

ПРЕЦИЗИОННЫЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГИЙ ТЯЖЕЛЫХ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ ИОНОВ

М. Н. Дрикер, Е. П. Иванова и Л. Н. Иванов

Рассчитаны энергии $1s$, $2s$ и $2p$ состояний для водородоподобных ионов с $z=30 \div 170$. Расчет проводится на основе уравнения Дирака с учетом радиационных эффектов и конечности ядра. С учетом конечности ядра рассчитаны константы сверхтонкого расщепления, приводятся производные по объему ядра для всех характеристик S -состояний.

Введение

В теории атома представляется актуальной проблема учета релятивистских электродинамических поправок, а также поправок, связанных с размером и формой ядра, со сверхтонким взаимодействием электронов с ядром. Последовательный теоретический расчет этих величин интересен не только с точки зрения возможности экспериментальной проверки фундаментальных положений теории. Тонкие и сверхтонкие эффекты влияют на энергетическую структуру тяжелых атомов, что может радикально влиять на кинетику образования и распада возбужденных состояний, на поведение атомов в полях. Так, известно, что главные каналы распада состояний с вакансией во внутренней оболочке — распады Кестера—Кронига. Для того чтобы определить энергетическую возможность распада по тому или иному каналу Кестера—Кронига, часто необходимо провести весьма аккуратный расчет энергий уровней с учетом перечисленных выше эффектов. Ситуация со сверхтяжелым ядром встречается в задаче столкновения двух тяжелых ядер, например ядер урана [1]. Здесь рассматриваются только одноэлектронные водородоподобные ионы с $z=30 \div 170$. Все вычислительные приемы естественно включаются в схему расчета многоэлектронной системы.

В [1] решалось одноэлектронное уравнение Дирака для электрона, движущегося в поле равномерно заряженного шара (ядра) с зарядом z . Результаты использовались для определения $z_{кр}$ — критического заряда ядра, в поле которого водородоподобный ион еще стабилен по отношению к процессу рождения электрон-позитронной пары. В [2] мы учли поляризацию вакуума кулоновым полем точечного ядра. С этой целью потенциал Ойленга—Сербера был введен в уравнение Дирака. Потенциал Ойленга—Сербера полностью учитывает первый член разложения в ряд по α . Вычислительная процедура не использует разложение по αz и пригодна для ядра с любым зарядом. В настоящей работе при расчете поляризационного сдвига учтен конечный размер ядра: в соответствующее уравнение Дирака введен дополнительный потенциал, связанный с поляризацией вакуума равномерно заряженным шаром. Прежде наиболее сложным считался расчет именно поляризационной поправки. Все известные нам работы по этому вопросу используют разложение по αz , рассматривается только точечное ядро. В [2] отмечалось, что при $z \approx 100$ все члены этого разложения одного порядка, причем в конечном результате происходит их заметная компенсация. Применяемый в [2] и здесь прием решает проблему расчета рассматриваемой величины.

Мы считаем, что в настоящее время наиболее трудоемким является расчет сдвига Лэмба. Здесь пока мы используем результаты расчета для точечного ядра с $z=10 \div 110$ [3]. Для состояния $2p_{3/2}$ известны только результаты, полу-

ченные разложением в ряд по az . Их точность неудовлетворительна для решаемой задачи.

Переходим к описанию схемы учета различных эффектов.

Конечность ядра

Для учета конечности ядра в одноэлектронное уравнение Дирака подставляется потенциал

$$V(r/R) = -\frac{3}{R^3} \begin{cases} R^2/2 - r^2/6, & r < R, \\ R^3/3r, & r > R \end{cases} \quad (1)$$

(кулоновы единицы). Для размера ядра принята формула

$$R = 1.60 \cdot 10^{-13} z^{1/3} \text{ см.} \quad (2)$$

В работе приведены также производные всех рассмотренных величин по объему ядра для S -состояний.

