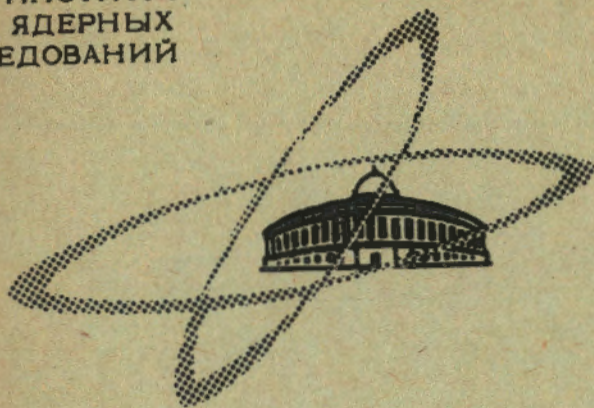


И-265
ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 4142



В.К.Игнатович

ЛАБОРАТОРИЯ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ

УСИЛЕНИЕ
ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА
ЭЛЕКТРОНА В АТОМАХ

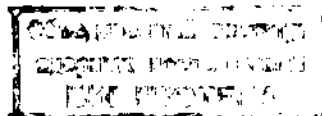
1968

P4 - 4142

В.К.Игнатович

УСИЛЕНИЕ
ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА
ЭЛЕКТРОНА В АТОМАХ

Направлено в ЖЭТФ



4569/3 нр

Нарушение CP -четности в распаде K_0 - мезонов указывает на возможность существования электрических дипольных моментов (э.д.м.) у элементарных частиц. В связи с этим поиски э.д.м. у элементарных частиц приобретают актуальное значение.

Данная работа посвящена проблеме обнаружения э.д.м. у электрона и навеяна работами Сандарса ^{1/1}, в которых было показано, что при наличии э.д.м. у электрона атомные уровни во внешнем электрическом поле, даже при отсутствии случайного вырождения, смещаются пропорционально полю. Иными словами, у атома в целом тоже появляется э.д.м. В тех же работах было показано, что э.д.м. водородоподобных атомов, каковыми являются щелочные элементы, может быть во много раз больше э.д.м. электрона, т.е. $d_A = N d_e$, где d_e - э.д.м. электрона, а N - коэффициент усиления. В случае атомов Ca , например, коэффициент усиления N равен 130.

В связи с этим возникает вопрос, нельзя ли использовать усиление э.д.м. электрона в атоме с тем, чтобы поставить прямой макроскопический эксперимент по обнаружению э.д.м. атома. Этот эксперимент может выглядеть следующим образом: ферромагнитный образец помещается в сильное магнитное поле, спины образца выстраиваются и возникает электрическая поляризация

$$P = d_A N = N d_e N, \quad (1)$$

где d_A - э.д.м. атома, N - число атомов в единице объема образца, d_e - э.д.м. электрона, а N - коэффициент усиления. При этом на тор-

нах образца толщиной 1 см создается разность потенциалов, которая, если принять, что $N = 10^{23}$ 1/см³, $\mu = 2 \cdot 10^{-23}$ см², составляет примерно

$$V = 3 \frac{R}{\epsilon} 10^{-16} \text{ в.} \quad (2)$$

где ϵ — диэлектрическая проницаемость образца. Если магнитное поле менять с частотой ν , то возникнет переменный ток с амплитудой

$$I = 3 \nu R 10^{-16} \text{ а.} \quad (3)$$

Возможна и другая постановка эксперимента, когда ферромагнитный образец помещается в электрическое поле и измеряется намагниченность. Этот вариант оказывается более выгодным, т.к. в настоящее время существуют чувствительные магнитометры, позволяющие заметить изменение магнитного поля на 10^{-8} гс на фоне в несколько килогаусс^{3/}. При этом представляется возможным либо повторить, либо улучшить верхнюю оценку э.д.м. электрона, равную $2 \cdot 10^{-23}$ см².

Чтобы оценить чувствительность этих экспериментов, нужно было численно рассчитать коэффициенты усиления для наиболее удобных материалов. Для этой цели можно было воспользоваться формулами для коэффициента усиления, опубликованными в работах Сандарса^{1/}. Однако, т.к. эти формулы справедливы только для щелочных элементов, а вывод их в общем виде не был приведен, то нужно было заново произвести теоретический расчет, а для проверки правильности численного алгоритма повторить некоторые численные расчеты Сандарса^{х)}.

