Прецизионные расчеты эффектов несохранения четности в атомах и проверка стандартной модели

Михаил Козлов
Петербургский институт ядерной физики

21 февраля 2002

Проверка стандартной модели. Основная цель представляемой работы заключается в проверке стандартной модели методами атомной физики. Работа в этом направлении идет уже несколько десятилетий многими группами во всем мире. За это время получена исключительно важная информация о фундаментальных взаимодействиях. Один из самых ярких примеров - это первое наблюдение нейтральных токов в электрон-нуклонном взаимодействии в новосибирском эксперименте на висмуте, которое было сделано до того, как это взаимодействие наблюдалось в эксперименте на ускорителе в Стенфорде.

В настоящее время атомная физика продолжает играть существенную роль в проверке стандартной модели. При этом сейчас усилия концентрируются на следующих направлениях:

1. <u>Прецизионные измерения слабых зарядов ядер</u> Такие измерения важны для проверки стандартной модели на уровне радиационных поправок. При этом атомные эксперименты оказываются чувствительными к параметру S Пескина-Такеучи и практически нечувствительны к параметру T. Еще более чувствительны атомные эксперименты к новым частицам, таким как второй Z-бозон или лептокварк. Здесь чувсвительность атомных экспериментов примерно на два порядка выше, чем чувствительность ускорительных экспериментов при энергии рождения Z-бозона.

2. <u>Измерение анапольных моментов ядер</u> Существование анапольных моментов у частиц было предсказано Зельдовичем. Первая реалистическая теория анапольных моментов ядер была предложена Фламбаумом и Хрипловичем. Они показали, что P-нечетные ядерные силы приводят к появлению у ядра анапольного момента, величина которого пропорциональна площади его поверхности. Единственное измерение анапольного момента было проведено в Боулдере для ядра цезия. Наблюдение анапольных моментов у других ядер даст уникальную информацию о слабых взаимодействиях нуклонов.

3. <u>Поиск ЭДМ электрона</u> Стандартная модель предсказывает исключительно малую величину ЭДМ электрона. В тоже время, практически все расшире-

ния стандартной модели предсказывают много большую величину ЭДМ. В частности, для современных суперсимметричных моделей характерны значения ЭДМ электрона лишь на один-два порядка ниже современного экспериментального ограничения. Поэтому новые эксперименты по поиску ЭДМ электрона представляют огромный интерес.

4. Поиск P,T-нечетных моментов ядер P,T-нечетные ядерные силы приводят к появлению у ядра таких моментов. Соответствующие эксперименты сравнимы по значимости с экспериментами по поиску ЭДМ нейтрона.

Данная работа посвящена теоретическим аспектам первых трех из перечисленных выше направлений атомных исследований.

Задачи встающие перед атомной теорией в связи с этим таковы:

1. Довести точность атомных расчетов независящих от спина ядра P-нечетных эффектов до уровня одного процента. Такова точность современных экспериментов по наблюдению эффектов несохранения четности в тяжелых атомах и важно, чтобы при извлечении информации о фундаментальных взаимодействиях из этих экспериментов не происходило существенной потери точности.

2. Провести надежные расчеты зависящих от спина ядра P-нечетных амплитуд для готовящихся экспериментов. Это позволит получить новую информацию о несохраняющих четность ядерных силах.

3. Разрешить противоречие между расчетами коэффициентов усиления ЭДМ электрона в молекулах. Давно известно, что тяжелые двухатомные молекулы являются мощными усилителями внешнего электрического поля, но расчеты соответствующих коэффициентов усиления приводят к несколько разным результатам. Это не позволяет получить достоверную информацию об ЭДМ электрона из молекулярных экспериментов.

Проблемы. Существующие в атомной теории методы не позволяют решить поставленные выше задачи. Дело в том, что

- Точность одночастичных расчетов недостаточна (она составляет обычно лишь $\sim 20 \div 30\%$). Современные методы учета корреляций имеют ограниченную область применимости и не могут гарантировать высокой точности для тяжелых атомов и молекул.

- Проверка стандартной модели на уровне радиационных поправок требует учета КЭД эффектов в атомных расчетах и вычисления слабых радиационных поправок для связанного электрона.

Таким образом необходимо разработать новые более универсальные и надежные методы учета электронных корреляций и КЭД поправок для многоэлектронных атомов.

