

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ

РГБ 04

На правах рукописи

БОЦДАРЕВ ИГОРЬ ВИКТОРОВИЧ

ЭФФЕКТЫ СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ОСНОВНОГО
СОСТОЯНИЯ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ АТОМОВ
ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ

01.04.02 – теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Минск – 1993

Работа выполнена в ИИИ ядерных проблем при Белорусском государственном университете.

Научный руководитель: кандидат физико – математических наук,
зав. отделом ИИИ ядерных проблем
КУТЕНЬ С.А.

Официальные оппоненты: доктор физико – математических наук,
профессор кафедры теоретической
физики Белгосуниверситета
ФЕРАНЧУК И.Д.
кандидат физико – математических наук,
доцент кафедры физики БГПА
КУЖИР П.Г.

Ведущая организация: Институт физики АН Республики
Беларусь

Защита состоится *"19" сентября* 1993 г. в *10⁰⁰* часов на заседании специализированного совета К056.03.09 в Белорусском государственном университете (220080 г. Минск, проспект Франциска Скорины, 4, главный корпус, к.206).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Белгосуниверситета.

Автореферат разослан *"12" октября* 1993 г.

Ученый секретарь
специализированного совета,
кандидат физико-математических наук

 Ивашин А.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Водородоподобные (ВП) атомы были и остаются традиционными объектами теоретических и экспериментальных физических исследований. Предельная простота их строения и возможность прецизионного измерения их характеристик привели к тому, что в настоящее время ВП атомы являются одними из наиболее хорошо изученных физических объектов. Тем не менее, даже у таких систем удается обнаружить новые, ранее неизвестные свойства.

Так в 1967г. П.Сандарсом теоретически было показано, что ВП атом в основном $1S_{1/2}$ -состоянии с полным моментом $F \geq 1$ имеет тензорную поляризуемость. Последняя возникает в основном состоянии благодаря нецентральной части сверхтонкого взаимодействия (СТВ) между электроном и ядром и отвечает за расщепление магнитных подуровней атома в однородном электрическом поле (эффект Штарка на сверхтонкой структуре). В 1976г. В.Г.Барышевским теоретически было показано, что у ВП атома в $1S_{1/2}$ -состоянии имеется еще одна фундаментальная константа - значительный по величине ($\sim 10^{-24}$ см²) электрический квадрупольный момент. Квадрупольный момент, также как и тензорная поляризуемость, обусловлен нецентральной частью СТВ и проявляется при взаимодействии атома с неоднородными электрическими полями. В 1987г. И.Б.Хриповичем вместе с сотрудниками было указано на наличие динамической векторной поляризуемости основного уровня ВП атома, ответственной за расщепление магнитных подуровней в циркулярно-поляризованном свете.

Однако, перечисленные теоретические исследования оставили после себя ряд неизученных вопросов. Так, например, хотя статическая тензорная поляризуемость основного уровня ВП атома была аналитически вычислена П.Сандарсом еще в 1967г., к настоящему времени не был исследован вопрос о частотной зависимости этой величины в переменном лазерном поле. В работах И.Б.Хриповича и др. было изучено лишь асимптотическое поведение векторной поляризуемости ВП атома при больших и малых частотах. Вопрос же об аналитическом ее поведении во всей области оптических частот оставлен в стороне. Между тем, современное развитие экспериментальных методов лазерной спектроскопии позволяет с высокой степенью точности исследовать эффект Штарка изолированных атомных уровней (в том числе и уровней сверхтонкой структуры) в сильных полях. В связи с этим представляется актуальным и важным проведение аналитических

расчетов динамических тензорной и векторной поляризуемостей ВП атома по крайней мере для основного $1S_{1/2}$ -уровня. Важность таких исследований дополняется также следующими причинами. Тензорная и векторная поляризуемости, также как и скалярная поляризуемость, дают вклад в полную поляризуемость основного уровня атома электромагнитным полем. И, хотя эти вклады достаточно малы ($\sim \alpha^2$ для векторной и $\sim \alpha^2 \mu_I$ для тензорной поляризуемости, α и μ_I — соответственно, постоянная тонкой структуры и магнитный момент ядра), они могут оказаться существенными на тех частотах, при которых скалярная поляризуемость уровня равна нулю. Кроме того, несмотря на то, что современные компьютерные методы позволяют получить численные значения необходимых атомных параметров практически для всех частот переменного внешнего поля, преимущества аналитического выражения очевидны: оно, например, позволяет "увидеть" функциональное поведение атомного параметра во всем допустимом частотном интервале, установить резонансные области и поведение вблизи резонансов, получить различные аналитические асимптотики и т.д..

Представляют интерес также аналитические расчеты статических тензорных поляризуемостей ВП атомов в возбужденных $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояниях ($n \geq 2$), поскольку в этих состояниях вся тензорная поляризуемость уровня обусловлена сверхтонким взаимодействием между электроном и ядром. Статические тензорные поляризуемости в этих состояниях могут быть измерены экспериментально в сильных полях.

