

М. Г. Козлов

РАСЧЕТ СТЕПЕНИ НЕСОХРАНЕНИЯ ЧЕТНОСТИ
В СПИН-ВРАЩАТЕЛЬНОМ СПЕКТРЕ МОЛЕКУЛЫ РbF

На основе недавнего расчета молекулы РbF вычислены энергии уровней вращательной и сверхтонкой структур основного электрон-колебательного состояния молекулы, а также степени несохранения четности в магнитно-дипольных переходах между этими уровнями. Оказалось, что кроме предсказанного ранее параметрического усиления несохранения четности в двухатомных радикалах для некоторых переходов существует дополнительное усиление, связанное с деталями спектра. Степень несохранения четности может превышать 10^{-3} . Несохранение четности в спин-вращательном спектре молекулы РbF связано с пока еще не измеренной константой несохраняющего четность электрон-ядерного нейтрального тока и с анапольным моментом ядра свинца.

Введение

Хорошо известно, что в двухатомных молекулах-радикалах эффекты, связанные с зависящей от спина ядра частью P -нечетного электрон-нуклонного взаимодействия, усилены на несколько порядков по сравнению с атомами [1]. Такое усиление связано с тем, что оператор слабого взаимодействия H_p смешивает молекулярные спин-вращательные уровни противоположной четности, разности энергий которых в атомной шкале малы. Наибольшие P -нечетные эффекты должны иметь место в радикалах, содержащих тяжелый атом, таких как HgF, BiS или РbF.

Для расчета P -нечетных эффектов в молекулах необходимо знать спин-вращательные спектры. К сожалению, для интересующих нас молекул о них не существует достаточно полных данных. Этот пробел восполнил недавний расчет молекулы РbF, в котором были вычислены константы эффективного спин-вращательного гамильтониана с учетом несохраняющей четность членов [2]. Хотя точность расчета сравнительно невысока, он позволяет получить информацию о P -нечетных эффектах в молекуле РbF, а также выявить некоторые общие закономерности для тяжелых молекул, имеющих основное состояние ${}^2\Pi_{1/2}$.

В данной работе вычисляется спин-вращательный спектр основного электрон-колебательного состояния молекулы РbF, а также амплитуды P -четных $M1$ -переходов и P -нечетных $E1$ -переходов для низколежащих спин-вращательных уровней.

Степень несохранения четности определяется отношением P -нечетной ($A_{нч}$) и P -четной ($A_{ч}$) амплитуд

$$\mathcal{P} = |A_{нч}/A_{ч}|. \quad (1)$$

Наибольшие \mathcal{P} достигаются в $M1$ -переходах. В этом случае амплитуда $A_{нч}$ соответствует $E1$ -переходу, открывающемуся за счет несохранения четности. По существу, \mathcal{P} есть степень циркулярной поляризации излучения. Через нее выражаются также и другие эффекты несохранения четности.

Спин-вращательный гамильтониан

Основное электронное состояние молекулы РbF ${}^2\Pi_{1/2}$ двукратно вырождено по проекции ω момента неспаренного электрона J^e на ось молекулы. Эффективные операторы магнитного сверхтонкого взаимодействия (СТВ) неспаренного электрона со спинами I_1 и I_2 ядер ${}^{207}\text{Pb}$ и ${}^{19}\text{F}$ получаются проецированием соответствующих операторов на подпространство электронных волновых функций $|\omega = \pm 1/2\rangle$ терма ${}^2\Pi_{1/2}$. В этом подпространстве удобно ввести эффективный спин электрона s . Тогда СТВ можно

описать через два аксиальных тензора \hat{A}_1 и \hat{A}_2 . Полный эффективный гамильтониан, соответствующий вращательным и спиновым степеням свободы H_{sr} , имеет следующий вид:

$$H_{sr} = H_{sr}^0 + H_F + H_P = B\mathbf{J}^2 + \Delta s\mathbf{J} + s\hat{A}_1\mathbf{I}_1 + s\hat{A}_2\mathbf{I}_2 - dn\mathbf{E} - \mu_0 s\hat{\mathbf{G}}\mathbf{H} + W\boldsymbol{\kappa}n \times s\mathbf{I}_1. \quad (2)$$

