

И. И. ГОЛЬДМАН

О СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ КВАДРУПОЛЬНЫХ МОМЕНТОВ ЯДЕР

(Представлено академиком А. И. Алихановым 18 XI 1952)

Обычно в теории сверхтонкой структуры учитывается взаимодействие с ядерными моментами одного электрона, совершающего оптический переход. При этом предполагается, что такого рода расчет, как и во многих других вопросах спектроскопии, приводит к погрешностям, не превышающим нескольких процентов. Оказывается, однако, что эффект экранирования, т. е. деформации электронов внутренних оболочек оптическим электроном, не столь мал, как это по существу без всяких оснований предполагается, а достигает нескольких десятков процентов.

Для того чтобы рассчитать этот эффект, надо найти потенциал V неоднородного поля, создаваемого оптическим электроном в области, где расположено ядро, принимая во внимание деформацию внутренних оболочек этим электроном. Изменение энергии тогда будет определяться величиной $Q \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}$. Для заполненных оболочек атома воспользуемся приближением Томаса — Ферми, а распределение плотности валентного электрона будем предполагать известным (например, из расчетов по методу Харти — Фока). Сферически-симметричную часть потенциала можно не рассматривать, так как она не приводит к взаимодействию с квадрупольным моментом ядра. Уравнение для потенциала Φ при наличии валентного электрона в приближении Томаса — Ферми имеет вид *

$$\Delta\Phi = \frac{8V\sqrt{2}}{3\pi} \Phi^{3/2} - 4\pi\rho, \quad (1)$$

где ρ — плотность заряда валентного электрона.

Считая, что изменение потенциала, вызванное валентным электроном, мало, полагаем

$$\Phi = \Phi_0 + V,$$

где Φ_0 — невозмущенный потенциал Томаса — Ферми, а V — малая добавка. Тогда в линейном приближении по V получаем из (1) уравнение

$$\Delta V = \frac{4V\sqrt{2}}{\pi} \Phi_0^{3/2} V - 4\pi\rho. \quad (2)$$

* Мы воспользуемся атомными единицами $e = m = \hbar = 1$.

Для квадрупольного взаимодействия существенна лишь та часть V , угловая зависимость которой дается полиномом Лежандра $P_2(\cos \vartheta)$, где в качестве полярной оси взято направление ядерного спина. Поэтому, как видно из уравнения (2), существенная для нас часть ρ должна обладать той же угловой зависимостью. Соответствующий член в разложении ρ по сферическим функциям с точностью до постоянного множителя имеет вид $R_{nl}^2(r) P_2(\cos \vartheta)$, где $R_{nl}(r)$ — радиальная волновая функция.

Вместо V и r введем новые переменные v и x , связанные со старыми соотношениями

$$V = \frac{v}{r} P_2(\cos \vartheta), \quad r = bZ^{-1/2} x, \quad b = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{1/2}.$$

Уравнение (2) в новых переменных запишется следующим образом:

$$\frac{d^2 v}{dx^2} = \left(\frac{6}{x^2} + \frac{3}{2} \varphi^{1/2} \right) v - R_{nl}^2 x, \quad (3)$$

где $\varphi(x) = \frac{b}{Z^{1/2}} \Phi_0$ — универсальная функция и для R_{nl} выбрана новая нормировка (как мы увидим, нормировка R_{nl} не входит в окончательный результат).

Решение последнего уравнения, не имеющее особенностей при $x = 0$ и $x = \infty$, имеет вид

$$v = v_1 \int_0^x v_2 R_{nl}^2 x dx + v_2 \int_x^\infty v_1 R_{nl}^2 x dx, \quad (4)$$

где v_1 и v_2 — решения соответствующего однородного уравнения, выбранные так, что их вронскиан равен 1.

Нам необходимо найти потенциал в области ядра, т. е. при малых x . Анализ уравнения (3) с учетом поведения φ приводит к следующим асимптотическим выражениям при $x = 0$

$$v_1 \simeq \frac{1}{x^2}, \quad v_2 \simeq \frac{x^3}{5}. \quad (5)$$

Поскольку R_{nl} при малых x пропорционально x^l и $l \geq 1$, в выражении (4) при $x \rightarrow 0$ существенен лишь второй член, который запишется в виде

$$v x^3 \simeq \int_0^\infty \frac{F(x)}{x^3} R_{nl}^2 x^2 dx,$$

где $F(x) = x^2 v_1(x)$.

Если бы экранирование не учитывалось (член $\frac{3}{2} \varphi^{1/2}$ в уравнении (1) был бы опущен), мы имели бы $F = 1$, и потенциал в области ядра был бы равен

$$v \simeq x^3 \int_0^\infty \frac{1}{x^3} R_{nl}^2 x^2 dx.$$

Как и следовало ожидать, он выражался бы через среднее значение $\frac{1}{x^3}$.

Учет деформации заполненных оболочек показывает, что вместо $\frac{1}{x^2}$ надо вычислять среднее значение $\frac{F(x)}{x^2}$.

Значения фактора экранирования $F(x)$, полученные в результате численного расчета, приведены в табл. 1.

Фактор экранирования

x	0	0,2	0,4	0,8	1,2	1,6
$F(x)$	1	0,980	0,944	0,864	0,785	0,715
x	2	3	4	6	8	10
$F(x)$	0,650	0,510	0,420	0,298	0,216	0,172

Пересчет величины квадрупольного момента Q' , полученного без учета экранирования, можно произвести, если умножить Q' на множитель

$$k = \int_0^{\infty} R_{nl}^2 \frac{dx}{x} \bigg/ \int_0^{\infty} R_{nl}^2 F(x) \frac{dx}{x} \quad (Q = kQ').$$

Этот множитель больше единицы, поэтому истинные квадрупольные моменты ядер больше, чем принятые в литературе.

С увеличением орбитального момента валентного электрона поправка к квадрупольному моменту увеличивается, поскольку центробежный потенциал отдаляет валентный электрон от ядра, а $F(x)$ уменьшается с увеличением x .

Для p -электронов ($l=1$) поправка составляет от 5 до 15%; для f -электронов ($l=3$) поправка достигает 30—40%. Расчет величины квадрупольного момента меди был произведен при помощи волновой функции $3d$ -электрона, взятой из работы ⁽¹⁾; этот расчет дал поправку (увеличение) квадрупольного момента на 24%.

Экспериментальная проверка этих выводов станет возможной после того, как будут исследованы расщепления в различных спектральных линиях одного и того же элемента.

В заключение я хочу поблагодарить проф. А. Б. Мигдала, под руководством которого была выполнена настоящая работа, и акад. Л. Д. Ландау за ценные указания и интересные обсуждения работы.

Физический институт
Академии наук Армянской ССР

Поступило
9 X 1952

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ D. R. Hartree, W. Hartree, Proc. Roy. Soc., A 157, 490 (1936).