Из исследований по квадрупольному моменту ВП атома детального рассмотрения требует вопрос о квадрупольном моменте легчайшего ВП атома — позитрония (Ps). Для позитрония имеет место уникальная ситуация. Как известно, свободный атом позитрония в вакууме является полностью электронейтральной системой. Это означает, что, вследствие равенства масс электрона и позитрона, а также из-за выполнения законов СР- и Т-инвариантности в системе "частица античастица", атом Ps не может иметь мультипольных моментов. Если же позитроний находится в веществе (в частности, в кристалле), то из-за различного характера взаимодействия электрона и позитрона с окружением, их эффективные массы, вообще говоря, не равны друг другу. Как следствие, в среде при неравных эффективных массах электрона и позитрона атом позитрония может иметь ненулевой эффек-

тивный квадрупольный момент. Соответственно, позитроний, такие как мюоний и водород, будет испытывать на себе влияние неоднородных внутренних электрических полей в среде. Наличие $Q_p \neq 0$ позволяет, таким образом, получать информацию как об эффективных массах электрона и позитрона, так о и распределении неоднородных внутрикристаллических полей в кристаллах с некубической решеткой. В этой связи детальное теоретическое рассмотрение эффективного квадрупольного взаимодействия позитрония в кристалле, анализ различных экспериментально наблюдаемых проявлений такого взаимодействия являются весьма актуальной задачей, поскольку при этом расширяется область применения нового (сформировавшегося всего 15–20 лет назад) направления в экспериментальной физике твердого тела – позитронной спектроскопии твердых тел. С другой стороны, экспериментальная регистрация предсказываемых теорией явлений была бы подтверждением того факта, что P_2 в кристалле приобретает новую фундаментальную характеристику, отсутствующую у него в вакууме – электрический квадрупольный момент.

Цель работы. Целью настоящей диссертационной работы является:

1. Получение аналитических выражений для следующих инвариантных атомных параметров основного $1S_{1/2}$ -уровня ВП атома:
 - для обусловленной СТВ динамической тензорной поляризуемости;
 - для обусловленной спин-орбитальным расщеплением возбужденных уровней и релятивистской поправкой в электрический дипольный момент атома векторной поляризуемости;

2. Анализ частотных зависимостей этих инвариантных атомных параметров в области малых и резонансных частот внешнего электромагнитного поля;

3. Аналитический расчет обусловленных СТВ статических тензорных поляризуемостей ВП атомов в состояниях с полным моментом электронной оболочки $J=1/2$: в $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояниях ($n \geq 2$);

4. Построение теории образования эффективного квадрупольного момента у атома позитрония в кристалле и исследование влияния эффективного квадрупольного взаимодействия позитрония на сверхтонкую структуру (СТС) его уровней и параметры его аннигиляции в кристалле.

Научная новизна работы. В работе получены аналитические выражения для динамических тензорной и векторной поляризуемостей

основного $1S_{1/2}$ -уровня ВП атома. Проанализировано их поведение в области малых и резонансных частот внешнего электромагнитного поля. Показано, что в области малых частот найденные аналитические выражения сводятся к хорошо известным результатам П.Сандарса и И.В.Хрипловича с сотрудниками. В области резонансных частот они, в отличие от выражения для скалярной поляризуемости, являются четными функциями частоты. Указывается, что благодаря динамической тензорной поляризуемости вполне реально экспериментально наблюдать эффект двойного лучепреломления в поляризованном атомарном водороде.

Проанализирован механизм образования и выведены аналитические выражения для обусловленных СТВ статических тензорных поляризуемостей $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояний ($n \geq 2$) ВП атомов. Получены их зависимости от главного квантового числа.

В рамках модели экситонного позитрониевого состояния малого радиуса построена полуклассическая теория образования эффективного квадрупольного момента у атома Ps в кристалле. Показано, что наличие у позитрония эффективного квадрупольного момента и тензорной поляризуемости приводят к анизотропному СТВ между электроном и позитроном ("анизотропный" позитроний).

Проанализирована сверхтонкая структура основного уровня атома позитрония при учете его квадрупольного взаимодействия в кристалле. Показано, что в присутствии внешнего магнитного поля квадрупольное расщепление его сверхтонких уровней является анизотропным и зависит от относительной ориентации магнитного поля и оси симметрии кристаллического поля.

Выполнены расчеты сечения 3γ -аннигиляции ортопозитрония в кристалле. Показано, что сечение и, как следствие, скорость счета распадающих γ -квантов должны осциллировать на частотах квадрупольного расщепления сверхтонких уровней позитрония. Угловое распределение аннигиляционных фотонов, скорости затухания и частоты осцилляций - анизотропны и зависят от относительной ориентации кристалла и внешнего магнитного поля. Предложен метод для экспериментального определения знака эффективной квадрупольной постоянной "анизотропного" позитрония.

Выполнен аналитический расчет распадных ширин спиновых уровней "анизотропного" позитрония при произвольной ориентации внешнего магнитного поля относительно оси симметрии кристаллического

го поля. Показано, что процесс магнитного тушения позитрония в кристалле является анизотропным, т.е. зависит от взаимной ориентации кристалла и внешнего магнитного поля. Предсказывается значительная величина анизотропии в полимерах с высокой степенью кристалличности.

Проанализирована экспериментальная ситуация по наблюдению явления анизотропии магнитного тушения и оценена величина анизотропии для позитрония в кристалле α -кварца.

На защиту выносятся следующие основные положения:

- аналитические выражения для инвариантных атомных параметров (динамические тензорная и векторная поляризуемости) основного $1S_{1/2}$ -уровня ВП атома, находящегося в переменном внешнем электромагнитном поле;

- аналитические выражения для обусловленных СТВ статических тензорных поляризуемостей $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояний ($n \geq 2$) ВП атомов;

- полуфеноменологическая теория образования эффективного квадрупольного момента у атома позитрония в кристалле;

- результаты анализа квадрупольного расщепления сверхтонких уровней позитрония в кристалле при наличии внешнего магнитного поля;

- анализ влияния обменных и квадрупольных взаимодействий на угловое распределение квантов 3γ -распада ортопозитрония;

- теория явления анизотропии магнитного тушения позитрония в кристалле;

- анализ экспериментальной ситуации по наблюдению явления анизотропии магнитного тушения позитрония в кристалле α -кварца.

