

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



СЗУЗГ-1

З-171

P3 - 11742

К.Зайдель, А.Майстер, Д.Пабст

4944 / 2-78

ИЗОМЕРНЫЙ СДВИГ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСОВ

III. Определение разности плотностей

электронов на месте ядра металлического урана

и разных его соединений

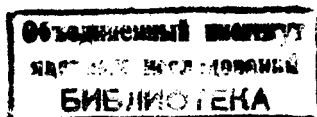
1978

РЗ · 11742

К.Зайдель, А.Майстер, Д.Пабст

ИЗОМЕРНЫЙ СДВИГ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСОВ

III. Определение разности плотностей
электронов на месте ядра металлического урана
и разных его соединений



Зайдель К., Майстер А., Пабст Д.

P3 - 11742

Изомерный сдвиг нейтронных резонансов.

3. Определение разности плотностей электронов на месте ядра металлического урана и разных его соединений

Установлены разности плотностей электронов на месте ядра металлического, трех-, четырех- и шестивалентного урана. Расчеты основаны на экспериментальных данных, известных по химическому сдвигу рентгеновской $L_{\alpha 1}$ -линии урана, а также по изменению постоянной радиоактивного распада нуклида $^{235}\text{U}^*$, вызванному влиянием химической связи.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Seidel K., Meister A., Pabst D.

P3 - 11742

The Isomer Shift of Neutron Resonances.

3. Determination of Electron Density Differences at the Nucleus between Uranium Metal and Various Uranium Compounds

Electron density differences at the nucleus between uranium metal, trivalent, tetravalent, and hexavalent uranium compounds have been determined. The calculations are based upon experimental values known for the chemical shift of the $L_{\alpha 1}$ x-ray line of uranium and for chemically induced changes in the radioactivity constant of $^{235}\text{U}^*$.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

1. ВВЕДЕНИЕ

Изомерный сдвиг зависит как от ядерного фактора $\Delta\langle r^2 \rangle$, так и от электронного фактора $\Delta|\Psi_e(0)|^2$. Поэтому определение искомого изменения среднеквадратичного радиуса $\Delta\langle r^2 \rangle$ требует установления разностей плотностей электронов на месте ядра $\Delta|\Psi_e(0)|^2$ подходом, более или менее независимым от измерений по изомерному сдвигу. По существу, использованный нами способ решения этой проблемы состоит в том, что находятся эффективные конфигурации валентных электронов в металле и разных соединениях урана, а затем рассчитываются соответствующие разности плотностей электронов с использованием данных по ионам. Для определения эффективных конфигураций можно воспользоваться экспериментальными результатами авторов, исследовавших сдвиг рентгеновских $L_{\alpha 1}$ -линий урана ^{1/} и зависимость постоянной радиоактивного распада 75-эВ перехода нуклида $^{235}\text{U}^*$ от вида химической связи ^{2/}. Последующее определение разности плотностей электронов основано на принципе наложения, предложенном Алдером и др. ^{3/}, и на данных Банда и др. ^{4/} по электронной плотности на месте ядра в ионах.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1. Химический сдвиг рентгеновских линий

Алдер и др. ^{3/} указали на то, что экранирующий потенциал электронов зависит от вида химической связи

образца. Разности этого потенциала вызывают химические сдвиги ΔE_R рентгеновских линий. Они зависят от разности степени делокализации δP_{nk} валентных nk -электронов. Расчеты по методу Хартри-Фока показывают, что соотношение между δP_{nk} и ΔE_R приблизительно линейное. Пусть, например, δE_{kx}^{nk} - сдвиг какой-нибудь kx -линии при полном удалении одного nk -электрона. Такое предположение соответствует случаю идеального /свободного/ иона, где $\delta P_{nk} = 1$. Тогда наблюдаемый сдвиг ΔE_R^{nk} между рентгеновскими линиями двух реальных соединений, где обыкновенно $\delta P_{nk} < 1$, составит

$$\Delta E_R^{nk} = \delta P_{nk} \cdot \delta E_{kx}^{nk} \quad /1/$$

Если несколько различных валентных электронов принимает участие в образовании химической связи, то вклады отдельных валентных электронов складываются и общий сдвиг ΔE_{total} будет

$$\Delta E_{total} = \sum_{nk} \Delta E_R^{nk} = \sum_{nk} \delta P_{nk} \delta E_{kx}^{nk} \quad /2/$$