Учет электронных корреляций с использованием P,Q-разложения и эффективных операторов.

Для описания низкоэнергетических свойств атома предлагается разбиение электронного пространства на две части P и Q. Подпространство P является валентным и соответствует приближению замороженного остова. Подпространство Q является дополнительным и соответствует всевозможным остовным возбуждениям:

$$P: \qquad a^\dagger_{i_{N_\mathrm{v}}} \dots a^\dagger_{i_1} |\Psi_\mathrm{core}\rangle,$$

$$Q: \qquad \begin{cases} b^\dagger_{n_1} a^\dagger_{i_{N_\mathrm{v}}} \dots a^\dagger_{i_1} |\Psi_\mathrm{core}\rangle, \\ b^\dagger_{n_2} b^\dagger_{n_1} a^\dagger_{i_{N_\mathrm{v}}} \dots a^\dagger_{i_1} |\Psi_\mathrm{core}\rangle, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \end{cases}$$

В подпространстве P остовные электроны можно исключить, усреднив оператор PHP по однодетерминантной функции остова:

$$PHP = E_\mathrm{core} + \sum_{i>N_\mathrm{core}} h_i + \sum_{j>i>N_\mathrm{core}} \frac{1}{r_{ij}},$$

Запишем полный гамильтониан H и полную волновую функцию в виде:

$$\begin{aligned} H &= PHP + PHQ + QHP + QHQ, \\ \Psi &= P\Psi + Q\Psi \equiv \Phi + \chi. \end{aligned}$$

Можно определить функцию Грина в подпространстве Q:

$$R_Q(E) = (E - QHQ)^{-1}$$

и исключить χ из уравнения Шредингера:

$$\begin{aligned} &H_\mathrm{eff}(E)\Phi = E\Phi \\ &H_\mathrm{eff}(E) \equiv PHP + \Sigma(E) \\ &\Sigma(E) = (PHQ)\ R_Q(E)\ (QHP) \end{aligned}$$

Эти уравнения являются точными. Они позволяют найти атомный спектр с помощью эффективного гамильтониана $H_\mathrm{eff}(E)$ определенного <u>только</u> для подпространства P.

Для вычисления наблюдаемых с помощью функций Φ определим эффективный оператор A_eff так, что

$$a = \langle\Phi|A_\mathrm{eff}|\Phi\rangle$$

Для оператора A_eff справедливо следующее выражение

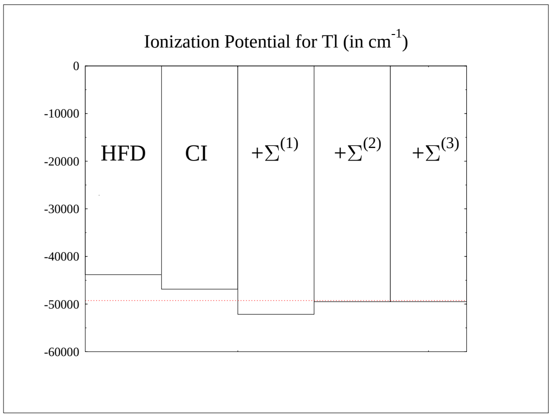
$$\begin{aligned} A_\mathrm{eff} &= PAP && \text{(Дирак-Фок)} \\ &+ PHQ\ R_Q(E)\ QAP && \text{(Приближ. случайной фазы)} \\ &+ PAQ\ R_Q(E)\ QHP && \text{(Приближ. случайной фазы)} \\ &+ PHQ\ R_Q(E) A R_Q(E)\ QHP && \text{(Структурное излучение)} \end{aligned}$$

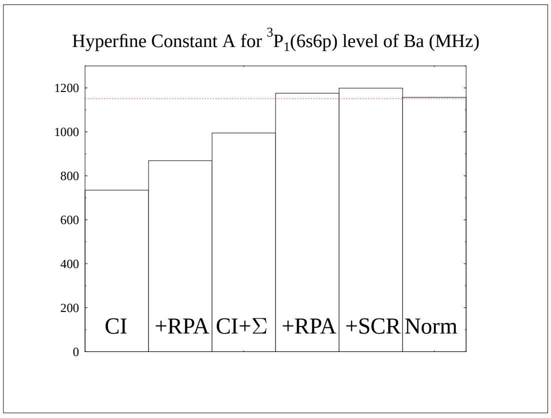
где в скобках указано, каким приближениям примерно соответствует данная часть эффективного оператора. Отметим, что условие нормировки для Φ приближенно имеет вид:

$$\langle\Phi_i|1 - \partial_E\Sigma(E)|\Phi_k\rangle = \delta_{ik}.$$

Примеры расчетов с использованием эффективных операторов. Третья глава диссертации посвящена расчетам тяжелых атомов описанным выше методом эффективных операторов. Приведены результаты вычислений спектров атомов Mg, Ca, Sr, Ba и Yb, имеющих два валентных электрона и атома Pb, имеющего четыре электрона. Кроме этого приведены расчеты констант сверхтонкой структуры, E1-амплитуд и поляризуемостей многих атомов. Все эти результаты сравниваются с экспериментальными данными и с другими расчетами. Приведем здесь лишь два примера:

Рис. 1: Потенциал ионизации таллия и константа сверхтонкой структуры бария в различных приближениях. Горизонтальные прямые соответствуют экспериментальным значениям, а самые правые столбцы — наиболее полным расчетам.





Эти примеры показывают, что точность метода эффективных потенциалов примерно на порядок выше точности обычного метода наложения конфигураций для валентных электронов, которому на рисунках соответствуют столбцы, помеченные «CI». Аналогичная ситуация имеет место и в большинстве других расчетов. Для сравнения, спектр свинца был вычислен также методом связных кластеров, который в последнее время все чаще используется в атомной физике. Предлагаемый здесь метод оказался заметно точнее для всех расчитанных уровней. Следует отметить, что практически все используемые сейчас методы учета электронных корреляций имеют ограниченные области применимости. Поэтому, во многих случаях наши расчеты являются первыми прецизионными расчетами соответствующих атомных свойств.

В целом, по результатам этой главы можно заключить, что метод эффективных операторов является достаточно общим и надежным инструментом для расчета атомов с несколькими валентными электронами. Имеется два основных ограничения его применимости: во-первых, число валентных электронов не должно быть больше трех-четырех; во-вторых, исследуемые уровни энергии атома должны лежать ниже порога возбуждения остова. Оба эти условия выполняются в расчетах, связанных с проверкой фундаментальных симметрий, которым посвящена четвертая глава диссертации.

Четвертая глава диссертации является основной. В ней приведены результаты расчетов эффектов несохранения четности в атомах цезия и таллия и проведено сравнение атомных экспериментов со стандартной моделью. Также расчитаны анапольные P-нечетные амплитуды для иттербия и франция. Наконец, приведены результаты расчетов коэффициентов усиления для электрического дипольного момента электрона в молекулах BaF и YbF.

P-нечетный гамильтониан слабого взаимодействия. Приведем явный вид оператора P-нечетного взаимодействия электрона с ядром:

$$H_P = \frac{G_{\mathrm{F}}}{\sqrt{2}} \left(-\frac{Q_W}{2}\gamma_5 + \frac{\kappa}{I}\,\boldsymbol{\alpha I} \right) \rho(\boldsymbol{r})$$

Здесь $G_{\mathrm{F}} = 2.2225 \cdot 10^{-14}$ а.е — константа Ферми. Отметим, что она $\sim \frac{\alpha}{M_Z^2}$; γ_5, $\boldsymbol{\alpha}$ — матрицы Дирака; $\rho(\boldsymbol{r}) = \frac{3}{4\pi r_N^3}\Theta(r_N - r)$, — плотность распределения нейтронов в ядре, а $\boldsymbol{I}$ — ядерный спин.

Слабый заряд ядра Q_W определяет величину $A \times V$ взаимодействия электронов с ядром. Его численное значение такого:

$$\begin{aligned} Q_W(N,Z) &= -N + (1 - \sin\theta_W)Z + O(\alpha) \\ &= -0.9857N + 0.0675Z \\ &\quad -0.0144ZS + (0.0108Z - 0.0077N)T \\ &\quad +O\left(\frac{M_Z^2}{M_{Z'}^2}\right) \end{aligned}$$

где в первых двух строчках даны предсказания стандартной модели в низшем порядке и с учетом радиационных поправок, а две последние строчки соответствуют «нестандартным» радиационным поправкам (S и T — параметры Пескина-Такеучи) и поправке от Z'-бозона. Отметим, что в экспериментах при энергии $E = M_Z c^2$ поправки от Z' имеют величину

$$O\left(\Gamma_Z^2/(M_{Z'} - M_Z)^2 c^4\right),$$

что примерно на два порядка меньше, чем в атомной физике. Именно поэтому атомные эксперименты могут конкурировать с экспериментами на ускорителях, несмотря на то, что точность измерения P-нечетных эффектов в атомах существенно ниже.