Практическая ценность работы. Полученные в диссертации аналитические выражения для динамических тензорной и векторной поляризуемостей $1S_{1/2}$ -состояния, для статических тензорных поляризуемостей $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояний ВП атомов могут быть использованы в широком круге проблем атомной физики, изучающих взаимодействие атомов с внешним электромагнитным полем при учете СТС атомных уровней.

Результаты теоретического анализа эффективного квадрупольного взаимодействия позитрония в кристалле могут послужить отправной точкой для нового цикла экспериментальных работ, направленных на изучение природы позитрониевоподобных состояний в кристаллах с

некубической решеткой, а также на изучение электрических свойств кристаллов с помощью позитронов.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались на IV Международном совещании по ядерно-спектроскопическим исследованиям сверхтонких взаимодействий (Ужгород, СССР, 26-28 июня, 1991), 9-й Международной конференции по аннигиляции позитронов (Зомбатхели, Венгрия, 26-31 августа, 1991), Всесоюзном семинаре "Позитронная аннигиляция в твердых телах" (Обнинск, СССР, 10-12 сентября, 1991), 4-й Европейской конференции по атомной и молекулярной физике (Рига, Латвия, 6-10 апреля, 1992), IX-й Международной конференции по сверхтонким взаимодействиям (Осака, Япония, 17-21 августа, 1992), Международной школе по аннигиляции позитронов в твердых телах (Варенна, Италия, 6-16 июля, 1993), XII-м Международном симпозиуме по ядерному квадрупольному резонансу (Цюрих, Швейцария, 19-23 июля, 1993), Международном рабочем совещании по взаимодействию атома с излучением (Триест, Италия, 20 июля - 10 августа, 1993), V Международном совещании по ядерно-спектроскопическим исследованиям сверхтонких взаимодействий (Дубна, Россия, 21-25 сентября, 1993).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 16 работах.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Она содержит 150 страниц машинописного текста, в числе которых 5 страниц с рисунками, 12 страниц списка цитируемой литературы, включающего 113 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во Введении обоснована актуальность и сформулирована цель исследования, перечислены основные положения, выносимые на защиту. Здесь же кратко изложено содержание диссертации.

Первая глава диссертации посвящена получению и исследованию аналитических выражений для инвариантных атомных параметров (векторная и тензорная поляризуемость) основного $1S_{1/2}$ -состояния и возбужденных $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояний ($n \geq 2$) ВП атома при учете СТС его уровней.

Первый раздел этой главы носит вводный характер и знакомит с определением инвариантных атомных параметров, их связью со ска-

ядрной, векторной и тензорной поляризуемостью изолированного атомного уровня в переменном внешнем поле.

Второй раздел посвящен анализу эффекта Штарка на СТС уровня $1S_{1/2}$ ВП атома. Здесь проанализирован механизм образования и проведен аналитический расчет динамической тензорной поляризуемости $1S_{1/2}$ -состояния. Динамическая тензорная поляризуемость возникает в этом состоянии за счет нецентральной части СТВ между электроном и ядром, в третьем порядке теории возмущений по операторам СТВ и электрического дипольного взаимодействия с внешним полем. Исходное выражение для вычисления поляризуемости задается Z -компонентой индуцированного дипольного момента атома, вычисленного с точностью до членов $\sim \alpha^2 \mu_I$ (кулоновские единицы, α и μ_I — постоянная тонкой структуры и магнитный момент ядра, соответственно):

$$\alpha_i(\omega) \cos \omega t = -\frac{3}{2F(2F-1)} \operatorname{Re} \left\{ \langle \psi^{(0)}(\vec{r}, t) | \hat{Z} | \psi_{hf,E}^{(2)}(\vec{r}, t) \rangle + \right. \quad (1) \\ \left. \langle \psi_E^{(1)}(\vec{r}, t) | \hat{Z} | \psi_{hf}^{(1)}(\vec{r}, t) \rangle \right\},$$

где $\alpha_i(\omega)$ — искомая тензорная поляризуемость, $F = I \pm 1/2$ — полный момент ВП атома, I — спин ядра, $\psi^{(0)}(\vec{r}, t)$ — невозмущенная волновая функция $1S_{1/2}$ -состояния. Поправки $\psi_E^{(1)}(\vec{r}, t)$, $\psi_{hf}^{(1)}(\vec{r}, t)$, $\psi_{hf,E}^{(2)}(\vec{r}, t)$ к невозмущенной волновой функции обусловлены электрическим дипольным взаимодействием, СТВ и их совместным действием, соответственно.

Радialное интегрирование в (1) выполнялось методом преобразования Лапласа (А.Г.Маханек, В.С.Корольков "Аналитические методы в динамической теории возмущений" — Минск: Наука и Техника, 1932). В лапласовских переменных формула (1) имеет вид:

$$\alpha_i(\omega) = \alpha_i(+\omega) + \alpha_i(-\omega), \quad (2)$$

$$\alpha_i(\pm\omega) = -\frac{3(F+1)}{2F(2F+3)(2F-1)} \left\{ \eta_F^E \frac{dH_F^{(\pm)}(p, \omega)}{dp} + \right. \\ \left. \frac{\lambda_F}{3\sqrt{3}} (\alpha^2 \mu_I \eta_F^H + Q \eta_F^Q) \left(F_F^{(\pm)}(p, \omega) - \frac{1}{3} \frac{dF_F^{(\pm)}(p, \omega)}{dp} \right) \right\} \Big|_{p=1}.$$

где функции $F_F^{(\pm)}(p, \omega)$ и $H_F^{(\pm)}(p, \omega)$ – лапласовские образы радиальных частей поправок $\psi_E^{(1)}(\vec{r}, t)$ и $\psi_{hf}^{(1)}(\vec{r}, t)$, $\psi_{hf,E}^{(2)}(\vec{r}, t)$, соответственно, ω – частота световой волны. Спинные множители η_F^E , $\lambda_F \eta_F^H$, $\lambda_F \eta_F^Q$ происходят, соответственно, от электрического дипольного взаимодействия, магнитного диполь-дипольного и электрического квадрупольного СТВ (Q – квадрупольный момент ядра ВП атома).