Поляризационный потенциал $U(r)$

$$U(r) = \begin{cases} U_1(r), & r < R, \\ U_2(r), & r > R, \end{cases} \quad (3)$$

где U_2 — введенный в [2] поляризационный потенциал точечного ядра

$$U_2(r) = -0.154854 \int_r^\infty \frac{dt}{t} e^{-2t/az} + 0.00021705 e^{-2.540535r/az} \{1 + 0.338706 (r/az)^2\}/r. \quad (4)$$

Очевидно, что

$$U_2(r) \sim \frac{\ln r}{r} \quad \text{при } r \rightarrow 0. \quad (5)$$

Эта сингулярность поляризационного потенциала привела бы при больших z к тем же осложнениям, что и в задаче о дираковском электроде в кулоновом поле. Трудности устраняются, если во внутриядерной области заменить $U_2(r)$ на

$$U_1(r) = U_2(r) \frac{r}{\ln r} \int \frac{dr'}{r'} \frac{\ln |r - r'|}{|r - r'|} \rho(r'), \quad (6)$$

где ρ — плотность распределения электрического заряда в ядре. Переход от U_2 к U_1 учитывает конечность ядра в главном асимптотическом (при $r \rightarrow 0$) члене $U_2(r)$. Для принятой здесь модели ядра интегрирование в (6) проводится элементарно. Окончательный ответ

$$U_1(r) = U_2(r) \{[(1.5 \ln R - 0.75) R^2 + 0.75r^2] / \ln r - 0.5r^2\} / R^3. \quad (7)$$

Константы сверхтонкого взаимодействия

Ниже приведены выражения для энергии квадрупольного W_Q и магнитно-дипольного W_μ взаимодействия электрона с ядром в первом порядке теории возмущений. Даже при $z = 170$ вклады этих поправок не достигают 1% полной энергии связи K или L электрона, так что применение теории возмущений все еще оправдано. Эти поправки зависят от квадрупольного момента Q и фактора Ланде g_I ядра, полного момента системы F , спина ядра I , полного момента электрона j , моментного квантового числа x и атомных радиальных интегралов $(RA)_{-2}$, $(RA)_{-3}$. Подразумевается, что Q задано в барнах (10^{-24} см^2), а радиальные интегралы вычислены в кулоновых единицах ($\approx 3.571 \cdot 10^{20} z^2 \text{ м}^{-2}$, $\approx 6.174 \cdot 10^{30} z^3 \text{ м}^{-3}$). Тогда (8) и (9) дают поправки в см^{-1} . Для этих поправок имеем [4]

$$W_Q = \Delta + BC(C + 1) \quad (8)$$

$$W_{\mu} = \frac{1}{2} AC, \quad C = F(F+1) - J(J+1) - I(I-1), \quad (9)$$

$$A \approx 3.48902 \frac{z^2 \kappa}{4\kappa^2 - 1} (RA)_{-2} g_I, \quad (10)$$

$$B \approx \frac{0.005878 z^3}{4\kappa^2 - 1} (RA)_{-3} \frac{Q [\text{барн}]}{I(I-1)}, \quad (11)$$

$$\Delta = -\frac{4}{3} (4\kappa^2 - 1) \frac{I+1}{I(I-1)(2I-1)} B. \quad (12)$$

Релятивистские радиальные интегралы в (10), (11) получаются из соответствующих выражений в [4] обобщением на случай конечного ядра

$$(RA)_{-2} = \int dr r^{2|x|} f g \begin{cases} (3R - 2r)/R^3, & r < R, \\ 1/r^2, & r > R. \end{cases} \quad (13)$$

$$(RA)_{-3} = \int dr r^{2|x|} (f^2 + g^2) \begin{cases} r^2 + [1 + 5 \ln(R/r)]/R^5, & r > R, \\ 1/r^3, & r < R. \end{cases} \quad (14)$$

Верхние строчки в (13) и (14) учитывают то, что квадрупольный и магнитно-дипольный моменты не локализованы, а «размазаны» по всему объему ядра.

Для точечного заряда выражение при $r > R$ нужно было бы продолжить во внутриядерную область. Именно такие выражения приведены в [4]. Большую и малую компоненты радиальной электронной функции мы определяем так, что $fr^{|x|}, gr^{|x|} \sim r^{\gamma}$ при $r \rightarrow 0$ ($\gamma = \sqrt{\kappa^2 - (\alpha z)^2}$) в кулоновском поле. Для точечного ядра интегралы $(RA)_2$ и $(RA)_{-3}$ расходятся соответственно при $\kappa^2 - (\alpha z)^2 \leq 1/4$ и $\kappa^2 - (\alpha z)^2 \leq 1$.