В частности, для $L_{\alpha 1}$ -линии урана, исследованной Макаровым и др. /1/, получается общий сдвиг

$$\Delta E_{L_{\alpha 1}} = \sum_{nk} \delta P_{nk} \delta E_{L_{\alpha 1}}^{nk} \quad /3/$$

где $nk = 5f, 6d, 7s$, потому что основная конфигурация валентных электронов урана - $(5f)^3(6d)^1(7s)^2$.

Важно, что имеется подобное соотношение между общей разностью $\Delta |\Psi_e(0)|^2$ плотностей электронов на месте ядра, разностью степени делокализации δP_{nk} и вкладами $\delta |\Psi_e(0)|_{nk}^2$ отдельных валентных nk -электронов в эту разность /3/:

$$\Delta |\Psi_e(0)|^2 = \sum_{nk} \delta P_{nk} \delta |\Psi_e(0)|_{nk}^2 \quad /4/$$

Как $\delta E_{L_{\alpha 1}}^{nk}$, так и $\delta |\Psi_e(0)|_{nk}^2$ надо рассчитывать при помощи метода Хартри-Фока или подобного способа.

Для урана необходимые данные найдутся в таблицах Банда и др. /4/, которые для всех оболочек и различных степеней заселенности валентных орбит рассчитали величину

$$\tilde{N}_{nk} = 4\pi a^{-(2j-1)} \lim_{r \rightarrow 0} r^{-(2j-1)} |\Psi_e(r)|_{nk}^2 \quad /5/$$

и собственные значения энергии ϵ_{nlj} электронов. Последние данные дают сдвиг $L_{\alpha 1}$ -линии между двумя рассматриваемыми конфигурациями I и II, описываемый формулой /1/:

$$\Delta E_R^{nk} = (\epsilon_{3d5/2} - \epsilon_{2p3/2})^{II} - (\epsilon_{3d5/2} - \epsilon_{2p3/2})^I \quad /6/$$

Зависимость сдвига ΔE_R^{nk} от разности степеней делокализации δP_{nk} , полученная для урана по данным Банда и др., изображена на рис. 1. Очевидно, что предположение о линейности этой функции разумно. Кроме того, оказывается, что при одинаковых значениях величин δP_{nk} влияние $5f$ -электронов на сдвиг $L_{\alpha 1}$ -линии существенно превосходит вклад остальных валентных электронов.

2.2. Зависимость постоянной радиоактивного распада от вида химической связи для $75\text{-}\epsilon\text{В}$ перехода нуклида $^{235}\text{U}^*$

Подробное изложение теории зависимости постоянной радиоактивного распада от строения электронной оболочки заключено в работе /5/. При $75\text{-}\epsilon\text{В}$ переходе $^{235}\text{U}^*$ вид химической связи влияет на внутреннюю конверсию. Эффект этот довольно силен, так как благодаря низкой энергии данного перехода конверсия происходит только во внешних электронных орбитах и коэффициенты внутренней конверсии /квк/ весьма велики. Относительное изменение $\Delta\lambda/\lambda$ постоянной радиоактивного распада в случае внутренней конверсии:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{1}{1+a} \sum_{nk} \frac{a_{nk} \Delta |\Psi_e(R)|_{nk}^2}{|\Psi_e(R)|_{nk}^2} = \frac{1}{1+a} \sum_{nk} \frac{a_{nk} \tilde{N}_{nk}}{\tilde{N}_{nk}} \quad /7/$$

