

О РАЗНОСТИ ЭНЕРГИЙ ПРАВЫХ И ЛЕВЫХ МОЛЕКУЛ, ОБУСЛОВЛЕННОЙ НЕСОХРАНЕНИЕМ ЧЕТНОСТИ В СЛАБОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЭЛЕКТРОНОВ С ЯДРОМ

Б.Я.Зельдович, Д.Б.Саакян, И.И.Собельман

В последнее время интенсивно обсуждаются возможные проявления несохранения четности, обусловленные слабым взаимодействием электронов с ядром, в атомной и молекулярной физике [1 – 3]. При этом основное внимание уделяется различию оптических свойств для света с правой и левой круговой поляризацией.

В настоящей работе выясняется, в какой мере указанное взаимодействие может привести к различию энергий правой и левой модификаций молекул, способных существовать в двух таких формах¹⁾.

Гамильтониан P -нечетного слабого взаимодействия электрона с ядром запишем в виде (см. [2])

$$W = - \frac{G\hbar^3 q}{2\sqrt{2} mc^2} Z [(\vec{\sigma} \mathbf{p})\delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r})(\vec{\sigma} \mathbf{p})], \quad (1)$$

где $G = 10^{-5}/m_p^2$ – фермиевская константа, m_p , m – массы протона и электрона, Z – заряд ядра, $\frac{1}{2}\vec{\sigma}$, \mathbf{p} , \mathbf{r} – спин, импульс, координата электрона, фактор $q \approx -0,9$. Нас будет интересовать поправка к энергии молекулы, первого порядка по W . Нетрудно убедиться, что такая поправка может быть отличной от нуля только для молекул, не обладающих ни центром, ни плоскостью симметрии, ни какой-либо зеркально-поворотной осью симметрии, т. е. для молекул, имеющих правую и левую модификацию. В последнем случае поправка к энергии, пропорциональная W , имеет противоположный знак для правой и левой форм молекулы. Напомним, что инверсия координат всех ядер (или отражение в плоскости) переводит правую молекулу в левую и наоборот.

Искомое расщепление обязано явным образом зависеть от величины магнитных взаимодействий, содержащих спин электрона; в частности, спин-орбитального взаимодействия. Это видно из того, что в отсутствие таких взаимодействий волновая функция имеет вид произведения координатной и спиновой функций и координатная часть диагонального матричного элемента от оператора $\vec{\sigma}[\mathbf{p}\delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r})\mathbf{p}]$ обращается в нуль. Действительно, хотя W инвариантно относительно обращения времени, одна лишь координатная часть W меняет знак при замене t на $-t$.

В соответствии с [1–3] роль взаимодействия W в атоме быстро растет с ростом Z , примерно $\sim Z^3$. Поэтому наибольших расщеплений следует ожидать в молекулах, содержащих тяжелый атом. Для тяжелых атомов, как известно, основной вклад в магнитные взаимодействия дает связь спина электрона с зарядом тяжелого ядра – спин-орбитальное взаимодействие V_{CO} , порядка $Ry\alpha^2 Z^2$, где $\alpha = 1/137$, $Ry = mc^4/2\hbar^2$. Из сказанного видно, что, например, для синглетного терма поправка ΔE должна иметь вид $\langle S|W|T\rangle \langle T|V_{CO}|S\rangle \Delta E_{ST}^{-1}$, где $\langle S|$ и $\langle T|$ – синглетное и триплетное состояния, соответственно. Дальнейший расчет требует разложения функций $\langle S|$, $\langle T|$ по атомным состояниям и оценки коэффициентов этого разложения. Те же оценки удобнее сделать, рассматривая атом в произвольном электростатическом поле.

Выясним, какой должна быть структура электростатического поля, создаваемого другими атомами молекулы, для того, чтобы результирующая поправка к энергии была отличной от нуля. Рассмотрим движение электрона в центрально-симметричном поле тяжелого атома, а внешнее электростатическое поле

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\kappa m} r^\kappa Y_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) A_{\kappa m} \quad (2)$$

учтем в рамках теории возмущений. Поправка первого порядка по W , первого по V_{CO} и k -го порядка по электростатическому полю должна содержать произведение k констант мультипольного разложения $A_{\kappa m}$ из (2). Из-за инвариантности относительно вращений и вследствие того, что W – псевдоскаляр, в ответ должна входить комбинация из произведений $A_{\kappa m}$, образующая псевдоскаляр. Оказывается, что этому требо-

¹⁾ Отметим, что существование такого различия в энергиях правых и левых молекул было постулировано в [4] в связи с некоторыми вопросами химии и биологии.

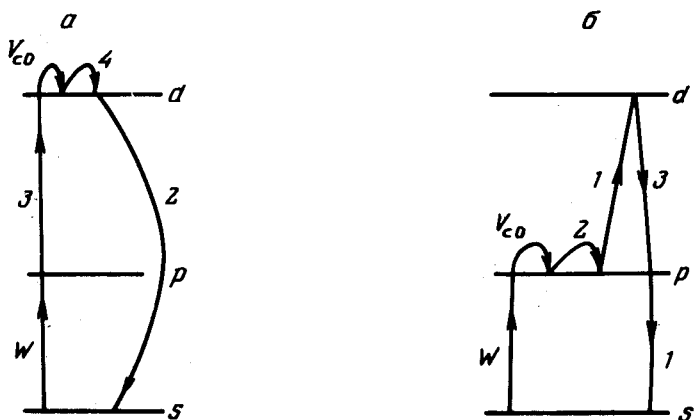
ванию можно удовлетворить, рассматривая лишь третий и более высокие порядки теории возмущений по ϕ из (2). Например, в третьем порядке имеем:

$$\Delta E \sim \sum_{m_1 m_2 m_3} A_{\kappa_1} A_{\kappa_2} A_{\kappa_3} \begin{pmatrix} \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}, \quad \kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3 = 2g + 1. \quad (3)$$