Расчеты тензорной поляризуемости по формуле (2) приводят к выражению, квадратичному по гипергеометрическим функциям ${}_2F_1$ и сводящемуся (для водорода) при $\omega \rightarrow 0$ к хорошо известному статическому пределу $\alpha_i(0) = -47\alpha^2 \mu_I/40$, полученному в 1967г. П.Сандарсом (Proc.Phys.Soc. 92(1967)857).

В разделе I.3 получено аналитическое выражение для векторной поляризуемости $1S_{1/2}$ -уровня ВП атома. Векторная поляризуемость возникает в этом состоянии по двум причинам: из-за спин-орбитального расщепления возбужденных уровней и из-за релятивистской ($\sim \alpha^2$) поправки в электрический дипольный момент атома. Последняя, как показано О.Л.Жикимовым и Н.Б.Хрипиловцем (ЖЭТФ 87(1984) 547), возникает при рассмотрении амплитуды упругого дипольного рассеяния света на ионизированном атоме при учете взаимодействия оптического электрона с электромагнитным полем с точностью до релятивистских ($\sim v^2/c^2$) членов. При частотах внешнего поля $\omega \ll \alpha$ (кулоновские единицы) электрический дипольный момент атома с учетом этой поправки может быть записан в виде: $\vec{d} = -\vec{r} - \alpha^2(\vec{p} \times \vec{\sigma})/4$, – где $\vec{p}$ – импульс оптического электрона в атоме, $\vec{\sigma}/2$ – его спин.

Исходное выражение для вычисления векторной поляризуемости получается из записанного с точностью до членов $\sim \alpha^2$ индуцированного дипольного момента атома:

$$i\alpha_v(\omega)\varepsilon_{ijk}J_kE_j(t) = -\alpha^2 2Re\{2(\psi^{(0)}(\vec{r}, t) | \frac{1}{4}(\vec{p} \times \vec{\sigma}) | \psi_E^{(1)}(\vec{r}, t)) + \quad (3) \\ (\psi^{(0)}(\vec{r}, t) | \vec{r} | \psi_{W,E}^{(2)}(\vec{r}, t))\},$$

где $\alpha_v(\omega)$ – векторная поляризуемость $1S_{1/2}$ -уровня, ε_{ijk} – единичный антисимметричный псевдотензор Леви-Чивита, $\vec{J}$ – полный электронный момент атома, $\vec{E}(t)$ – внешнее монохроматическое поле. Поправки $\psi_E^{(1)}(\vec{r}, t)$ и $\psi_{W,E}^{(2)}(\vec{r}, t)$ к невозмущенной волновой функции $\psi^{(0)}(\vec{r}, t)$ обусловлены электрическим дипольным взаимодействием и совместным

действием последнего и спин-орбитального взаимодействия, соответственно.

Вычисление радиальных матричных элементов в (3), также как и в случае тензорной поляризуемости, выполнялось методом преобразования Лапласа. В лапласовских переменных выражение для векторной поляризуемости имеет вид:

$$\alpha_v(\omega) = \alpha_v(-\omega) - \alpha_v(+\omega), \quad (4)$$

$$\alpha_v(\pm\omega) = \alpha^2 \frac{8}{3} \left(J^{(\pm)}(p, \omega) + \frac{dG^{(\pm)}(p, \omega)}{dp} \right) \Big|_{p=1},$$

где функции $J^{(\pm)}(p, \omega)$ и $G^{(\pm)}(p, \omega)$ — лапласовские образы радиальных частей поправок $\psi_E^{(1)}(\vec{r}, t)$ и $\psi_{WE}^{(2)}(\vec{r}, t)$.

Расчеты векторной поляризуемости по формуле (4) приводят к выражению, квадратичному по гипергеометрическим функциям ${}_2F_1$. При малых частотах внешнего поля (в линейном по частоте приближении) это выражение сводится к полученному в 1937г. результату И.Б.Хриновича и др. (J.Phys.B 20(1987)L655): $\alpha_v(\omega) \approx (-91/72)\alpha^2\omega$.

В разделе 1.4 проанализирован механизм образования и представлены результаты аналитических расчетов статических тензорных поляризуемостей ВП атомов в состояниях с полным моментом электронной оболочки $J=1/2$: в $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояниях ($n \geq 2$). Наличие тензорных поляризуемостей в этих состояниях полностью обусловлено СТБ между электроном и ядром: тензорная поляризуемость $nS_{1/2}$ -состояния ($\alpha_t(nS_{1/2})$) возникает благодаря нецентральной части магнитного диполь-дипольного СТБ, а тензорная поляризуемость $nP_{1/2}$ -состояния ($\alpha_t(nP_{1/2})$) — из-за его контактной части. Электрическое квадрупольное СТБ не даст вклада ни в $\alpha_t(nS_{1/2})$, ни в $\alpha_t(nP_{1/2})$ из-за правила сложения моментов.