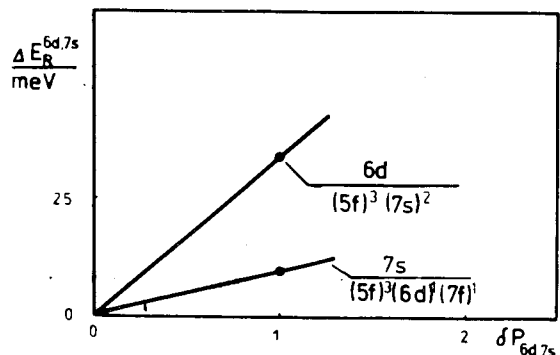
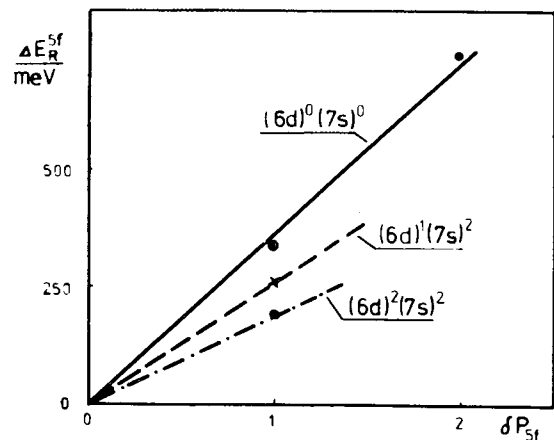


Рис. 1. Зависимость ΔE_R^{nk} от δP_{nk} .

где a обозначает общий, а a_{nk} - частичные квк, R - радиус ядра. Численные значения квк рассматриваемого перехода приведены в табл. 1.

Для урана $5f$ - , $6d$ - , $7s$ -электроны являются валентными. Если рассматриваются урановые соединения с разными валентностями, то из данных табл. 1 следует, что величина $\Delta\lambda/\lambda$ должна быть порядка процента, так как $6d$ -электрон прямо участвует в образовании химической связи. Кроме того, надо ожидать, что $6p_{1/2}$ - и $6p_{3/2}$ -электроны играют значительную роль, потому что их очень большие квк выступают в сумме формулы

Таблица 1

Коэффициенты внутренней конверсии /квк/ при $75\text{-}\text{эВ}$ переходе нуклида $^{235}\text{U}^*$

Оболочка	Частичный квк α_{nk} всей оболочки	Относительный квк всей оболочки [%]
$(5f_{5/2})^3$	$6,05 \cdot 10^{17}$	0,123
$(6s_{1/2})^2$	$4,38 \cdot 10^{17}$	0,089
$(6p_{1/2})^2$	$2,50 \cdot 10^{20}$	51,02
$(6p_{3/2})^4$	$2,26 \cdot 10^{20}$	46,12
$(6d_{3/2})^1$	$1,28 \cdot 10^{19}$	2,61
$(7s_{1/2})^2$	$3,56 \cdot 10^{16}$	0,007
$\alpha = \sum \alpha_{nk} = 4,9 \cdot 10^{20}$		

/7/ в качестве больших весовых множителей. Вклады других орбит так малы, что можно пренебречь ими. Итак, в сумме указанного соотношения нужно учитывать три члена.

При оценке значений этих членов можно пользоваться обобщением принципа наложения, на котором основана формула /4/, записывая

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{N}_{6p_{1/2}} &= \sum_{nk} \delta \tilde{N}_{6p_{1/2}}^{nk} \delta P_{nk} = \\ &= \delta \tilde{N}_{6p_{1/2}}^{5f} \delta P_{5f} + \delta \tilde{N}_{6p_{1/2}}^{6d} \delta P_{6d} + \delta \tilde{N}_{6p_{1/2}}^{7s} \delta P_{7s} \quad /8/ \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{N}_{6p3/2} &= \sum_{nk} \delta \tilde{N}_{6p3/2}^{nk} \delta P_{nk} = \\ &= \delta \tilde{N}_{6p3/2}^{5f} \delta P_{5f} + \delta \tilde{N}_{6p3/2}^{6d} \delta P_{6d} + \delta \tilde{N}_{6p3/2}^{7s} \delta P_{7s}, \end{aligned} \quad /9/$$

где $\delta \tilde{N}_{6pi}^{nk}$ обозначает изменение величины \tilde{N}_{6pi} при полном удалении одного валентного nk-электрона. Если, кроме того, вклад 6d-электрона выражается через отношение

$$a_{6d3/2} \frac{\Delta \tilde{N}_{6d3/2}}{\tilde{N}_{6d3/2}} = a_{6d3/2} \delta P_{6d3/2}, \quad /10/$$