В этом выражении H_{sr}^0 описывает вращение, спин-вращательное (кориолисово) взаимодействие и СТВ ($I_1=I_2=1/2$); B и Δ — вращательная постоянная и константа ω -удвоения, H_F — описывает взаимодействие с внешними полями \mathbf{E} и \mathbf{H} ; \mathbf{n} — единичный вектор, направленный от ядра свинца к ядру фтора; H_P — оператор P -нечетного взаимодействия, $\boldsymbol{\kappa}$ — безразмерная константа, определяемая двумя вкладками: анапольным моментом ядра ^{207}Pb и константой P -нечетного электрон-нуклонного нейтрального тока. В оболочечной модели ядра $^{1/2}\boldsymbol{\kappa} = -^{2/3}\boldsymbol{\kappa}_{2,n} + ^{4/3}\boldsymbol{\kappa}_a$, где $\boldsymbol{\kappa}_{2,n} = ^{1/2}\lambda(1 - 4\sin^2\theta_W)$; $\lambda = 1,25$; $\boldsymbol{\kappa}_a \approx -0,1$ [3].

Параметры, входящие в (2), таковы:

$$\begin{aligned} B &= 0,2288 \text{ см}^{-1}; & \Delta &= -0,1388 \text{ см}^{-1}; \\ A_{1\perp} &= -0,262 \pm 0,013 \text{ см}^{-1}; & A_{1\parallel} &= 0,305 \pm 0,015 \text{ см}^{-1}; \\ A_{2\perp} &= 0,0240 \pm 0,0062 \text{ см}^{-1}; & A_{2\parallel} &= -0,0208 \pm 0,0025 \text{ см}^{-1}; \\ G_{\perp} &= 0,357 \pm 0,083 \text{ см}^{-1}; & G_{\parallel} &= -0,075 \pm 0,040 \text{ см}^{-1}; \\ d &= 6,1 \text{ Дб}; & |W| &= (3,2 \pm 1,0) \cdot 10^{-8} \text{ см}^{-1}, \end{aligned}$$

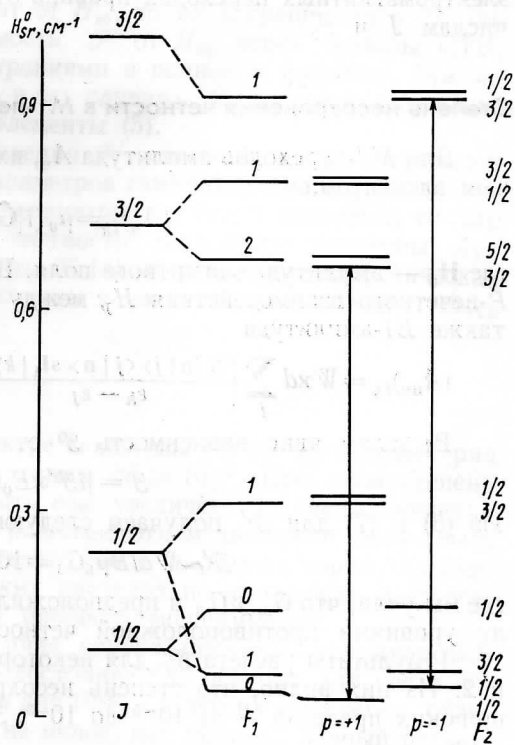
из них только B и Δ известны экспериментально, остальные же были вычислены. Видно, что спин-вращательный гамильтониан (2) имеет ряд особенностей: большой масштаб ($\sim B$) СТС на свинце; большую анизотропию всех тензоров и малые компоненты G -тензора. Первая из них связана с зависимостью СТВ от заряда ядра ($H_{ст} \sim Z$), вторая — с анизотропией орбитального движения электрона и, наконец, третья особенность присуща термам $\Pi_{1/2}$, для которых орбитальный и спиновый магнитные моменты сокращаются. Поэтому магнитный момент отличен от нуля только за счет спин-орбитального взаимодействия H_{so} , причем G_{\perp} появляется в первом, а G_{\parallel} — лишь во втором порядке по H_{so} .

Спин-вращательный спектр

Рассмотрим спектр гамильтониана H_{sr} . Волновые функции, диагонализующие его первые два члена, известны:

$$\begin{aligned} |JM\omega p\rangle &= 2^{-1/2} (|\omega\rangle |JM\omega\rangle + \\ &+ p(-1)^{J+\omega} |-\omega\rangle |JM-\omega\rangle), \end{aligned} \quad (3)$$

Расщепление вращательного спектра молекулы PbF за счет сверхтонкого взаимодействия со спинами ядер свинца (F_1) и фтора (F_2). Уровни разной четности ($p = \pm 1$) показаны раздельно; стрелками показаны магнитно-дипольные переходы, в которых степень несохранения четности превышает 10^{-3}



Расчет степени несохранения четности

где $|\pm\omega\rangle$ — электронные функции; $|JM\omega\rangle$ — вращательная функция симметричного волчка; $\omega=1/2$; p — четность состояния. Эти члены описывают вращательную структуру с ω -удвоением:

$$E_{Jp} = BJ(J+1) + \frac{1}{2}\Delta p (-1)^{J+\omega} (J + \frac{1}{2}). \quad (4)$$

СТВ электрона с ядром свинца существенно меняет нижнюю часть спектра (4).