Применительно к ВП атому вычисление поляризуемостей $\alpha_t(nS_{1/2})$ и $\alpha_t(nP_{1/2})$ сильно упрощается по той причине, что здесь уровень $nS_{1/2}$ расположен намного ближе к $nP_{1/2}$, чем все остальные — они разделены лишь лэмбовским сдвигом. Как следствие, при суммировании по промежуточным состояниям главный вклад в сумму будут давать матричные элементы на состояниях, разделенных лэмбовским сдвигом ($nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояния) и удовлетворяющих правилам отбора по операторам электрического дипольного момента и СТБ. В этих условиях для

статических тензорных поляризуемостей были получены следующие результаты (обычные единицы):

$$\alpha_i(nP_{1/2}) = -\frac{3}{128} \frac{\Delta}{\Delta_L} \frac{Z^2 Ry}{\Delta_L} n^5 (n^2 - 1) a^3 \eta^F, \quad (5)$$

$$\alpha_i(nS_{1/2}) = \frac{1}{6} \alpha_i(nP_{1/2}),$$

где $\Delta = 32\mu_0\mu_I/3a^3$ (μ_0 – магнетон Бора, μ_I – магнитный момент ядра), $Ry = me^4/2\hbar^2$, $a = \hbar^2/mZe^2$ – боровский радиус, Δ_L – лэмбовское расщепление уровней $nS_{1/2}$ и $nP_{1/2}$, n – главное квантовое число. Спинный множитель $\eta^F = \pm 1/3I(2I + 1)$ для $F = I \pm 1/2$, соответственно (F – полный момент ВП атома, I – спин ядра).

Вторая глава диссертации носит вводный характер и знакомит с основными свойствами позитрона и позитрония (раздел II.1), а также с основными экспериментальными методами позитронной спектроскопии твердых тел (разделы II.2 и II.3). Здесь рассмотрены наиболее широко использующиеся в литературе теоретические модели позитронных состояний в ионных кристаллах и полупроводниках (раздел II.4), подробно проанализирована экситонная модель позитрония в кристалле (разделы II.4 и II.5).

Третья глава посвящена анализу сверхтонкой структуры основного уровня атома позитрония при учете его квадрупольного взаимодействия в кристалле.

В разделе III.1 этой главы в рамках модели экситонного позитронного состояния малого радиуса построена полуфеноменологическая теория образования эффективного квадрупольного момента у атома Ps в кристалле. Эффективный квадрупольный момент возникает у позитрония при неравных экситонных массах электрона и позитрона, благодаря нецентральной части СТВ, примешивающей D -волну (орбитальный момент $\ell = 2$) к основному S -состоянию атома. Эффективное квадрупольное взаимодействие позитрония является третьим членом ($\ell = 2$) мультипольного разложения действующего на него кристаллического потенциала и должно проявляться в кристаллах с некубической решеткой.

Другим проявлением присутствия D -волны в основном состоянии позитрония является наличие у него тензорной поляризуемости. Последняя определяется не зависающим от экситонных масс электрона и

позитрона, индуцированными внутрикристаллическими электрическими полями дипольным моментом, который, в свою очередь, задается вторым членом (орбитальный момент $\ell=1$) мультипольного разложения действующего на позитронный кристаллического потенциала.

В разделе III.2 показано, что наличие у позитрония в кристалле эффективного квадрупольного момента и тензорной поляризуемости приводит к анизотропному СТВ между электроном и позитроном. Рассчитаны спиновые уровни энергии такого "анизотропного" позитрония в параллельном и перпендикулярном оси симметрии кристаллического поля магнитном поле. Полученные уровни энергии имеют вид ($\hbar=1$):

$$E_{0,1} = -\frac{1}{4}(\omega + \bar{d} + \frac{2\alpha_l \varepsilon^2}{3}) \mp \frac{1}{2} \left(\omega - \frac{\bar{d}}{2} (1 + \frac{2\alpha_l \varepsilon^2}{3\bar{d}}) \right) \sqrt{1 + x_{\parallel}^2}$$

$$E_{2,3} = \frac{1}{4}(\omega + \bar{d} + \frac{2\alpha_l \varepsilon^2}{3}) \pm \frac{\bar{d}\tilde{\eta}}{4} \sqrt{1 + y_{\parallel}^2} \quad (6)$$

в параллельном и

$$E_{0,1} = -\frac{1}{4} \left(\omega - \frac{\bar{d}}{2} (1 - \tilde{\eta} + \frac{2\alpha_l \varepsilon^2}{3\bar{d}}) \right) \mp \frac{1}{2} \left(\omega + \frac{\bar{d}}{4} (1 - \tilde{\eta} + \frac{2\alpha_l \varepsilon^2}{3\bar{d}}) \right) \sqrt{1 + x_{\perp}^2}$$

$$E_{2,3} = \frac{1}{4} \left(\omega - \frac{\bar{d}}{2} (1 - \tilde{\eta} + \frac{2\alpha_l \varepsilon^2}{3\bar{d}}) \right) \pm \frac{\bar{d}}{8} (3 + \tilde{\eta} + \frac{2\alpha_l \varepsilon^2}{3\bar{d}}) \sqrt{1 + y_{\perp}^2}$$

в перпендикулярном поле (здесь: $x_{\parallel}=2B(\mu_e-\mu_p)/(\omega-(\bar{d}/2)(1+2\alpha_l\varepsilon^2/3\bar{d}))$, $y_{\parallel}=4B(\mu_e+\mu_p)/\bar{d}\tilde{\eta}$, $x_{\perp}=2B(\mu_e-\mu_p)/(\omega+(\bar{d}/4)(1-\tilde{\eta}+2\alpha_l\varepsilon^2/3\bar{d}))$, $y_{\perp}=8B(\mu_e+\mu_p)/(\bar{d}(3+\tilde{\eta}+2\alpha_l\varepsilon^2/3\bar{d}))$, μ_e , μ_p - магнитные моменты электрона и позитрона, соответственно, ω - частота спонтанного расщепления основного уровня позитрония в кристалле, $\bar{d}=Q\bar{\varphi}_{xx}$ и $\tilde{\eta}=|(\bar{\varphi}_{xx}-\bar{\varphi}_{yy})/\bar{\varphi}_{xx}|$ - квадрупольная постоянная позитрония и параметр асимметрии тензора электрических полей и их градиентов (ЭПГ) $\bar{\varphi}_{ik}=\varphi_{ik}-(2\alpha_l/Q)\varepsilon_i\varepsilon_k$ ($\varphi_{ik}=\partial^2\varphi(0)/\partial x_i\partial x_k$, $\varepsilon_i=\partial\varphi(0)/\partial x_i$, $\varphi(0)$ - потенциал поля локального окружения в центре масс позитрония), Q и α_l - эффективный квадрупольный момент и тензорная поляризуемость позитрония в кристалле), откуда видно, что эффективное квадрупольное расщепление спиновых уровней энергии позитрония является анизотропным и зависит от относительной ориентации внешнего магнитного поля и оси симметрии кристаллического поля (главной оси $\bar{Z}$ тензора ЭПГ).