В (3) входит $3j$ – символ с нечетным значением суммы $\kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3$. Существенно, что все три значения $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ обязаны быть различными, так как иначе сумма (3) обращается в нуль в силу свойств симметрии $3j$ – символов. Набор наименьших мультипольностей $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$, удовлетворяющих этим требованиям, есть 2, 3, 4. В четвертом порядке по ϕ псевдоскаляр можно построить с более низкой суммой мультипольностей $(\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3) = (1, 1, 2, 3)$. По порядку величины $A_{\kappa m} \sim eR^{-\kappa-1}$, где e – заряд электрона, R – характерный линейный размер системы зарядов, создающих поле ϕ . Используя известные результаты вычислений матричных элементов $\langle s | W | p \rangle \sim Ry 10^{-10} (Z/100)^3$ (см., например, [2]), а также оценки спин-орбитального расщепления в состоянии с орбитальным моментом l и эффективным главным квантовым числом n_* [5]: $\Delta E_{CO} = Ry a^2 Z^2 [n_*^2 l(l+1)(l+\frac{1}{2})]^{-1}$ можно дать следующую оценку интересующего нас энергетического сдвига:

$$\Delta E \sim 10^{-10} Ry \left(\frac{Z}{100} \right)^5 [n_*^2 l(l+1)(l+\frac{1}{2})]^{-1} \left(\frac{Ry}{E_{ik}} \right)^k \left(\frac{a}{R} \right)^{\sum_i \kappa_i}, \quad (4)$$

где E_{ik} – энергетические знаменатели. Как видно, наибольшие значения ΔE получаются при таком выборе цепочки виртуальных состояний теории возмущений, для которых входит спин-орбитальное расщепление уровня с наименьшими значениями n_*, l . Оказывается, однако, что выбор этого уровня предопределяет тот набор мультиполей $A_{\kappa m}$, который представлен в (4).



Стрелками, соединяющими уровни s, p, d обозначены последовательно включаемые возмущения: W – слабое, V_{CO} – спин-орбитальное, 1, 2, 3, 4 – электростатический мультиполь соответствующего ранга

Например, на рисунке показаны две цепочки переходов через виртуальные уровни, которые возникают при расчете сдвига s -уровня. В случае a спин-орбитальное взаимодействие включено на уровне d и наименьший набор мультипольностей оказывается равным $(\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3) = (2, 3, 4)$. В случае b спин-орбитальное взаимодействие включено на уровне p , где оно примерно на порядок больше, а набор мультипольностей соответствует $(\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4) = (1, 1, 2, 3)$.

Воспользуемся формулой (4) для оценки возможного значения разности энергий ΔE правой и левой форм молекулы. При этом наиболее благоприятной является ситуация, когда тяжелый атом связан по крайней мере с тремя различными атомами, не лежащими в одной плоскости. В этом случае $(\frac{a}{R} R_{y/E_{ik}}) \sim 1$. Это означает, что в разложении молекулярных состояний по атомным примерно с одинаковым весом представлены состояния s, p, d . Полагая также $[n_*^2 l(l+1)(l+\frac{1}{2})]^{-1} \sim 10^{-1}$ для p -состояний, получаем

$$\frac{\Delta E}{2\pi\hbar} \sim 10^4 \left(\frac{Z}{100}\right)^5 \text{ эв.} \quad (5)$$

Таким образом, хотя обсуждаемый эффект возникает лишь в сравнительно высоких порядках теории возмущений по электростатическому взаимодействию, и требует в каждом конкретном случае учета довольно специального набора мультиполей высокого ранга и спин-орбитального взаимодействия, сдвиг энергии ΔE оказывается отнюдь не чрезмерно малым. Из-за зависимости Z^5 это относится, конечно, лишь к самым тяжелым атомам. В случае молекул, содержащих тяжелый атом типа свинца, можно рассчитывать на сдвиг вплоть до килогерц. Современная лазерная техника позволяет, в принципе, фиксировать частотные сдвиги такого масштаба (см., например, [6]). Отметим также, что деформация потенциальной ямы, связанная с добавкой к энергии электронов $\Delta E(R)$, приводит для таких молекул к сдвигу колебательных Ω_v и вращательных Ω_r частот на величину $\Delta\Omega_v/\Omega_v \approx \Delta\Omega_r/\Omega_r \approx \Delta E/Ry \approx 10^{-12}$.

Физический институт
им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
6 декабря 1976 г.

Литература

- [1] M. Bouchiat, C. Bouchiat. Phys. Lett., B42, 111, 1974.
- [2] В.А.Алексеев, Б.Я.Зельдович, И.И.Собельман. УФН, 118, 385, 1976.
- [3] А.Н.Москалев, Р.М.Рындин, И.Б.Хриплович. УФН, 118, 409, 1976.
- [4] В.С.Летохов. Phys. Lett., 53A, 275, 1975.
- [5] И.И.Собельман. Введение в теорию атомных спектров, М., Физматгиз, 1963.
- [6] J.L.Hall, C.Borde. Phys. Rev. Lett., 30, 1101, 1973; J.L.Hall in: S.J.Smith, G.K.Walters, editors. Proc. 3-rd Internat. conf. on Atomic Physics, 1972, Boulder, Colorado, v. 3, p. 625. Plenum Press, N.-Y. 1973.