то уравнение /7/ дает

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \lambda}{\lambda} &= \frac{1}{1+a} \left\{ \frac{a_{6p1/2}}{\tilde{N}_{6p1/2}} \Delta \tilde{N}_{6p1/2} + \frac{a_{6p3/2}}{\tilde{N}_{6p3/2}} \Delta \tilde{N}_{6p3/2} + \right. \\ &\left. + \delta P_{6d3/2} a_{6d3/2} \right\}, \end{aligned} \quad /11/$$

или, с учетом уравнения /8/-/10/ и факта, что $1 \ll a$:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \lambda}{\lambda} &= \frac{a_{6p1/2}}{a \tilde{N}_{6p1/2}} \sum_{nk} \delta \tilde{N}_{6p1/2}^{nk} \delta P_{nk} + \\ &+ \frac{a_{6p3/2}}{a \tilde{N}_{6p3/2}} \sum_{nk} \delta \tilde{N}_{6p3/2}^{nk} \delta P_{nk} + \frac{a_{6d3/2}}{a} \delta P_{6d3/2}, \end{aligned} \quad /12/$$

где $nk=5f, 6d, 7s$.

Изменение величин $\tilde{N}_{6p1/2}$ и $\tilde{N}_{6p3/2}$ в зависимости от разности степени делокализации δP_{nk} валентных электронов изображено на рис. 2 и 3^{4/}.

Как окажется далее, заселенность валентных орбит в реальных соединениях такова, что $\tilde{N}_{6p1/2} = 1,91 \cdot 10^3 a_0^{-3}$ и $\tilde{N}_{6p3/2} = 1,65 \cdot 10^2 a_0^{-3}$. При использовании этих данных

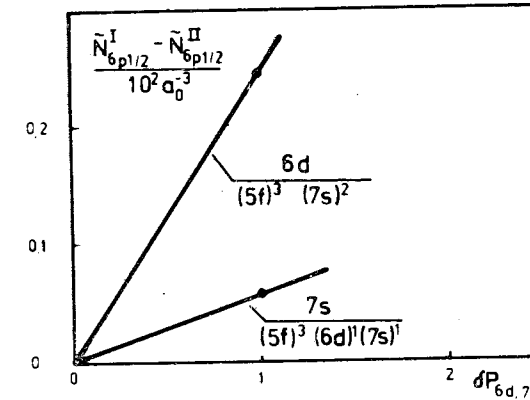
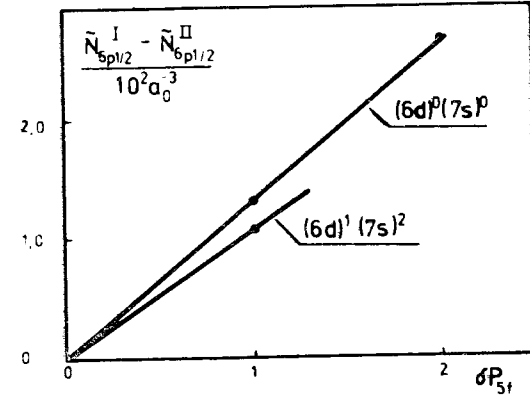


Рис. 2. Изменение $\tilde{N}_{6p1/2}$ в зависимости от δP_{nk} .

и квк из табл. 1 можно переписать уравнение /12/. Для относительного изменения постоянной радиоактивного распада получается

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \lambda}{\lambda} &= \frac{0,510}{1,91 \cdot 10^3} \sum_{nk} \delta \tilde{N}_{6p1/2}^{nk} \delta P_{nk} + \\ &+ \frac{0,461}{1,65 \cdot 10^2} \sum_{nk} \delta \tilde{N}_{6p3/2}^{nk} \delta P_{nk} + 0,026 \delta P_{6d3/2}, \end{aligned} \quad /13/$$