В разделах III.3 и III.4 вычислены сечения 3γ -аннигиляции ортопозитрония в кристалле. Расчеты проведены для случаев регистрации распадающих фотонов тремя и одним детектором, когда магнитное поле параллельно оси симметрии кристаллического поля, как без учета (раздел III.3), так и при учете (раздел III.4) спин-обменного взаимодействия позитрония с электронами среды. Показано, что сечение 3γ -аннигиляции и, как следствие, скорость счета распадающих γ -квантов должны осциллировать во времени на частотах квадрупольного расщепления сверхтонких уровней позитрония в кристалле. В частности, при регистрации γ -квантов одним детектором сечение 3γ -распада имеет вид ($\vec{B} \parallel \vec{Z}$, $\vec{Z}$ — главная ось ЭПГ тензора):

$$\begin{aligned} \sigma(t) = & \frac{c^2 \Delta \Omega e^{-\lambda_1 t}}{1920 \pi^2 (m_+ m_-)^2} \{ I_{xx} + I_{yy} + I_{zz} - I_{zz} x_{\parallel} P^+ \cos \Theta + \\ & \frac{y_{\parallel} (I_{xx} - I_{yy})}{1 + y_{\parallel}^2} P^+ \cos \Theta (1 - \cos \omega_{23} t) + \frac{2 I_{xy}}{\sqrt{1 + y_{\parallel}^2}} P^+ \cos \Theta \sin \omega_{23} t + \\ & 2 P^+ \sin \Theta \left[\left(\frac{1}{\sqrt{1 + y_{\parallel}^2}} - \frac{x_{\parallel}}{2 \sqrt{1 + y_{\parallel}^2}} \right) I_{xy} \sin \omega_- t \cos \omega_+ t - \right. \\ & \left. \left(\frac{1}{\sqrt{1 + y_{\parallel}^2}} + \frac{x_{\parallel}}{2 \sqrt{1 + y_{\parallel}^2}} \right) I_{xx} \sin \omega_- t \sin \omega_+ t - \right. \\ & \left. \left. \frac{x_{\parallel}}{2} I_{zz} \cos \omega_- t \cos \omega_+ t + I_{xy} \cos \omega_- t \sin \omega_+ t \right] \right\}, \end{aligned} \quad (7)$$

где Θ — полярный угол, задающий направление вектора начальной поляризации позитронов $\vec{P}^+$, $\omega_{\pm} = (\omega_{12} \pm \omega_{13})/2$, $\omega_{nm} = E_m - E_n$ (энергии E_n ($n=0, 1, 2, 3$) и параметры $x_{\parallel}$, $y_{\parallel}$ определены в (6)), $\Delta \Omega$ — телесный угол из точки распада на окно детектора (предполагается малым), m_- и m_+ — экситонные массы электрона и позитрона, соответственно, v — их относительная скорость в атоме позитрония, λ_1 — скорость самоаннигиляции ортопозитрония в кристалле. Параметры I_{ab} ($a, b = x, y, z$) задают зависимость сечения от места локализации детектора, регистрирующего распадное излучение.

Показано, что угловое распределение аннигиляционных фотонов, скорости затухания и частоты осцилляций — анизотропны и зависят от относительной ориентации кристалла и магнитного поля.

Предложен метод для экспериментального определения знака аффективной квадрупольной постоянной позитрония.

Заключительная четвертая глава диссертации посвящена наиболее интересному предсказываемому в данной работе явлению — анизотропии магнитного туннелия позитрония в кристалле.

В первом разделе этой главы проанализирована сверхтонкая структура основного уровня позитрония при произвольном относительно оси симметрии кристаллического поля направлении внешнего магнитного поля. При вычислении спиновых уровней энергии эффективное квадрупольное взаимодействие учитывалось по теории возмущений. В первом порядке по квадрупольному взаимодействию эти уровни имеют вид ($\hbar=1$):

$$E_{0,1} = -\frac{\omega}{4} \mp \frac{\omega}{2} \sqrt{1+x^2} - \frac{\tilde{d}}{4} C_{1,0}^2 \phi(\vartheta, \varphi)$$

$$E_{2,3} = \frac{\omega}{4} \pm (\mu_e + \mu_p) B + \frac{\tilde{d}}{3} \phi(\vartheta, \varphi), \quad (8)$$

где $C_{0,1} = \sqrt{(1/2)(1 \pm 1/\sqrt{1+x^2})}$, $x = 2(\mu_e - \mu_p)B/\omega$, а функции

$$\phi(\vartheta, \varphi) = \left(1 + \frac{2\alpha_l \varepsilon^2}{3\tilde{d}}\right) (3 \cos^2 \vartheta - 1) + \tilde{\eta} \sin^2 \vartheta \cos 2\varphi$$

в явном виде задают анизотропную зависимость эффективного квадрупольного расщепления спиновых уровней позитрония от относительной ориентации кристалла и магнитного поля (ϑ и φ — соответственно, полярный и азимутальный углы, задающие направление внешнего магнитного поля относительно главной оси $\vec{Z}$ ЭПГ тензора).

