

**П И С Ь М А**  
**В ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ**  
**И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

ОСНОВАН В 1965 ГОДУ  
 ВЫХОДИТ 24 РАЗА В ГОД

ТОМ 64, ВЫПУСК 10  
 25 НОЯБРЯ, 1996

Письма в ЖЭТФ, том 64, вып.10, стр.659 - 663

© 1996г. 25 ноября

**ОЦЕНКА  $P$ - И  $P,T$ -НЕЧЕТНЫХ ЭФФЕКТОВ В ДВУХАТОМНЫХ**  
**ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВСКИХ МОЛЕКУЛАХ**

*М.Г.Козлов, В.В.Ящук<sup>1)</sup>*

*Петербургский институт ядерной физики им.Б.П.Константинова РАН  
 188350 Гатчина, Ленинградская обл., Россия*

Поступила в редакцию 3 октября 1996 г.

Оценены величины возможных  $P$ - и  $P,T$ -нечетных эффектов в двухатомных ван-дер-ваальсовских молекулах. Их значения оказываются промежуточными между значениями, соответствующими атомам и молекулам-радикалам. Приводятся аргументы в пользу того, что проигрыш около двух порядков в величине эффекта для ван-дер-ваальсовских молекул с неспаренным электроном, типа  $C_sXe$ , по сравнению с молекулами-радикалами, может отчасти компенсироваться рядом преимуществ экспериментальной работы с ван-дер-ваальсовскими молекулами.

PACS: 11.30.Eg, 35.10.Wb

Эффекты несохранения пространственной четности  $P$ , а также одновременного несохранения и пространственной, и временной четности  $T$  в двухатомных молекулах, обладающих отличным от нуля средним электронным моментом, обсуждаются давно [1–3]. В таких молекулах  $P$ - и  $P,T$ -нечетные электрон-нуклонных взаимодействия смешивают вращательные уровни одного электронного терма. Возникающие при этом  $P$ - и  $P,T$ -нечетные эффекты оказываются на 4–5 порядков больше [4,5], чем в атомах [6,7].

Круг рассматривавшихся до сих пор молекул ограничивается молекулами-радикалами типа металл-галоген. К сожалению, все эти молекулы в свободном состоянии не существуют и в лучшем случае могут быть получены только в химических реакциях при высоких температурах [8]. Этим объясняются и трудности постановки экспериментов по обнаружению эффектов нарушения  $P$ - и  $P,T$ -инвариантностей в молекулах-радикалах и неугасающий интерес к поиску новых объектов для таких экспериментов. Более доступными и удобными в экспериментальном плане могут оказаться ван-дер-ваальсовские (ВДВ)

<sup>1)</sup>e-mail: yashchuk@lnpi.spb.su

молекулы с неспаренным электроном, типа CsXe, эффективно образующиеся при сверхзвуковом расширении смеси благородного газа с малой примесью атомов щелочного металла [9]. В связи с этим актуален вопрос о величине  $P$ - и  $P,T$ -нечетных эффектов в ВДВ молекулах. Для описания  $P$ - и  $P,T$ -нечетных эффектов в двухатомных молекулах наиболее удобно пользоваться эффективным спин-вращательным гамильтонианом [4]

$$H_{eff} = W_2^P g_2^P (\mathbf{n} \cdot \mathbf{S}' \cdot \mathbf{I}) + W^d d_e (\mathbf{S}' \mathbf{n}), \quad (1)$$

где  $\mathbf{n}$  – единичный вектор оси молекулы,  $\mathbf{S}'$  – эффективный спин электрона,  $\mathbf{I}$  – спин тяжелого ядра. Первый член в правой части (1) является  $P$ -нечетным и обусловлен константой  $g_2^P$  электрон-нуклонного  $P$ -нечетного взаимодействия. Основной вклад в эту константу дает анапольный момент ядра [10]. Второй член в формуле (1) связан с электрическим дипольным моментом электрона  $d_e$  и является  $P,T$ -нечетным. Величины интересующих нас эффектов определяются константами  $W_2^P$  и  $W^d$ , которые зависят от электронной волновой функции молекулы. Оценим эти параметры по порядку величины для ВДВ молекул, типа CsXe. Численные оценки рассматриваемых эффектов мы проводим для CsXe, так как это самая тяжелая из ВДВ молекул с известными нам параметрами. Вопрос о существовании и параметрах более предпочтительных ВДВ молекул, например, YbXe, остается открытым.