СТВ электрона с ядрами свинца и фтора определяет расщепление по моментам $\mathbf{F}_1 = \mathbf{J} + \mathbf{I}_1$ и $\mathbf{F}_2 = \mathbf{F}_1 + \mathbf{I}_2$. Результат численной диагонализации гамильтониана H_{sr}^0 с параметрами в уравнениях (2), соответствующими средним значениям, приведенным выше, представлен на рисунке. СТВ сильно меняется от уровня к уровню. Можно убедиться, что это связано с видом волновой функции (3). Действительно, оба оператора СТВ являются скалярными произведениями электронных аксиальных векторов X ($X = \hat{A}_1 s$ или $\hat{A}_2 s$) и ядерных спинов. Поэтому их можно выразить через приведенные матричные элементы этих векторов на функциях (3):

$$\begin{aligned} \langle J'\omega p' \| X \| J\omega p \rangle = & (-1)^{J'-\omega 1/2} ((2J'+1)(2J+1))^{1/2} \times \\ & \times \left\{ \begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -\omega & 0 & \omega \end{pmatrix} (X_{++} - p'pX_{--}) + (-1)^{J+\omega} p \begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -\omega & 1 & -\omega \end{pmatrix} \times \right. \\ & \left. \times (X_{+-} - p'pX_{-+}) \right\}; \quad (5) \end{aligned}$$

$$X_{+-} \equiv \langle \omega | X_1 | -\omega \rangle.$$

Выражения в круглых скобках в (5) обеспечивают правила отбора по четности для полярных и аксиальных векторов X .

Видно, что в зависимости от фазы $(-1)^{J+\omega} p$ два слагаемых, входящих в (5), либо усиливают, либо ослабляют друг друга. Это проявляется не только в изменении СТВ, но и в том, насколько строго выполняются в электромагнитных переходах правила отбора по приближенным квантовым числам J и F_1 .

Степень несохранения четности в M1-переходах

Для M1-переходов амплитуда A_q , входящая в (1), определяется матричным элементом:

$$(A_q)_{ik} = \mu_0 \langle i | \hat{\mathbf{G}}_s | k \rangle \mathbf{H}_0, \quad (6)$$

где \mathbf{H}_0 — амплитуда магнитного поля. В первом порядке по гамильтониану P -нечетного взаимодействия H_p между теми же состояниями появляется также E1-амплитуда

$$(A_{\text{нч}})_{ik} = W \kappa d \sum_j \left\{ \frac{\langle i | \mathbf{n} | j \rangle \langle j | \mathbf{n} \times \mathbf{s} \mathbf{I}_1 | k \rangle}{\varepsilon_k - \varepsilon_j} + \frac{\langle i | \mathbf{n} \times \mathbf{s} \mathbf{I}_1 | j \rangle \langle j | \mathbf{n} | k \rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \right\} \mathbf{E}_0. \quad (7)$$

Выделим явно зависимость \mathcal{P} от амплитуд полей и константы κ :

$$\mathcal{P} = |i \mathcal{P}' \kappa E_0 / H_0|. \quad (8)$$

Из (6) и (7) для \mathcal{P}' получаем следующую оценку:

$$\mathcal{P}' \sim W d / B \mu_0 G_{\perp} = 10^{-4}, \quad (9)$$

где мы учли, что $G_{\perp} \gg G_{\parallel}$ и предположили, что характерное расстояние между уровнями противоположной четности $\sim B$.