Например, $(RA)_{-2}$ расходятся для всех $s(1/2)$ ($\kappa = -1$) и $p(1/2)$ ($\kappa = 1$) состояний при $z > 119$. Интеграл $(RA)_{-3}$ всегда расходится для $p(1/2)$ -состояний. Таким образом, учет конечности ядра принципиально необходим в последовательно релятивистском расчете сверхтонкой структуры атомных уровней.

Всю процедуру расчета энергий, волновых функций и констант сверхтонкого взаимодействия мы, как обычно, свели к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений с известными граничными условиями. Эта система включает уравнение Дирака для радиальных функций f и g , уравнения для поляризационного потенциала и уравнения для радиальных интегралов.

Наиболее слабыми моментами всей схемы мы считаем: 1) расчет сдвига Лэмба, нужно продолжить прямой расчет в область $z > 110$ и учесть конечность ядра; 2) расчет констант сверхтонкого расщепления, можно было бы ввести более реалистическую модель ядра с использованием, например, экспериментальных форм-факторов.

В атомах с заполненными электронными оболочками энергии внутренних K и Z электронов сдвигаются в результате экранирования потенциала ядра электронной оболочкой. В [1] этот сдвиг оценивается в приближении Томаса—Ферми. Величина сдвига определяется в основном видом полного атомного потенциала в области малых r . В приближении Томаса—Ферми потенциал при $r \rightarrow 0$ дается формулой (кулоновы единицы)

$$\varphi = \frac{1}{r} + 1.80z^{1/3}. \quad (15)$$

Дополнительный экранировочный потенциал при $r \rightarrow 0$ имеет вид ступени. При $z=70$ высота ступени

$$\delta\varphi \approx 1.14 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}. \quad (16)$$

Более аккуратные расчеты [5] дают

$$\delta\varphi \approx 1.10 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}, \quad (17)$$

т. е. приближение Томаса—Ферми вполне применимо для оценки качественного влияния оболочки на свойства внутренних электронов. Так, в [4] сделан верный вывод о том, что электронная оболочка практически не меняет значение $z_{\text{кр}}$.

Все результаты получены для ядра бесконечной массы. Пересчет результатов на случай ядра конечной массы тривиален, и мы его здесь не проводим.

Численные результаты

В табл. 1 приведены энергии $1s$ - и $2p$ -состояний водородоподобных ионов с $z=30\div 170$. Учен конечный размер ядра и поляризация вакуума ядром. В табл. 2 даны производные энергии S -состояний по объему ядра. Эти результаты должны быть дополнены сдвигом Лэмба. Последний мы находим по формулам

$$\left. \begin{aligned} \Delta LS (1s1/2) &= 0.02715z^4 (0.0004300z^2 - 0.07733z + 4.965) \text{ см}^{-1}, \\ \Delta LS (2s1/2) &= 0.003394z^4 (0.0009650z^2 - 0.1615z + 8.895) \text{ см}^{-1}, \\ \Delta LS (2p1/2) &= 0.003394z^4 (0.000562z^2 - 0.0908z + 3.915) \text{ см}^{-1}. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Эти формулы аппроксимируют результаты аккуратного численного расчета [3] для точечного ядра. Кривые (18) проведены через точки $z=90, 100, 110$.

Поправка на размеры ядра $\Delta E(v)$ и сдвиг Лэмба уменьшают энергию связи электрона, поляризация вакуума $\Delta E(U)$ увеличивает. При $z > 50$

$$|\Delta E(v)| > |\Delta LS| > |\Delta E(U)|. \quad (19)$$

Учет конечности ядра обеспечивает конечность и действительность энергии связи электрона в любом состоянии при любом z (мы не рассматриваем здесь мнимую часть энергии, связанную с возможностью радиационного распада

Таблица 1
Энергии электрона в водородопроводном ионе E_{nlf} и радиусы ядра R .