Метод расчета и результаты приведены в разделе II. В разделе III обсуждаются результаты и поправки на релятивизм, многочастичность и на внутреннее поле кристалла. В конце работы, в приложении А, излагается вывод одностичного коэффициента усиления, в приложении Б при-

х) В то время, как эта работа готовилась к печати, вышла новая работа Сандарса^{13/}, в которой приведен подробный теоретический вывод коэффициента усиления для щелочных элементов.

водятся квазиклассические и кулоновские оценки усиления э.д.м. электрона в атоме, и в приложении В производится расчет коэффициента усиления для конфигурации $f^3 \ ^4 1_{9/2}$ иона урана.

II. Расчет коэффициента усиления

Как показано в приложении А (27 А), коэффициент усиления э.д.м. электрона в атоме в случае одного единственного неспаренного электрона с угловым моментом l_0 и при малых $(za)^2$ равен линейной комбинации коэффициентов R_1 и R_2 , где

$$R_{1,2} = 2(za)^2 \int_0^\infty \psi_{1,2} \frac{d}{dr} \left(\frac{v}{r} \right)^2 \psi_0 dr; \quad (4)$$

z - заряд ядра; a - постоянная тонкой структуры; v/r - самосогласованный потенциал; ψ_0 - решение уравнения

$$\left[\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{2} \frac{l_0(l_0+1)}{r^2} + \frac{v}{r} - E_0 \right] \psi_0 = 0; \quad (5)$$

а $\psi_{1,2}$ подчиняются уравнениям

$$\left[\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_{1,2}(l_{1,2}+1)}{2r^2} + \frac{v}{r} - E_0 \right] \psi_{1,2} = r \psi_0 \quad (6)$$

при $l_1 = l_0 - 1$; $l_2 = l_0 + 1$.

Если единственным неспаренным электроном является s -электрон, как в щелочных металлах, то для него коэффициент усиления определяется только коэффициентом R_2 , так как при $l_0 = 0$ поправка ψ_1 с $l_1 = l_0 - 1$ очевидно отсутствует. Для многоэлектронных атомов с несколькими неспаренными электронами мы будем пользоваться той же формулой (4) для каждого электрона, а полный коэффициент будет складываться из отдельных коэффициентов по закону образования конфигураций так, как это сделано, например, в приложении В для конфигурации $f^3 \ ^4 1_{9/2}$.

Решение неоднородных уравнений (6) производилось методом Рунге-Кутты, причем самосогласованный потенциал ν брался из таблиц /4/. Для вычисления правых частей уравнений (6) решалось также и уравнение (5). Полученное решение ψ_0 в целях проверки метода решения сравнивалось с табличным /4/. Совпадение получалось обычно хорошее, с точностью до единицы последнего знака, приведенного в таблицах /4/. Расхождение получалось только для Γ - оболочки урана. Для нее волновая функция ψ_0 отличалась от табличных значений на 10%. Причины расхождения не установлены. Уравнения решались со стороны малых и больших r до большей точки r_0 , где:

$$\frac{\psi_0(\ell+1)}{2r_0^2} - \frac{\nu}{r_0} + E_0 \approx 0.$$

В точке $r=r_0$ левые и правые решения ψ_1 сшивались по непрерывности функции и производной, а ψ_0 - сшивались только по непрерывности функции. При этом проверялась непрерывность логарифмической производной ψ_0 в точке сшивания. Разрыв левой и правой логарифмической производной ψ_0 оказался достаточно малым во всех случаях, кроме одного, указанного выше (Γ - оболочка ^{232}U). Одновременно с решением уравнения находился нормировочный интеграл $\int_0^\infty \psi_0^2 dr$ и коэффициенты $N_{1,2}$. Начальные значения $\psi_0, \psi_0', \psi_1, \psi_1'$ ($i=1,2$) определялись аналитически путем разложения в ряд Тейлора по степеням r^n при малых r и по степеням r^{-n} при больших r . При этом из двух возможных решений около нуля и в бесконечности выбиралось только убывающее решение. Первый коэффициент в разложении задавался произвольно, и это определяло решение уравнения во всей области интегрирования слева направо (т.е. от малых значений r к большим) или справа налево однозначно с точностью до произвольного постоянного множителя. Остальные коэффициенты разложения находились с помощью уравнений (5) и (6). Две произвольные константы для ψ_1 ($i=1,2$) затем определялись из двух условий непрерывности ψ_i и ψ_i' в точке $r=r_0$. Для функции ψ_0 константы были найдены из условия непрерывности ψ_0 и из условия нормировки