Анапольный момент ядра. В стандартной модели константа κ P-нечетного гамильтониана численно мала:

$$\kappa \;\approx\; 0.6(1 - 4\sin\theta_W) \approx 0.05$$

Наличие у ядра анапольного момента приводит к появлению добавочного члена, который для тяжелых ядер доминирует:

$$\kappa \;\Rightarrow\; \kappa + (-1)^{I+1/2-l}\frac{(I+\frac{1}{2})}{(I+1)}\kappa_a$$

Аналитическая оценка для κ_a получена Фламбаумом, Хрипловичем и Сушковым:

$$\kappa_a \approx \frac{9}{10} g \frac{\alpha\mu}{m_p r_N} A^{2/3}$$

Ядерные расчеты анапольных моментов для Cs, Tl и Bi дают разные значения κ_a в интервале 0.2–0.5. Эксперимент на Cs дал (Wood et al):

$$\kappa_a(\mathrm{Cs}) = 0.37(6)$$

Эксперимент на цезии (Боулдер, США, 1997, 1999). Приведенное выше экспериментальное значение анапольной константы получено из эксперимента на цезии, в котором наблюдалась интерференция P-нечетной и штарковской амплитуд перехода $6s \to 7s$:

$$\begin{aligned} A(6s \to 7s) &= M1 + \mathrm{i}\beta E + E1_{\mathrm{PNC}} \\ \frac{\mathrm{Im} E1_{\mathrm{PNC}}}{\beta} &= -1.5939(56)\, \frac{\mathrm{mV}}{\mathrm{cm}} \\ \frac{\mathrm{Im} E1_{\mathrm{SD}}}{\beta} &= 0.077(11)\, \frac{\mathrm{mV}}{\mathrm{cm}} \end{aligned}$$

где $E1_{\mathrm{PNC}}$ и $E1_{\mathrm{SD}}$ — спин-независимая и спин-зависимая P-нечетные амплитуды. Наиболее точное измерение штарковской амплитуды β дало:

$$\beta = 27.02(8) \text{ а.е.}$$

откуда следует что:

$$\begin{aligned} E1_{\mathrm{PNC}}(6s_{1/2} \to 7s_{1/2}) &= -\mathrm{i} \cdot 0.8375(33) \cdot 10^{-11} \text{ а.е.} \\ E1_{\mathrm{SD}}(6s_{1/2} \to 7s_{1/2}) &= \mathrm{i} \cdot 0.040(6) \cdot 10^{-11} \text{ а.е.} \end{aligned}$$

Эксперименты на таллий (Сиэтл, Оксфорд, 1995). Наиболее точные результаты в таллии получены на переходе:

$$A(6p_{1/2} \to 6p_{3/2}) = M1 + E1_{\mathrm{PNC}}$$
$$\mathcal{R} \equiv \mathrm{Im}\left(\frac{E1_{\mathrm{PNC}}}{M1}\right),$$

где $\mathcal{R}$ определяет степень несохранения четности в переходе. Два наиболее точных измерения этой величины дали:

$$\mathcal{R} = 10^{-8} \cdot \begin{cases} -14.68\,(17), & \text{Vetter } et\ al \text{ (1995)} \\ -15.36(45) & \text{Edwards } et\ al \text{ (1995)} \end{cases}$$

Здесь величина $M1$-амплитуды из эксперимента известна плохо, но достаточно точно вычисляется. Поэтому, сравнение теории с экспериментом делается для величины $\mathcal{R}$.

Расчет спин-независящих P-нечетных амплитуд в цезии и таллии. Эти расчеты являются наиболее сложными во всей работе, поскольку требуют максимальной достижимой точности. Поэтому в них полностью использованы все имеющиеся в настоящее время возможности метода эффективных операторов, включая последовательный учет магнитной части брейтовского взаимодействия, оптимизацию начального приближения и частичный учет высших порядков многочастичной теории возмущений.