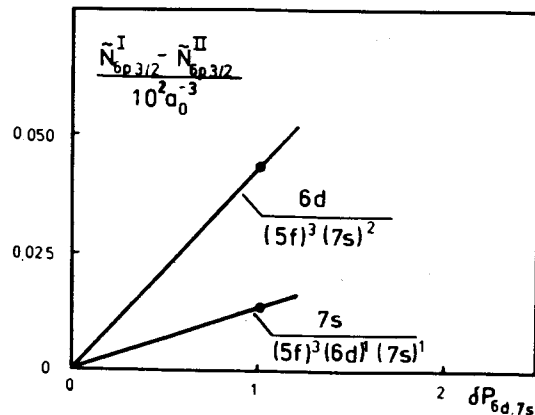
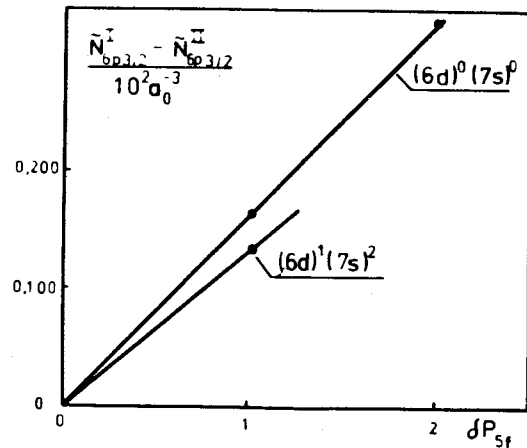


Рис. 3. Изменение $\bar{N}_{6p3/2}$ в зависимости от δP_{nk} .

где $nk = 5f, 6d, 7s$ и $\delta \bar{N}_{6pi}^{nk}$ выражается в единицах a_0^{-3} . В отношении валентных электронов формула эта указывает на тот факт, что только $6d$ -электрон прямо влияет на $\Delta\lambda/\lambda$.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОНФИГУРАЦИЙ

В табл. 2 представлены экспериментальные данные Макарова и др. /1/ по химическому сдвигу L_{a1} -линии урана и Нэв де Мевегниеса /2/ по изменению постоянной радиоактивного распада нуклида $^{235}\text{U}^*$. Кроме того, приведены значения величин ΔE_{La1} и $\Delta\lambda/\lambda$, рассчитанные по формулам /3/ и /13/ с использованием указанных в табл. 2 эффективных электронных конфигураций, которые следуют из данных работы /1/.

При этом - как и далее - предполагалось, что можно пренебречь разницей между плотностями электронов различных соединений урана одной и той же валентности.

Оказывается, что есть значительные расхождения между рассчитанными и экспериментальными данными. Поэтому более точные значения разностей степени делокализации δP_{nk} определялись при помощи подгонки экспериментальных данных к рассчитанным путем подбора с помощью уравнений /3/ и /13/. Важно при этом учитывать, что наклоны прямых на рис. 1-3, а следовательно, и ΔE_R^{nk} и $\delta \bar{N}_{6p1/2}$, $\delta \bar{N}_{6p3/2}$ зависят не только от орбитального квантового числа рассматриваемого валентного электрона, но и от степени делокализации остальных валентных орбит, указанной на рисунках. Надо добавить, что это существенно только для $5f$ -электронов, так как влияние $7s$ - и $6d$ -электронов, во всяком случае, значительно меньше.

Такой подход дает результаты, записанные в табл. 3. Видно, что при указанных эффективных конфигурациях валентных электронов получается отличное согласие между рассчитанными и экспериментальными данными.

4. РАСЧЕТ РАЗНОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ

Согласно уравнениям /4/ и /5/, для общего изменения электронной плотности, полученного при переходе