В разделе IV.2 выполнен аналитический расчет распадных ширины спиновых уровней (8). Показано, что распадные ширины (скорости самоаннигиляции) и, соответственно, времена жизни синглетного и триплетного позитрония в кристалле в присутствии внешнего магнитного поля являются анизотропными и зависят от относительной ориентации кристалла и магнитного поля. Ориентационная зависимость задается угловой функцией $\phi(\vartheta, \varphi)$ (см.(8)).

В разделе IV.3 на основе вычисленных в разделе IV.2 скоростей самоаннигиляции анализируется явление анизотропии магнитного туннелия позитрония в кристалле. Эффект описывается формулами:

$$\lambda_{0,1} = \frac{\lambda_{s,1} + y^2(\vartheta, \varphi) \lambda_{t,1}}{1 + y^2(\vartheta, \varphi)}, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_t, \quad (9)$$

где $\lambda_i (i=0, 1, 2, 3)$ – расщепленные ширины спиновых уровней (8), $y^2(\vartheta, \varphi) = y^2(1 + \bar{d}\phi(\vartheta, \varphi)/2\omega\sqrt{1+x^2})$, $y = (\sqrt{1+x^2}-1)/x$, λ_s и λ_t – скорости самоаннигиляции синглетного и триплетного состояний позитрония в кристалле в отсутствие внешнего магнитного поля (из-за искажения волновой функции позитрония веществом кристалла эти величины, естественно, отличаются от своих вакуумных значений $\lambda_s^0 = 8 \cdot 10^3 \text{сек}^{-1}$ и $\lambda_t^0 = 7.14 \cdot 10^6 \text{сек}^{-1}$).

Согласно (9), процесс магнитного тушения позитрония зависит от направления внешнего магнитного поля относительно главной оси $\vec{Z}$ ЭПГ тензора в кристалле и изменяется при различных относительных ориентациях кристалла и магнитного поля. Ориентационная зависимость процесса определяется угловой функцией $\phi(\vartheta, \varphi)$ (см. (8)). В частности, при выполнении условия $\phi(\vartheta, \varphi) = 0$, т.е. когда

$$\sin^2 \vartheta = \frac{2(1 + 2\alpha_t \epsilon^2 / 3\bar{d})}{3(1 + 2\alpha_t \epsilon^2 / 3\bar{d}) - \bar{\eta} \cos 2\varphi}, \quad (10)$$

магнитное тушение позитрония в кристалле должно быть изотропным. Условие (10) представляет собой уравнение конуса с осью симметрии, направленной вдоль главной оси $\vec{Z}$ ЭПГ тензора. Таким образом, пока вектор внешнего магнитного поля направлен вдоль образующей конуса, эффективное квадрупольное взаимодействие не дает вклада в процесс магнитного тушения. Магнитное тушение не зависит от азимутального угла φ и является в этом смысле изотропным. При аксиальной симметрии ЭПГ тензора ($\bar{\eta} = 0$) конус в сечении дает окружность, а угол его полураствора равен $54^\circ 44'$. Если условие (10) не выполняется, то магнитное тушение позитрония является анизотропным и определяется его эффективным квадрупольным взаимодействием в кристалле.

В разделе IV.4 проанализирована экспериментальная ситуация по наблюдению явления анизотропии магнитного тушения позитрония в кристалле α -кварца. Основываясь на экспериментально измеренном значении квадрупольной постоянной моония (V.G. Baryshevsky et al. Z.Naturforsch. A 41(1986)19), оценена эффективная квадрупольная постоянная позитрония в α -кварце. Оценен также порядок величины анизотропии магнитного тушения позитрония в кварце. Согласно выполненным оценкам, максимальная величина анизотропии равна 1%.

Предсказывается значительная величина анизотропии в полимерах с высокой степенью кристалличности.

В заключении кратко перечислены основные результаты, полученные в диссертационной работе.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Получены аналитические выражения для динамических тензорной и векторной поляризуемостей основного $1S_{1/2}$ -уровня ВП атома. Проанализировано их поведение в области малых и резонансных частот внешнего электромагнитного поля. Показано, что в области малых частот найденные аналитические выражения сводятся к хорошо известным результатам П.Сандарса и П.В.Хрипловича с сотрудниками. В области резонансных частот они, в отличие от выражения для скалярной поляризуемости, являются четными функциями частоты.

2. Проанализирован механизм образования и выведены аналитические выражения для обусловленных СТВ статических тензорных поляризуемостей $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояний ВП атомов. Получены их зависимости от главного квантового числа.

3. В рамках модели экситонного позитрониевого состояния малого радиуса построена полуфеноменологическая теория образования эффективного квадрупольного момента у атома Ps в кристалле. Показано, что наличие у позитрония в кристалле эффективного квадрупольного момента и тензорной поляризуемости приводят к анизотропному СТВ между электроном и позитроном ("анизотропный" позитроний).

4. Проанализирована сверхтонкая структура основного уровня атома позитрония при учете его квадрупольного взаимодействия в кристалле. Сверхтонкие уровни энергии позитрония рассчитаны точно в параллельном и перпендикулярном оси симметрии кристаллического поля магнитном поле, а также по теории возмущений при произвольной относительной ориентации кристалла и магнитного поля. Показано, что квадрупольное расщепление сверхтонких уровней позитрония в кристалле является анизотропным и зависит от относительной ориентации внешнего магнитного поля и оси симметрии кристаллического поля (главной оси $\hat{Z}$ тензора электрических полей и их градиентов в кристалле).