$$\int_0^{r_{\max}} \psi_0^2 dr = 1,$$

где r_{\max} - максимальное значение r , до которого проводились численные расчеты; оно составляет $\sqrt{4}$;

$$r_{\max} = \mu \times_{\max} = 0,88 z^{-1/3} 133'.$$

В дальнейшем мы всюду r_{\max} будем обозначать знаком ∞ . Результаты расчета собраны в табл. 1, где одновременно указаны значения $r_{1,2}$ в единицах $h/mc\alpha$, при которых интегралы (4) для $R_{1,2}$ с верхней границей интегрирования, равной $r_{1,2}$, а не ∞ , достигают примерно половины окончательного значения.

Таблица 1

r_1 и r_2 - расстояния, на которых R_1 и R_2 достигают примерно половины окончательной величины, $^{92}\text{U}\beta$ означает β - электрон ^{92}U ; $^{92}\text{U}\beta$ - соответственно β - электрон

Элемент	$^{92}\text{U}\beta$	$^{92}\text{U}\beta$	^{71}Lu	^{83}Eu	^{58}Ce	^{55}Cs	^{26}Fe	^{24}Cr
R_1	9,1	74,3	45,1	1,8	1,95		0,76	0,56
r_1	6	2	2	6	6		2,5	2
R_2	0,05	-11,44	1,7	0,3	0,003	283 ^{x)}	0,01	0,1
r_2	20	6	5	20	15	1	10	10

x) С учетом релятивистского множителя 1,39 и орбитального 1/3 коэффициент усиления $R_{\text{С*}} = 131$ у Сандарса $^{1/3} R_{\text{С*}} = 33$.

Из табл. 1 видно, что коэффициенты усиления почти всех элементов гораздо меньше коэффициента усиления С* . Тем не менее макроскопический эксперимент, благодаря большой магнитной восприимчивости ферромагнитных материалов, оказывается всё равно достаточно чувствительным.

Было замечено, что коэффициент усиления тем больше, чем меньше l_0 и чем ближе к нулю уровень энергии соответствующего электрона.

III. Обсуждение результатов

1. Релятивизм

Коэффициент усиления (4) вычислился в приближении, когда $(za)^2 \ll 1$, на самом же деле для большинства элементов, приведенных в табл. 1, za не мало. Поэтому возникает вопрос, что произойдет, если учесть релятивизм полностью? Релятивизм изменит формулу (4) двояким образом. Во-первых, при ее выводе следует пользоваться релятивистским самосогласованным потенциалом, таблиц которого для тяжелых элементов пока еще нет^{х)}, и, во-вторых, для заданного потенциала нужно пользоваться точным уравнением Дирака. Как показано в работе [1], вычисления с помощью точного уравнения Дирака приводят к появлению в коэффициентах усиления релятивистских множителей. Для коэффициентов усиления R_1 и R_2 эти множители имеют вид:

$$\eta_i = \frac{|\kappa_i| (4\kappa_i^2 - 1)}{\rho_i (4\rho_i^2 - 1)}, \quad i=1, 2,$$

где

$$\rho_i = \sqrt{\kappa_i^2 - (za)^{-1}}, \quad \kappa_1 = -l, \quad \kappa_2 = l+1.$$

Однако величины этих множителей для интересующих нас здесь электронов с орбитальным моментом $l=2$ и 3 мало отличаются от единицы, и поэтому они нигде не учитывались, только для $l=0$, где значение коэффициента усиления служило критерием правильности численных расчетов, этот множитель учитывался полностью.

х) Автор благодарит Г. Козна за присылку препринтов [14], в которых рассчитаны релятивистские самосогласованные потенциалы для некоторых элементов без учета обмена. Эти потенциалы будут использованы в дальнейшей работе.