Таблица 2

Исходные значения эффективных конфигураций валентных электронов

Валентность	Конфигурация		Образец	$\frac{\Delta E_{L_{II}}}{\text{мэВ}}$ по /1/	$\frac{\Delta E_{L_{II}}}{\text{мэВ}}$ по (3) и (6)	$\frac{\sigma E_{L_{II}}^{5f}}{\text{мэВ}}$ по рис. I	$\frac{\Delta\lambda/\lambda}{\%}$ по (I3)	$\frac{\Delta\lambda/\lambda}{\%}$ по /2/
	идеального иона (атома)	реального иона (атома) по /1/						
0	$(5f)^3(6d)^1(7s)^2$	$(5f)^2(6d)^2(7s)^2$	U металл	-20I ÷ -2I5	- 202	220	-	-
+3	$(5f)^3(6d)^0(7s)^0$	$(5f)^{2,5f}(6d)^1(7s)^{1,16}$	UF ₃ , UBt ₃	I90 ÷ 20I	I56	275	-	-
+4	$(5f)^2(6d)^0(7s)^0$	$(5f)^2(6d)^{1,16}(7s)^{1,16}$	UO ₂ , UF ₄					
+6	$(5f)^0(6d)^0(7s)^0$	$(5f)^{1,75}(6d)^{0,75}(7s)^{1,16}$	UO ₃ , UO ₂ (NO ₃) ₂	II9 ÷ I40	55	300	4,5	5,6

Таблица 3

Конечные значения эффективных конфигураций и соответствующие экспериментальные и расчетные данные

Валентность	Конфигурация		Образец	$\frac{\Delta E_{L_{II}}}{\text{мэВ}}$ по /1/	$\frac{\Delta E_{L_{II}}}{\text{мэВ}}$ по (3) и (6)	$\frac{\sigma E_{L_{II}}^{5f}}{\text{мэВ}}$ по рис. I	$\frac{\Delta\lambda/\lambda}{\%}$ по (I3)	$\frac{\Delta\lambda/\lambda}{\%}$ по /2/
	идеального иона (атома)	реального иона (атома)						
0	$(5f)^3(6d)^1(7s)^2$	$(5f)^2(6d)^2(7s)^2$	U металл	-20I + -2I5	- 207	220	-	-
+3	$(5f)^3(6d)^0(7s)^0$	$(5f)^{2,75}(6d)^1(7s)^{1,16}$	UF ₃ , UBt ₃	I90 ÷ 20I	I93	268	-	-
+4	$(5f)^2(6d)^0(7s)^0$	$(5f)^{2,05}(6d)^{1,16}(7s)^{1,16}$	UO ₂ , UF ₄					
+6	$(5f)^0(6d)^0(7s)^0$	$(5f)^{1,57}(6d)^{0,70}(7s)^{1,16}$	UO ₃ , UO ₂ (NO ₃) ₂	II9 ÷ I40	I29	300	5,6	5,6

от одного химического соединения к другому, можно записать, учитывая только s- и p_{1/2}-электроны:

$$4\pi\Delta|\Psi_e(0)|^2 = \Delta\tilde{N}_{total} = \sum_{nk} \delta\tilde{N}_{total}^{nk} \delta P_{nk} \quad /14/$$

где $\delta\tilde{N}_{total}^{nk}$ обозначает изменение величины \tilde{N}_{total} при совершенном удалении одного nk-электрона / nk = 5f, 6d, 7s /.

Зависимость изменения величины \tilde{N}_{total}^{nk} от разности степени делокализации валентных электронов изображена на рис. 4. При помощи этих кривых и указанных в

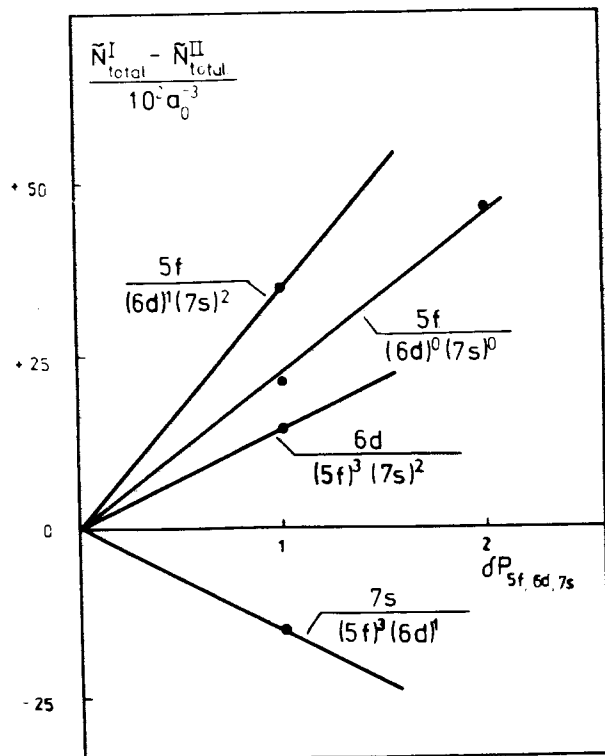


Рис. 4. Изменение \tilde{N}_{total} в зависимости от δP_{nk} .