$-E \cdot 10^3, \text{ см}^{-1}$					$R \cdot 10^{12}, \text{ см}$
z	$1s1/2$	$2s1/2$	$2p1/2$	$2p3/2$	
30	99981.00	25070.98	25070.43	24765.44	0.498
50	284165.5	71661.25	71657.79	69166.62	0.590
70	578322.5	147204.3	147200.5	136696.0	0.660
90	1012928	261565.1	261670.7	228557.2	0.718
110	1654999	437272.3	438920.7	346527.7	0.767
130	2677466	735480.8	758636.0	493152.5	0.811
150	4585245	1323205	1660826	672090.1	0.851
160	6205313	1794466	2828098	775260.9	0.869
165	7252488	2074594	3710100	830636.0	0.878
170	8474363	2380036	4809001	888708.7	0.887

Примечание. Учтена конечность размера ядра и поляризация вакуума. Сдвиг Лэмба и сверхтонкие поправки рассчитываются отдельно по формулам (13), (8), (9). Масса ядра считается бесконечной.

Таблица 2

Производные энергии электрона по объему ядра dE/dv ,
и производная константы сверхтонкого магнитно-дипольного
взаимодействия da/dv

$10^{-40} dE [\text{ см}^{-1}]/dv [\text{ см}^3]$			$-10^{-40} da [\text{ см}^{-1}]/dv [\text{ см}^{-3}]$	
z	$1s1/2$	$2s1/2$	$1s1/2$	$2s1/2$
30	0.11	0.01	0.0001	0.00001
50	1.10	0.16	0.0009	0.0001
70	6.94	1.10	0.0055	0.0009
90	38.2	7.10	0.030	0.0056
110	213.5	48.8	0.18	0.041
130	1291.6	368.0	1.18	0.34
150	7832.7	2338.8	7.53	2.07
160	17264	4518.5	15.71	3.34
170	33030	7076.6	—	4.07

возбужденных состояний). Атом становится неустойчивым по отношению к образованию электрон-позитронной пары при

$$|E_{1s}| \geq 2m_e c^2 \approx 8.24 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-1}. \quad (20)$$

Как показывает расчет, это происходит при $z \geq 170$. Учет сдвига Лэмба не меняет этого результата. Так, $\Delta L S (1s | z=170) \approx 9.6 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$.

В табл. 3 приведены величины

$$a = 3.489z^2 (RA)_{-2} = A (4\kappa^2 - 1) / \kappa g_I, \quad b = 0.00588z^3 (RA)_{-3} = \quad (21)$$

$$= BI (2I - 1) (4\kappa^2 - 1) / Q [\text{барн}]. \quad (21)$$

Таблица 3

Константы сверхтонкого расщепления a и b , 10^{-3}

z	a				b	
	$1s1/2$	$2s1/2$	$2p1/2$	$2p3/2$	$2p1/2$	$2p3/2$
30	0.24	0.032	0.011	0.002	0.004	—
50	1.29	0.176	0.059	0.009	0.042	0.002
70	4.42	0.662	0.221	0.026	0.314	0.006
90	13.2	2.27	0.797	0.059	2.26	0.015
110	40.5	8.39	3.48	0.116	19.0	0.032
130	141	36.2	24.6	0.210	229	0.064
150	539	144	277	0.365	3652	0.124
160	983	227	738	0.476	10762	0.175
170	—	296	1422	0.622	22247	0.250

В табл. 2 даны производные величин a по объему ядра. Все величины a и b , кроме $b (p 1/2)$, можно рассчитать при $z < 90$ по данным из [4], где в конечные формулы введен коэффициент, эффективно учитывающий размер ядра. Наши результаты и результаты из [4] совпадают с точностью 5% при $z < 50$. С ростом z расхождение увеличивается. Так, величина $a (1s | z=90)$ в [4] завышена на 14%.

Литература

- [1] М. С. Маринов, В. С. Попов. ЖЭТФ, 65, 2141, 1973.
- [2] М. Н. Дриккер, Л. Н. Иванов, Е. П. Иванова. Опт. и спектр., 49, 209, 1980.
- [3] P. J. Mohr. Phys. Rev. Lett., 34, 1050, 1975.
- [4] И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. Наука, М., 1963; 1977.
- [5] Е. П. Видолова-Ангелова, Е. П. Иванова, Л. Н. Иванов. Опт. и спектр., 50, 243, 1981.

Поступило в Редакцию 29 октября 1981 г.