Волновая функция ван-дер-ваальсовской молекулы. Согласно [9], потенциальную кривую ВДВ молекулы можно описать с помощью дальнедействующего ВДВ притяжения и короткодействующего обменного отталкивания:

$$W(r) = W_{WdW}(r) + W_{ex}(r) = - \left( \frac{C_6}{r^6} + \frac{C_8}{r^8} + \frac{C_{10}}{r^{10}} + \dots \right) + W_{ex}(r). \quad (2)$$

Определяющие потенциальную кривую (2) константы для молекулы CsXe имеют в атомной системе единиц следующие значения [11]:

$$C_6 = 8.9 \cdot 10^2 \text{ а.е.}, \quad C_8 = 8.5 \cdot 10^4 \text{ а.е.}, \quad C_{10} = 8.6 \cdot 10^6 \text{ а.е.} \quad (3)$$

Кроме того, известны равновесное расстояние и энергия связи [11]:

$$R_0 = 10.2 \text{ а.е.}, \quad W_0 = 4.78 \cdot 10^{-4} \text{ а.е.} \quad (4)$$

Этого достаточно, чтобы найти равновесную величину обменной части в выражении (2):

$$W_{ex}(R_0) = 1.7 \cdot 10^{-3} \text{ а.е.} \quad (5)$$

Существуют два важных различия между ВДВ взаимодействием  $V_{WdW}$  и обменным взаимодействием  $V_{ex}$ . Первое состоит в том, что  $V_{WdW}$  дает вклад в энергию во втором порядке теории возмущений, а  $V_{ex}$  – в первом порядке. Это означает, что

$$W_{WdW} = \sum_d \frac{\langle d | V_{WdW} | 0 \rangle^2}{\Delta_{0d}}, \quad (6)$$

$$W_{ex} = \langle 0 | V_{ex} | 0 \rangle. \quad (7)$$

Второе отличие в том, что взаимодействие  $V_{WdW}$  – двухчастичное. Оно примешивает к волновой функции  $|0\rangle$  состояния  $|d\rangle$ , получающиеся из нее

двухкратными возбуждениями. Обменное взаимодействие  $V_{ex}$ , напротив, — одночастичное. Поэтому, волновая функция молекулы приближенно может быть записана в виде

$$\Psi = |0\rangle + \sum_s |s\rangle \frac{\langle s|V_{ex}|0\rangle}{\Delta_{0s}} + \sum_d |d\rangle \frac{\langle d|V_{wdw}|0\rangle}{\Delta_{0d}}, \quad (8)$$

где суммы берутся по однократным и двухкратным возбуждениям, соответственно.

Матричные элементы несохраняющих четность взаимодействий. Оба взаимодействия, определяющие параметры гамильтониана (1), являются одночастичными. Поэтому третий член в уравнении (8) не дает вклада в соответствующие матричные элементы. Естественно предположить, что основной вклад во второй член дает  $6s - 6p_z$ -смешивание в цезии, то есть

$$\Psi \approx (|6s\rangle + \delta|6p_z\rangle)\Psi_{Xe} + \text{двухкратные возбуждения}, \quad (9)$$

где  $6s$ - и  $6p_z$ -функции центрированы на цезии и ось  $z$  совпадает с осью молекулы, а  $\Psi_{Xe}$  — электронная волновая функция ксенона. В этом приближении обменная энергия  $W_{ex}$  и параметр смешивания  $\delta$  даются следующими выражениями:

$$W_{ex} = \langle 6s\Psi_{Xe}|V_{ex}|6s\Psi_{Xe}\rangle, \quad (10)$$

$$\delta = \frac{\langle 6p_z\Psi_{Xe}|V_{ex}|6s\Psi_{Xe}\rangle}{\Delta_{sp}}. \quad (11)$$

