k | H'_{g-g} | 0 \rangle, \quad (2)$$

где  $\rho_0 = \frac{1}{2} |\psi_0(0)|^2$ ,  $|0\rangle = \psi_0$  — волновая функция основного состояния активного атома,  $S_0$  — интеграл перекрытия,  $U_{0k}, V_{0k}$  — обменный и необменный матричные элементы межатомного взаимодействия,  $E_k, |k\rangle$  — энергия и волновая функция  $k$ -ого возбужденного состояния изолированного атома,  $H'_{g-g} = -\frac{1}{r^3} \sqrt{10} \sum_m (21m - m | 2110) C_m^2 S_m^1 [3]$ ,  $C_m^2$  — сферические функции,  $S_m^1$  — тензор первого ранга, соответствующий оператору спина электрона,  $(21m - m | 2110)$  — коэффициенты Клебша—Гордона. Член с 1 в (1) вклада в (2), очевидно, не дает из-за сферической симметрии состояния  $|0\rangle$ .

Сумма (2) вычислялась коммутаторным методом [4]. Для этого предварительно было проведено интегрирование по угловым и спиновым переменным в матричном элементе  $\langle k | H'_{g-g} | 0 \rangle$ . С учетом правил отбора для оператора  $H'_{g-g}$  имеем

$$\langle k | H'_{g-g} | 0 \rangle = -\delta_{l_2} \frac{\langle n, l | \frac{1}{r^3} | n_0, 0 \rangle}{\sqrt{2}}. \quad (3)$$

Здесь  $|n, l\rangle$  — координатная часть волновой функции состояния с главным квантовым числом  $n$  и орбитальным моментом  $l$ , энергию которого обозначим  $E_{nl}$ ,  $|n_0, 0\rangle$  — координатная часть волновой функции основного состояния. Подстановка (3) в (2), применение коммутаторного метода и приближений, предложенных в [2] позволяют получить

$$\delta\omega_{g-g} = -\frac{3}{16\sqrt{2}\rho_0\pi N} \frac{V_{00} - U_{00}}{1 - S_0} \chi(R). \quad (4)$$

$\chi(r)$  удовлетворяет уравнению

$$[\chi, H_0] |n_0, 0\rangle - \chi(H_2 - H_0) |n_0, 0\rangle = \frac{1}{r^3} |n_0, 0\rangle, \quad (5)$$

$H_0, H_2$  — радиальные гамильтонианы, соответствующие моментам  $l=0$  и  $l=2$ . Значение  $\chi$ , а, следовательно, и  $\delta\omega_{g-g}$  определяются из (5) неоднозначно.

Заметим, однако, что уравнение (5) может быть переписано в виде  $(H_2 - E_0)\Phi - \frac{1}{r^3}|n_0, 0\rangle = 0$ ,  $\Phi = \chi|n_0, 0\rangle$ .

Функция  $\Phi$  должна быть квадратично интегрируема, поэтому мы должны отбросить общее решение однородного уравнения, приводящее к расходящимся  $\langle \Phi | \Phi \rangle$ . При этом неоднозначность пропадает.

Для атома водорода частное решение неоднородного уравнения (5) может быть найдено точно. Подставляя  $\chi$  в (5) в виде  $\chi = a/r + b$ , находим, что  $a = -1/3$ ,  $b = -1/9$ . Для атомов рубидия и цезия поступим следующим образом. Учтем, что в соответствии с (4) необходимо знать  $\chi(r)$  лишь для  $r$  порядка межатомного расстояния  $R$ . Это позволяет без потери точности использовать в (5) вместо функции  $|n_0, 0\rangle$  ее асимптотическое приближение для больших  $r$ :  $|n_0, 0\rangle_{a,s} = Cr^{1/\kappa-1}e^{-\kappa r}$ , где  $\kappa = \sqrt{2I}$ ,  $I$  — потенциал ионизации. При этом уравнение (5) удается решить так же, как и в случае водорода:  $\chi_{\text{Rb, Cs}} = a/r + b$ ,

$$a = -\frac{\kappa_{\text{Rb, Cs}}}{2\kappa_{\text{Rb, Cs}} + 1}, \quad b = -\frac{\kappa_{\text{Rb, Cs}}^2}{2\kappa_{\text{Rb, Cs}} + 1}, \quad C = \text{const.}$$

Сравнение  $\delta\omega_{g-g}$ , полученного в данной работе, с результатами расчета  $\delta\omega$ , выполненного с учетом лишь контактного взаимодействия Ферми [2] показывает, что в случае водорода вклад диполь-дипольного взаимодействия в величину локального сдвига не превышает 2%. При переходе к более тяжелым активным атомам Rb и Cs абсолютная величина этого вклада возрастает, что является естественным следствием того, что электронные оболочки Rb и Cs сильнее искажаются при столкновениях в силу большей поляризуемости данных атомов по сравнению с водородом. В то же время относительный вклад  $\delta\omega_{g-g}$  в  $\delta\omega$  для рубидия и цезия меньше и является величиной  $\sim 1\%$ .

Столь малую величину вклада неконтактного взаимодействия и уменьшение относительной величины этого вклада при переходе от H к Rb и Cs, на наш взгляд можно объяснить тем, что любое искажение волновых функций излучающего атома даст вклад при учете контактного члена, в то время как диполь-дипольное взаимодействие существенно только тогда, когда сильно примешиваются состояния с  $l=2$ . При увеличении поляризуемости активного атома искажение волновой функции увеличивается, что ведет к увеличению сдвига, однако, относительный вес состояний с  $l=2$  уменьшается, а следовательно, уменьшается и отношение  $\delta\omega_{g-g}/\delta\omega$ .

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Релятивистская квантовая теория, ч. 1. «Наука», М., 1968.  
 [2] В. В. Батыгин, М. Б. Горный. ЖТФ, 48, 2472, 1978.  
 [3] И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. «Наука», М., 1977.  
 [4] В. В. Батыгин, М. Б. Горный, А. Н. Иванов, Б. Г. Матисов. ЖТФ, 47, 2414, 1977.

Поступило в Редакцию 2 апреля 1981 г.

УДК 535.37 : 548.0

### СПОНТАННЫЙ РАСПАД БИЭЛЕКТРОНА

М. П. Шепилов

В работе [1] предполагалась возможность существования в кристаллах связанных состояний двух одноименно заряженных частиц, имеющих отрицательную приведенную эффективную массу, например, двух электронов — биэлектрона. Спектр энергии относительного движения такой системы имеет обратный водородоподобный характер. В работе [2] предложена схема зон, при наличии которой состояния биэлектронного типа могли бы реализоваться: один электрон помещался в зону проводимости  $C_1$  ( $m_1 > 0$ ), а другой — в бо-