Остается ответить на вопрос, насколько справедливо пользоваться нерелятивистским самосогласованным потенциалом. При этом хорошо бы апеллировать к тем результатам, которые получены с помощью того же нерелятивистского потенциала и достаточно хорошо подтверждаются экспериментально. По-видимому, единственным прецедентом в этом отношении является усиление ядерных квадрупольных моментов, вычисленное Штернхаймером /5/. Ситуация там несколько напоминает имеющуюся здесь. Действительно, при наличии квадрупольного момента у ядра $Q_{\mu\nu}^0$ к кулоновскому взаимодействию между электроном и ядром добавится взаимодействие

$$U = Q_{\mu\nu}^0 \frac{r_{\mu} r_{\nu}}{r^5}. \quad (7)$$

Это взаимодействие само по себе не приводит к сдвигу атомных уровней, если электронные оболочки замкнуты. Если же, однако, на расстоянии R от атома поместить внешний заряд, то сдвиг атомных уровней произойдет, и он окажется равным:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \langle 0 | Q_{\mu\nu}^0 \frac{R_{\mu} R_{\nu}}{R^3} | 0 \rangle + \\ &+ 2 \sum_i \frac{\langle 0 | Q_{\mu\nu}^0 \frac{r_{\mu} r_{\nu}}{r^3} | i \rangle \langle i | \frac{(r^2 \delta_{\mu\nu} - \frac{1}{3} r_{\mu} r_{\nu}) R_{\mu} R_{\nu}}{R^3} | 0 \rangle}{E_i - E_0} = \\ &= Q_{\mu\nu}^0 \frac{R_{\mu} R_{\nu}}{R^3}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $Q_{\mu\nu}^0$ — эффективный квадрупольный момент атома:

$$Q_{\mu\nu}^0 = Q_{\mu\nu}^0 (1 + \kappa). \quad (9)$$

Если оценить величину $Q_{\mu\nu}^0$ тем же методом, каким в приложении Б произведена оценка дипольного момента, то окажется, что вклад в $Q_{\mu\nu}^0$ дают в основном только внешние оболочки, причем этот вклад для отдельного электрона такой же, как и для дипольного момента. Различие

же между ними заключается в том, что в то время как для усиления дипольного момента нужно учитывать только неспаренные электроны, для усиления квадрупольного момента должны быть учтены все внешние электроны. Из выражения (8) видно, что поскольку в АЕ входят матричные элементы типа $\langle 0 | 1/r^3 | i \rangle$, то наиболее существенный вклад в АЕ вносит область $r \approx 1/z$, где, вообще говоря, важны релятивистские эффекты. Поэтому, если полный учет релятивистских эффектов, в частности использование релятивистского самосогласованного потенциала, может в корне изменить всю картину, то были бы также несправедливы предсказания относительно квадрупольных моментов. На самом же деле наличие сильного квадрупольного усиления, предсказываемого теорией, наблюдается во многих экспериментах /8/, что по крайней мере качественно подтверждает теорию. А в некоторых случаях имеется даже количественное согласие.

Для удобства читателей приведем несколько цифр усиления квадрупольных моментов /8/:

Таблица 2

Ион	Эксперимент	Теория
Na^+	7 + 11	5,6
Rb^+	40 + 50	50
Cs^+	80	80

Здесь показаны только цифры, наиболее хорошо согласующиеся с экспериментом. Существуют также и разногласия, так, например, для Cl^- $k_{\text{эксперимент}} = 10$, а $k_{\text{теор.}} = 58$, но качественно наличие большого усиления отмечено во многих экспериментальных работах, в частности, например, в /7/.

2. Причины усиления

Обсудим теперь причины усиления. Сальпетер /8/ показал, что для водородоподобного атома усиление в принципе может быть обусловлено

тем, что имеются почти вырожденные уровни с разной четностью, расстояние между которыми - лэмбовский сдвиг - мало. Поэтому смешивание двух функций с разными четностями будет порядка

$$\frac{\langle i | H_1 | j \rangle}{E_i - E_j}, \quad (10)$$

где H_1 - энергия взаимодействия э.д.м. электрона с ядром, а i и j - два состояния, уровни энергий которых разделены лэмбовским сдвигом $E_i - E_j$, например, состояния $2S_{1/2}$ и $2P_{1/2}$. При этом благодаря малости $E_i - E_j$ происходит сильное смешивание волновых функций разной четности.