Поскольку на больших расстояниях  $6p_z$ -функция убывает медленнее, чем  $6s$ -функция, матричный элемент в (11) должен быть не меньше, чем в (10). Это оправдывает использование формул (5) и (10) для оценки  $\delta$ :

$$\delta = \frac{W_{ex}(R_0)}{\Delta_{sp}} = 0.03. \quad (12)$$

Мы выбрали для  $\delta$  знак "+", так как это означает уменьшение вероятности обнаружить электрон цезия в области, занятой электроном ксенона. Теперь не представляет труда оценить  $W^d$ . Воспользуемся формулой (6.27) из обзора [4]:

$$W^d = 16\alpha^2 Z^3 \frac{\sigma_s \sigma_p}{\gamma_{1/2}(4(\gamma_{1/2})^2 - 1)}, \quad (13)$$

где  $\sigma_s = 1/\nu_{6s}^{3/2}$ ,  $\sigma_p = -\delta/(\sqrt{3}\nu_{6p}^{3/2})$ ,  $\gamma_{1/2} = \sqrt{1 - \alpha^2 Z^2}$ ,  $\nu_{6s}$  и  $\nu_{6p}$  — эффективные главные квантовые числа для функций  $|6s\rangle$  и  $|6p\rangle$ . Подставляя  $\delta$  из (12) и приняв, что  $\nu_{6s} = 1.9$ ,  $\nu_{6p} = 2.3$  [6], получаем

$$W^d = -4.2\delta \text{ а.е.} = -1.7 \cdot 10^{23} \text{ Гц(электрон} \cdot \text{см)}^{-1}. \quad (14)$$

что в 24 раза меньше, чем в ВаF [4], и в 90 раз меньше, чем в молекуле YbF [5]. Отметим, что поскольку рассматриваемые эффекты имеют сильную зависимость от  $Z$ , то, оценивая потери в величинах  $P$ - и  $P, T$ -нечетных эффектов при переходе от радикалов к ВДВ молекулам, следует сравнивать молекулы с близкими значениями  $Z$ . В нашем случае это молекулы CsXe и

ВаF. Воспользовавшись пропорциональностью между константами  $W^d$  и  $W_2^p$ , извлечем параметр  $W_2^p$  из расчета молекулы ВаF [4]:

$$W_2^p \approx \frac{1}{24} W_2^p(\text{BaF}) = 10 \text{ Гц.} \quad (15)$$

Использованная здесь модель не позволяет претендовать на оценку, лучшую, чем по порядку величины. Однако отметим, что более аккуратные расчеты возможны. Для этого можно использовать как полумпирический метод [12], так и современные численные методы [13].

В заключение остановимся на вопросе о том, что можно ожидать от использования ВДВ молекул в качестве объекта для экспериментов по исследованию  $P$ - и  $P, T$ -неинвариантных электрон-нуклонных взаимодействий. Планируя прецизионные молекулярно-пучковые эксперименты, приходится принимать во внимание не только величины фактора усиления искомых эффектов для той или иной молекулы, но и ее физико-химические свойства. С точки зрения набора статистики, в первую очередь учитываются возможность создать достаточно интенсивный пучок молекул в рабочем состоянии (нижнем вращательном основном колебательном) и достижимая эффективность регистрации. В этом плане наиболее перспективным для рассматриваемых экспериментов считается радикал  $\text{YbF}$  [14], который может быть эффективно задетектирован с помощью положительной поверхностной ионизации. Образуется  $\text{YbF}$  в газовой фазе при химической реакции  $\text{YbF}_3$  с  $\text{Al}$  при температуре 1200С [8]. Для формирования пучка используется эффузионный источник. В результате пучок обладает широкими угловым и скоростным распределениями, а заселенность рабочего состояния оказывается порядка  $10^{-5}$ .