Результаты расчета \mathcal{P}' для некоторых переходов приведены в табл. 1 и 2. Из них видно, что степень несохранения четности меняется в очень широких пределах — от 10^{-5} до 10^{-3} . Это связано с «сильной перемешан-

Таблица 1

Величина $\mathcal{P}' \cdot 10^4$ для переходов между уровнями положительной четности спин-вращательного гамильтониана

Номер уровня	5	6	7	8	9	10
1	$-2,8 \pm 0,2$	$-0,72 \pm 0,07$	53 ± 12	0	10 ± 1	$7,1 \pm 0,9$
5	—	$-0,13 \pm 0,04$	$0,86 \pm 0,28$	$0,4 \pm 0,1$	$8,2 \pm 2,1$	$8,2 \pm 2,2$
6	—	—	$0,28 \pm 0,03$	0	$5,5 \pm 0,8$	$7,6 \pm 1,9$

Примечание. Нумерация уровней соответствует рисунку и идет снизу вверх.

Таблица 2

То же, что и в табл. 1, для уровней отрицательной четности

Номер уровня	3	4	11	12
2	$2,9 \pm 0,2$	$-2,7 \pm 0,1$	-87 ± 34	-16 ± 2
3	—	$-2,8 \pm 0,1$	$-12 \pm 0,7$	$-8,9 \pm 0,2$
4	—	—	$-5,3 \pm 0,1$	$-4,7 \pm 0,2$

ностью» нижних уровней из-за большого СТВ и с уже упоминавшейся зависимостью матричных элементов (5) от четности состояний.

Погрешности, указанные в табл. 1 и 2, соответствуют погрешностям в параметрах спин-вращательного гамильтониана, приведенных в табл. 1. Последние связаны с плохим знанием спин-орбитального взаимодействия. Поскольку W и G_{\perp} линейно зависят от H_{so} , то их погрешности в \mathcal{P}' сокращаются. Остается еще зависимость \mathcal{P}' от H_{so} через тензоры СТВ, определяющие расстояния между уровнями и волновые функции. Эта зависимость становится сильной лишь в тех случаях, когда имеются большие сокращения вкладов в матричные элементы (5).

Таким образом, точность вычисления \mathcal{P}' для большинства переходов даже несколько выше, чем самих параметров гамильтониана H_{sr} . Если же в процессе экспериментов какие-то параметры H_{sr} будут измерены, то это позволит уточнить все расчеты. В частности, если будут измерены $A_{1\parallel}$ и $A_{1\perp}$, это даст возможность уточнить W [4]. В результате теоретическая неопределенность в извлечении константы κ из эксперимента может быть сведена к 15–20 %.

Заключение

Итак, в спин-вращательном спектре молекулы ^{207}PbF есть целый ряд магнитно-дипольных переходов, в которых $\mathcal{P}' \geq 10^{-4}$. При этом степень несохранения четности (8) может быть еще увеличена за счет отношения амплитуд полей E_0 и H_0 , которые в радиочастотном диапазоне могут быть не равны между собой. То обстоятельство, что \mathcal{P}' в разных переходах имеет разные знаки и меняется в широких пределах по амплитуде, дает возможность эффективного контроля в процессе эксперимента.

Оценка (9) справедлива и для ряда других молекул, например BiS или HgF . Последняя имеет основное состояние $^2\Sigma$, поэтому для нее и W , и G_{\perp} примерно в пять раз больше, чем для PbF , однако их отношение отличается меньше чем на 10 % [4]. Тем не менее, как показал данный расчет,

\mathcal{P} может существенно зависеть от деталей спин-вращательного гамильтониана.

1. Л. Н. Лабзовский. *ЖЭТФ*, **75**, 856 (1978).
2. Ю. Ю. Дмитриев, М. Г. Козлов, Л. Н. Лабзовский, А. В. Титов, В. И. Фомичев. Препринт ЛИЯФ, 1986, № 1228; *J. Phys. B*, **20**, 4939 (1987).
3. V. V. Flambaum, I. V. Khriplovich, O. P. Sushkov. *Phys. Letts B*, **146**, 367 (1984).
4. М. Г. Козлов. *ЖЭТФ*, **89**, 1933 (1985).

Ленинградский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова

M. G. Kozlov. Calculation of the Parity Nonconservation Rate in the Spin-Rotational Spectrum of the PbF Molecule.

On the basis of a recent calculation of a PbF molecule energies have been computed for levels of rotational and superfine structures of the fundamental electron-vibrational state of the molecule. Rates of parity nonconservation in magneto-dipole transitions between these levels have been computed. Beside previously predicted parametric amplification of parity nonconservation effects in diatomic radicals it has been found that an additional amplification related with spectral details exists for certain transitions. The parity nonconservation rate can exceed 10^{-3} . The parity nonconservation in the spin-rotational spectrum of the PbF molecule is related with still unmeasured constant of a parity-nonconserving electron-nuclear neutral current and with an anapole moment of the lead nucleus.