Для оценки точности расчета P-нечетных амплитуд проведены расчеты большого количества различных наблюдаемых. Это позволило оценить точность атомного расчета: для цезия она составила 0.5%, а для таллия — 2%. Дополнительная ошибка связана с неучтенными радиационными поправками к слабой амплитуде и с недостаточно точно известными нейтронными радиусами ядер. Для цезия эти поправки могут достигать 0.5%, а для таллия — примерно 1%. С учетом этих неопределенностей измеренные P-нечетные амплитуды соответствуют следующим слабым зарядам цезия и таллия:

$$\begin{aligned} Q_W(^{133}\mathrm{Cs}) &= -72.5(3)_{\mathrm{expt}}(7)_{\mathrm{theor}}\,, \\ Q_W(^{205}\mathrm{Tl}) &= -114\,(1)_{\mathrm{expt}}(3)_{\mathrm{theor}}\,. \end{aligned}$$

Эти экспериментальные значения надо сравнить с предсказанием стандартной модели:

$$\begin{gathered} Q_W^{\mathrm{SM}}(^{133}\mathrm{Cs}) = -73.09(3)\,, \\ Q_W^{\mathrm{SM}}(^{205}\mathrm{Tl}) = -116.7(1)\,. \end{gathered}$$

Видно, что оба центральных экспериментальных значения меньше по абсолютной величине, чем дает стандартная модель, но значимого расхождения со стандартной моделью нет ни в том, ни в другом случае. Для обоих атомов учет брейтовского взаимодействия, которое не учитывалось в предыдущих расчетах, приближает атомное значение к стандартной модели. Отметим, что аналогичные выводы содержатся и в последних работах других групп, занимающихся такими расчетами. Таким образом, утверждение Бенета и Ваймана 1999 года о том, что цезиевый эксперимент находится в противоречии со стандартной моделью, в настоящее время не находит подтверждения.

P-нечетные амплитуды, зависящие от спина ядра. В представляемой работе проведены расчеты зависящих от спина ядра P-нечетных амплитуд для иттербия и франция. Основной вклад в эти амплитуды дает анапольный момент ядра. Измерение анапольного момента иттербия и франция позволит существенно расширить наши знания о слабых взаимодействиях адронов. Для обоих атомов в настоящее время идет подготовка экспериментов. Проведенные нами расчеты подтвердили, что P-нечетная амплитуда для иттербия примерно на два порядка, а для франция — на один порядок больше, чем соответствующая амплитуда в цезии, где анапольный момент был впервые обнаружен. Существенно, что нечетные изотопы иттербия имеют неспаренный нейтрон, тогда как в цезии и франции неспаренным является протон.

Франций. Расчет зависящей от спина ядра P-нечетной амплитуды $E1_{\mathrm{SD}}$ сверхтонкого перехода в основном состоянии $7s$ для нечетных изотопов франция ($I = \frac{9}{2}$) дал следующий результат:

$$\frac{E1_{\mathrm{SD}}}{\mathrm{i}\cdot 10^{-10}\kappa} = -0.418_{(\text{ДФ})} - 0.058_{(\mathrm{RPA})} - 0.033_{(\text{МТВ})} + 0.018_{(\text{остов})} = -0.491,$$

где выделены вклады исходного приближения Дирака-Фока, поправки метода случайной фазы, другие МТВ поправки и вклад суммирования по остовным состояниям. Видно, что МТВ поправки для этой амплитуды не велики. Поэтому можно ожидать, что точность расчета не хуже нескольких процентов, что вполне достаточно для нужд эксперимента. Для сравнения с расчетами аналогичных амплитуд в Cs и K удобно переписать эту амплитуду через приведенный матричный элемент для электронного оператора $\boldsymbol{\sigma} = 2\boldsymbol{s}$:

$$E1_{\mathrm{SD}} = \mathrm{i}D\kappa\langle F_f||\sigma||F_i\rangle.$$

В этом выражении основная зависимость от ядерного спина выделена, и именно параметр D имеет смысл сравнивать для разных щелочных атомов:

$$\begin{array}{cccc} & {}^{39,41}\mathrm{K} & {}^{133}\mathrm{Cs} & {}^{211}\mathrm{Fr} \\ \frac{D}{10^{-12}} = & -0.07 & -1.4 & -11.0, \end{array}$$

Иттербий. В этом случае речь идет о двух оптических переходах, для которых имеется существенное усиление P-нечетных амплитуд за счет близости уровней противоположной четности. Результаты расчета приведены в таблице.