К основным проблемам постановки молекулярных экспериментов по поиску  $P, T$ -нечетных эффектов, наряду с вопросом статистики, относится проблема устранения основного ложного эффекта – квадратичного эффекта Штарка [15]. Для его принципиального исключения в работе [16] предложено использовать интерференцию вырожденных (в электрическом поле) уровней сверхтонкой структуры вместо традиционного резонансного метода Рамзея. Для осуществления интерференционной методики необходим молекулярный пучок с высокой степенью монохроматичности по скорости. Удастся ли создать такой пучок химических радикалов, используя, например, принцип, описанный в работах [17,18], остается под вопросом. Использование механического монохроматора при максвелловском распределении по скорости молекул в пучке от эффузионного источника приведет к большой потере интенсивности. В отличие от радикалов, ВДВ молекулы эффективно образуются при адиабатическом охлаждении в сверхзвуковом потоке, формирующемся при истечении из сопла в вакуум смеси благородного газа с малой примесью паров щелочного металла [19]. При этом в принципе достижимы трансляционные и вращательные температуры порядка нескольких градусов Кельвина [20]. Как показывают расчеты [21], переход от эффузионного пучка к пучку, формируемому газодинамическим источником, дает существенный, до четырех порядков, выигрыш в интенсивности пучка молекул в рабочем состоянии. Тем не менее, основное достоинство ВДВ молекул видится в возможности осуществить схему интерференционного эксперимента дифференциального типа, аналогичную рассмотренной в работе [22].

На наш взгляд, приведенные аргументы указывают в пользу того, что проигрыш около двух порядков в величинах  $P$ - и  $P,T$ -нечетных эффектов для ВДВ молекул с неспаренным электроном, типа CsXe, по сравнению с молекулами-радикалами, может в значительной степени компенсироваться преимуществами в экспериментальной работе с ВДВ молекулами.

Авторы благодарны В.Ф.Ежову и Л.Н.Лабзовскому за полезные обсуждения. Данная работа выполнена в рамках подготовки эксперимента по поиску эффектов нарушения  $T$ -инвариантности в молекулах, поддержанного грантом 94-02-06242 Российского фонда фундаментальных исследований.

- 
1. Л.Н.Лабзовский, ЖЭТФ **75**, 856 (1978).
  2. О.П.Сушков, В.В.Фламбаум, ЖЭТФ **75**, 1208 (1978).
  3. В.Г.Горшков, Л.Н.Лабзовский, А.Н.Москалев, ЖЭТФ **76**, 414 (1979).
  4. M.G.Kozlov and L.N.Labzovsky, Topical Rev. J.Phys.B **28**, 1933 (1995).
  5. M.G.Kozlov and V.F.Ezhov, Phys.Rev.A **49**, 4502 (1994).
  6. И.Б.Хриплович, *Несохранение четности в атомных явлениях*, М.: Наука, 1988.
  7. E.D.Commins, S.B.Ross, D.DeMille, and B.C.Regan, Phys.Rev.A **50**, 2960 (1994).
  8. V.E.Sauer, J.Wang, and E.A.Hinds, Phys.Rev.Lett. **74**, 1554 (1995).
  9. Б.М.Смирнов, УФН **142**, 31 (1984).
  10. В.В.Фламбаум, И.Б.Хриплович, ЖЭТФ **79**, 1656 (1980).
  11. А.А.Радциг, Б.М.Смирнов, *Параметры атомов и атомных частиц*, М.: Энергоатомиздат, 1986.
  12. М.Г.Козлов, ЖЭТФ **89**, 1933 (1985).
  13. A.V.Titov, N.S.Mosyagin, and V.F.Ezhov, Preprint PNPI-2092, Gatchina, 1995.
  14. V.E.Sauer, S.K.Peck, G.Redgrave, and E.A.Hinds, 15-th Int. Conf. on Atomic Physics. Abstracts, Amsterdam, 1996, - TuA12.
  15. J.D.Cho, K.Sangster, and E.A.Hinds, Phys.Rev.Lett. **63**, 2559 (1989).
  16. В.Ф.Ежов, М.Г.Козлов, В.Л.Рябов и др., Письма в ЖТФ **21**, 34 (1995).
  17. В.Л.Варенцов, В.В.Ящук, Письма в ЖТФ **9**, 147 (1983).
  18. R.Campargue, Rarefied Gas Dynamics **2**, 279 (1966).
  19. W.P.Lapatovich, R.Ahmad-Bitar, P.E.Moskowitz, et.al. J.Chem.Phys. **73**, 5419 (1980).
  20. В.В.Ящук, Автореферат канд. диссер., Л., 1994.
  21. B.N.Ashkinadze, M.N.Groshev, V.F.Ezhov, et.al., Preprint LNPI-1801, L., 1992.