5. Проведен детальный расчет сечения 3γ -аннигиляции ортопозитрония в кристалле. Расчеты выполнены для случаев регистрации

распадных фотонов тремя и одним детектором, когда внешнее магнитное поле параллельно оси симметрии кристаллического поля, как без учета, так и при учете спин-обменного взаимодействия позитрония с электронами среды. Показано, что сечение 3γ -аннигиляции и, как следствие, скорость счета распадных γ -квантов должны осциллировать на частотах квадрупольного расщепления сверхтонких уровней позитрония. Угловое распределение аннигиляционных фотонов, скорости затухания и частоты осцилляций – анизотропны и зависят от относительной ориентации кристалла и магнитного поля. Предложен метод для экспериментального определения знака эффективной квадрупольной постоянной позитрония в кристалле.

6. Выполнен аналитический расчет распадных ширин спиновых уровней позитрония при произвольной ориентации внешнего магнитного поля относительно оси симметрии кристаллического поля. Показано, что процесс магнитного тушения позитрония в кристалле является анизотропным, т.е. зависит от взаимной ориентации кристалла и внешнего магнитного поля. Предсказывается значительная величина анизотропии в полимерах с высокой степенью кристалличности.

7. Проанализирована экспериментальная ситуация по наблюдаемому явлению анизотропии магнитного тушения и оценена величина анизотропии для позитрония в кристалле α -кварца.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Бондарев И.В., Кутень С.А. Влияние кристаллического поля на угловое распределение квантов 3γ -распада позитрония // Физика твердого тела. 1990. т.32. с.3333.

2. Bondarev I.V., Kuten S.A. The effect of exchange and quadrupole interactions on the angular distribution of positronium 3γ -decay quanta in matter // Physics Letters A. 1991. v.154. p.154.

3. Bondarev I.V., Kuten S.A. The crystal field effect on the angular distribution of positronium 3γ -decay quanta // 9-th International Conference on positron annihilation. 26–31 August 1991, Szombathely, Hungary. Book of abstracts. p.A1.

4. Бондарев И.В., Кутень С.А. Влияние обменных и квадрупольных взаимодействий на угловое распределение квантов 3γ -распада позитрония // Тез. докл. Всесоюзного семинара "Позитронная аннигиляция в твердых телах". 10–12 сентября 1991, г.Обнинск. с.36.

5. Bondarev I.V., Kuten S.A., Lantsov I.E. Dynamical tensor polarizability in the ground state of the hydrogen atom // 4-th European Conference on atomic and molecular physics. 6-10 April 1992, Riga, Latvia. Book of abstracts. p.107.

6. Bondarev I.V., Kuten S.A., Lantsov I.E. Dynamical tensor polarizability in the ground state of the hydrogen atom // Journal of Physics B. 1992. v.25. p.4931.

7. Bondarev I.V., Rapoport V.I. Hyperfine interactions and tensor polarizability of the hydrogen-like atoms // IX-th International Conference on hyperfine interactions. 17-21 August 1992, Osaka, Japan. Book of abstracts. p.B-011.

8. Bondarev I.V., Kuten S.A. Hyperfine structure of the positronium energy levels in a crystal // IX-th International Conference on hyperfine interactions. 17-21 August 1992, Osaka, Japan. Book of abstracts. p.B-010.

9. Bondarev I.V., Kuten S.A., Lantsov I.E. Dynamical tensor polarizability in the ground state of the hydrogen atom // IX-th International Conference on hyperfine interactions. 17-21 August 1992, Osaka, Japan. Book of abstracts. p.B-009.

10. Бондарев И.В., Кутень С.А. Анизотропные сверхтонкие взаимодействия позитрония в веществе // В сб.: Материалы IV Международного совещания по ядерно-спектроскопическим исследованиям сверхтонких взаимодействий. 26-28 июня 1991, г.Ужгород. с.17. - М.: под. МГУ. 1992.

11. Bondarev I.V., Kuten S.A. Quadrupole interactions of positronium atom in a crystal // The NQR Newsletter. 1993. v.1. p.25.

12. Бондарев И.В., Кутень С.А., Ланцов И.Е. Динамическая тензорная поляризуемость основного состояния водородоподобного атома // Оптика и спектроскопия. 1993. т.74. с.641.

13. Бондарев И.В., Кутень С.А. Статические тензорные поляризуемости водородоподобных атомов в $nS_{1/2}$ - и $nP_{1/2}$ -состояниях // Оптика и спектроскопия. 1993. т.75. с.217.

14. Bondarev I.V., Kuten S.A. Quadrupole interactions of positronium atom in a crystal // XII International Symposium on nuclear quadrupole resonance. 19-23 July 1993, Zurich, Switzerland. Book of abstracts. p.78.

15. Bondarev I.V., Kuten S.A. Hyperfine structure of positronium energy levels in a crystal // Preprint N° IC/93/226. International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italy. 1993.

16. Бондарев П.В., Кутень С.А. Сверхтонкие взаимодействия и анизотропия магнитного тушения позитрония в кристалле // Тез. докл. V Международного совещания по ядерно-спектроскопическим исследованиям сверхтонких взаимодействий. 22-24 сентября 1993, г.Дубна. с.175.

Бондарев Игорь Викторович

Эффекты сверхтонкой структуры основного
состояния водородоподобных атомов
во внешних полях

Подписано к печати 11.10.93г.. Печать офсетная.
Бесплатно. Формат 60 × 90 1/16. Объем 1,23 п.л.
Тираж 100 экз. Заказ № 753

Отпечатано на ротационной ПИЦ Минфина РБ,
220004 Минск, Опацкого, 17