табл. 3 значениях эффективных электронных конфигураций разности $\Delta\tilde{N}_{total}$ между отдельными парами образцов, а затем и $\Delta|\Psi_e(0)|^2$ можно с легкостью рассчитать по формуле /14/.

Надо оценить погрешность таких данных. По закону Гаусса из формулы /14/ получается

$$\Delta(\Delta\tilde{N}_{total}) = \sqrt{\sum_{nk} \{\delta\tilde{N}_{total}^{nk} \Delta(\delta P_{nk})\}^2 + \sum_{nk} \{\delta P_{nk} \Delta(\delta\tilde{N}_{total}^{nk})\}^2} \quad /15/$$

где передний знак Δ употребляется в качестве символа средней ошибки. Данные по значениям величин $\delta\tilde{N}_{total}^{nk}$ можно взять из табл. 4 и рис. 4, а по значениям величины δP_{nk} - из табл. 3. Предполагалось, что относительная ошибка величины $\delta\tilde{N}_{total}^{nk}$ равняется 10%. Это значение сходится с данными Алдера и др.^{/3/} по точности. Далее предполагалось, что относительная ошибка разности степени делокализации δP_{5f} при парах U_{метал.}-U_{III} и U_{III}-U_{IV} такая же, как и ошибка экспериментальных данных Макарова и др.^{/1/}, так как химический сдвиг рентгеновской L_{α1}-линии почти исключительно зависит от δP_{5f} . Порядок этой ошибки - 12-14%.

Что касается 7s-электронов, то предполагалась ошибка порядка 18% для δP_{7s} , потому что существующие экспериментальные данные довольно мало говорят о поведении 7s-электронов.

Ситуация для 6d-электрона отличается немного. Предполагалась ошибка порядка 15% для пар U_{метал.}-U_{III} и U_{III}-U_{IV}, потому что в этих случаях степень делокализации слабо влияет на химический сдвиг рентгеновских линий. Однако ошибка уменьшается у пары U_{IV}-U_{VI}, так как здесь можно употреблять результаты Нэв де Мевергниеса^{/2/} для более точного определения заселенности 6d- и 5f-электронов. Поэтому предполагалось, что относительная ошибка как по δP_{6d} , так и по δP_{5f} в этом случае составит только 10%.

Полученные конечные данные по $\Delta\tilde{N}_{total}$, $\Delta|\Psi_e(0)|^2$ и их ошибки представлены в табл. 4. Указаны также

Таблица 4

Расчетные значения величин $\Delta \tilde{N}_{total}$ и $\Delta \Psi_e(0) ^2$				
Пара образцов	$\frac{\Delta \tilde{N}_{total}}{10^2 a_0^{-3}}$	$\frac{\Delta \Psi_e(0) ^2}{10^{26} \text{ см}^{-3}}$	$\frac{\delta \tilde{N}_{total}^{5r}}{10^2 a_0^{-3}}$	
U металл - UIII	-25,0±5,6	-13,4±3,0	33,5	
UIII - UIV	+19,4±4,9	+10,4±2,6	30,0	
UIV - UVI	+20,3±3,2	+10,9±1,7	29,0	

данные по $\delta \tilde{N}_{total}$, использованные для разных пар образцов при расчетах.

5. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Полученные данные по $\Delta |\Psi_e(0)|^2$ используются при обсуждении изомерного сдвига ΔE_0^{IS} нейтронных резонансов, который равняется

$$\Delta E_0^{IS} = \frac{1}{6\epsilon_0} \pi e^2 Z \Delta |\Psi_e(0)|^2 \Delta \langle r^2 \rangle, \quad /16/$$