Таблица 1: Зависящие от спина ядра P-нечетные амплитуды $E1_{\mathrm{SD}}$ в единицах ($\kappa\ ea_0\ \times\ 10^{-11}$) для нечетных изотопов иттербия (A — число нуклонов в ядре).

Изотоп и спин	Переход	$F' \to F$	$E1_{\mathrm{SD}}$
$A = 171$ $I = 1/2$	${}^1S_0 \to {}^3D_1$	$1/2 \to 1/2$	-2.75
	”	$1/2 \to 3/2$	-1.94
	${}^1S_0 \to {}^3D_2$	$1/2 \to 3/2$	9.13
$A = 173$ $I = 5/2$	${}^1S_0 \to {}^3D_1$	$5/2 \to 3/2$	2.82
	”	$5/2 \to 5/2$	-0.99
	”	$5/2 \to 7/2$	-2.85
	${}^1S_0 \to {}^3D_2$	$5/2 \to 3/2$	3.89
	”	$5/2 \to 5/2$	-6.79
	”	$5/2 \to 7/2$	-8.05

Важно отметить, что анапольная амплитуда для перехода в состояние ${}^3D_2$ заметно больше, тогда как соответствующая спин-независимая P-нечетная амплитуда обращается в нуль.

Усиление ЭДМ электрона в двухатомных молекулах Оператор взаимодействия ЭДМ электрона d_e с внутри-молекулярным полем $\boldsymbol{\nabla} U$:

$$H_d = d_e(\gamma_0 - 1)\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\nabla} U.$$

Для описания спиновых и вращательных степеней свободы удобно использовать спин-вращательный гамильтониан $H_{\rm sr}$. Нас интересуют молекулы с одним неспаренным электроном и основным состоянием $^2\Sigma_{\frac{1}{2}}$. Для такого случая оператор $H_{\rm sr}$ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} H_{\rm sr} &= B\boldsymbol{N}^2 + \gamma\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{N} + \boldsymbol{S}\hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{I} - D_e\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E} \\ &+ W_d\, d_e\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}. \end{aligned}$$

где $\boldsymbol{N}$ — вращательный момент молекулы, B — вращательная постоянная, $\boldsymbol{S}$ — электронный спин, γ — константа спинового удвоения, $\hat{\boldsymbol{A}}$ — тензор сверхтоной структуры, а D_e — дипольный момент, направленный по оси молекулы, задаваемой единичным вектором $\boldsymbol{n}$. Задача теории сводится к вычислению параметра W_d.

Таблица 2: Параметры спин-вращательного гамильтониана для молекул ^{137}BaF и ^{171}YbF. Для тензора СТС приведены изотропная и дипольная константы: $A = (A_{z,z} + 2A_{x,x})/3$ и $A_d = (A_{z,z} - A_{x,x})/3$. Приведены результаты расчетов в приближениях Дирака-Фока (ДФ) и наложения конфигураций (НК) с обычными и эффективными операторами (ЭО).

	A (МГц)	$A_{\rm d}$ (МГц)	W_d $(10^{25}\ \frac{\text{Гц}}{\text{е см}})$	W_a (кГц)
	Молекула ^{137}BaF			
Экспер.	2326	25	-0.41	240
/полуэмпир.	2418	17	-0.35	210
ДФ	1457	11	-0.230	111
НК	1466	11	-0.224	107
ДФ/ЭО	2212	26	-0.375	181
НК/ЭО	2224	24	-0.364	175
	Молекула ^{171}YbF			
Экспер.	7617	102		
Полуэмпир.			-1.26	
ДФ	4932	59	-0.91	484
НК	4854	60	-0.91	486
НК/ЭО	7842	79	-1.206	634
неогр. ДФ			-1.203	

Из таблицы видно, что использование эффективных операторов позволило существенно улучшить согласие с экспериментом для констант СТС и устранило противоречие с полуэмпирическими расчетами для коэффициента W_d. При этом эффективное поле на валентном электроне на несколько порядков больше, чем в тяжелых атомах.