где $\Delta \langle r^2 \rangle$ - изменение среднеквадратичного радиуса при захвате нейтрона, а e и Z - обычные символы. Как видно, соотношение между ΔE_0^{IS} и $\Delta |\Psi_e(0)|^2$ линейно. Поэтому любое нормированное изображение зависимости сдвига ΔE_0^{IS} от формальной валентности V урана должно согласоваться с кривой, показанной на рис. 5. Здесь приведено нормированное изменение плотности электронов на месте ядра как функция формальной валентности. Получается очень характерная кривая, вид которой зависит исключительно от истинной эффективной конфигурации валентных электронов образцов. Если экспериментальные данные по изомерному сдвигу превышают указанные пределы погрешности, то надо проводить

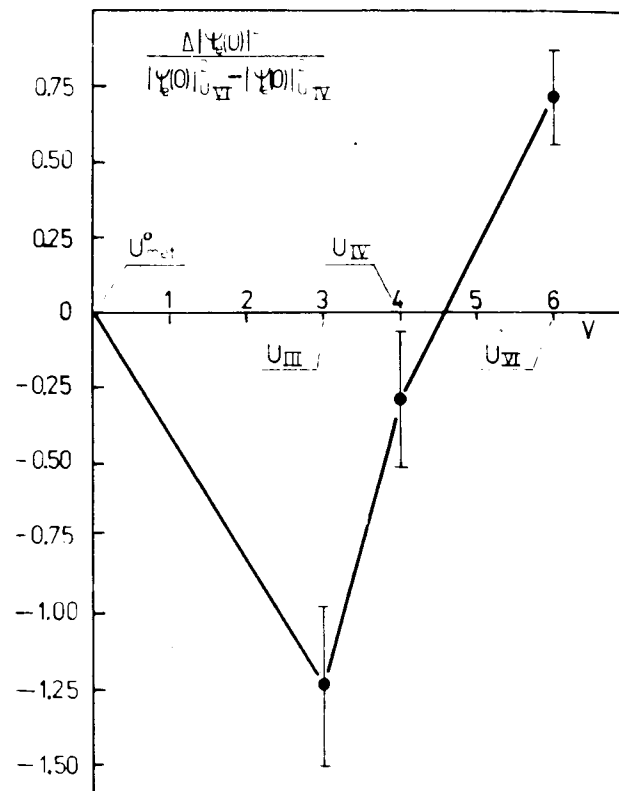


Рис. 5. Изменение $|\Psi_e(0)|^2$ в зависимости от V .

дополнительную подгонку электронных конфигураций, учитывая особенно вклад $7s$ -электронов, который прямо входит в плотность электронов, и, следовательно, в значение сдвига.

В заключение можно указать, что рассмотренные явления химического сдвига рентгеновских линий, влияния вида химической связи на величину постоянной радиоактивного распада и изомерного сдвига нейтронных резонансов дополняют друг друга весьма выгодным образом в отношении выводов о заселенности валентных орбит. Химический сдвиг ΔE_R зависит почти исключи-

тельно от степени делокализации $5f$ -электронов, заселенность $6d$ -орбиты сильно влияет на постоянную радиоактивного распада, а изомерный сдвиг ΔE_0^{IS} зависит довольно равномерно от заполнения всех валентных оболочек. Можно ожидать, что сочетание этих трех эффектов даст в будущем важные результаты при исследовании химической связи в соединениях урана.

Авторы выражают свою глубокую благодарность Л.Б.Пикельнеру за полезные обсуждения результатов этой работы, С.Zschornack за проведение некоторых расчетов по методу Хартри-Фока-Слейтера, D.Hinneburg и M.Nagel за расчет коэффициентов внутренней конверсии $75\text{-}\varepsilon\text{В}$ перехода нуклида $^{235}\text{U}^*$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Макаров Л.Л. и др. Вестник ЛГУ, 1975, 16, 3, с.87-96.
2. Neve de Mevergnies M., *Del Marmol P. Phys.Lett.*, 1974, 49B, p.428-430.
3. Alder K., Baur G., Raff U. *Helv. Phys. Acta*, 1972, 45, 5, p.765-770.
4. Банд И.М., Тржасковская М.Б. Препринт ЛИЯФ АН СССР, №92, Л., 1974.
5. Dostal K.-P., Nagel M., Pabst D. *Z.Naturforsch.*, 1977, 32A, 3/4. p.345-361.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 июля 1978 года.