Однако в случае реального атома случайного вынождения по J нет, и поэтому разности между ближайшими уровнями по порядку величины равны интервалам тонкой структуры, т.е. усиления, казалось бы, за этот счет ожидать не приходится. На самом же деле, даже в случае реальных атомов усиление есть, и оно частично зависит от малости $E_i - E_j$, которая для внешних электронов порядка единицы и меньше. Например, для ^{86}Sr $E_0 - E_j < 0,26$. Как показано в приложении Б, малая величина разности $E_0 - E_j$ в сочетании с сингулярностью оператора

$d/dr \left(\frac{r}{r} \right)^2$ приводит к тому, что коэффициент усиления должен зависеть от заряда ядра, как r^Y , где Y лежит между $1 < Y < 5$, и, таким образом, должен сильно возрасти по мере перехода к всё более тяжелым элементам. Прямой численный расчет доказывает, что на самом деле коэффициенты усиления тяжелых атомов хорошо ложатся на интерполяционную кривую

$$H = R \text{ интерполяц.} = A f_0 r^4,$$

где $A f_0$ - константа, зависящая от углового момента электрона, для которого ищется коэффициент усиления. Ниже приведена таблица значений H и R интерполяц. причем значение $A f_0$ определено по самому левому элементу соответствующей колонки. Коэффициенты усиления H для щелочных элементов взяты из работы [1].

Таблица 3

A_{ℓ_0}	$A_0 = 1,4 \cdot 10^{-6}$			$A_2 = 1,7 \cdot 10^{-6}$				$A_8 = 1,10^{-7}$	
	$^{87} \text{Rb}$	$^{85} \text{Cs}$	$^{87} \text{Fr}$	$^{24} \text{Cr}$	$^{26} \text{Fe}$	$^{71} \text{Lu}$	$^{92} \text{Ud}$	$^{83} \text{Eu}$	$^{92} \text{Uf}$
R интерполян.	27,5	127	1002	0,56	0,78	48	137	1,8	7,1
R	27,5	133	1150	0,56	0,78	45	74	1,8	9,1

3. Многочастичность

Здесь следует рассмотреть три эффекта. Во-первых, появление обменных членов в выражении для ΔE ; во-вторых, вклад в дипольный момент атома каждого электрона, если на внешней оболочке находится не один электрон, а несколько; и, в-третьих, поляризацию Кора.

а) Обменные члены. Если в качестве волновой функции взять волновую функцию всего атома, представленную в виде хартри-фоковского детерминанта из одночастичных функций, то выражение (12.А) для сдвига ΔE изменится только в том отношении, что под $|0\rangle$ и $|i\rangle$ нужно понимать хартри-фоковский детерминант, вместо ψ_i^+ взять сумму $\sum_1 \vec{\epsilon}_i^+$ по координатам всех электронов и вместо $(y_0 - 1) \sum \vec{V}_0^+$ тоже взять сумму $\sum_1 (y_{01} - 1) \sum_1 \vec{V}_1^+(r_1)$. Обменные члены появляются только в том случае, если во взаимодействии с внешним или внутренним полем будут иметь место двухчастичные операторы. Взаимодействие с внешним полем — явно одночастичный оператор, во взаимодействии с внутренним полем двухчастичный оператор в принципе может появиться, если под (r_1) понимать не только самосогласованный потенциал, но и остаточное взаимодействие. В данной работе остаточное взаимодействие не учитывалось. Обменное же взаимодействие учитывалось ровно настолько, насколько оно учитывалось в рамках самосогласованного потенциала $\psi(r_1)$. При этом все матричные элементы оказываются одночастичными, возбужденное состояние $|i\rangle$ может отличаться от невозмущенного только возбуждением одной частицы, и если в атоме

есть несколько неспаренных электронов, то их вклад в дипольный момент вычисляется по отдельности и складывается соответственно их ориентации с помощью коэффициентов Клебша-Гордона или генеалогических коэффициентов.

б) Суммарный вклад нескольких неспаренных электронов в дипольный момент атома. Здесь мы только рассмотрим простейший случай атома ^{63}Eu , в котором на f -оболочке расположено 7 электронов. По правилу Гунда 7 электронов располагаются таким образом, что спин становится максимальным, т.е. $7/2$. При этом единственный орбитальный момент, который они могут иметь, - это $L=0$, поэтому волновую функцию семи f -электронов можно записать в виде

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{7!}} \sum_P P \prod_{m_1} \psi_{(f)}^{m_1} (-1)^P \chi_{\mu}^{\mu}, \quad (11)$$

где χ_{μ}^{μ} - спиновая функция с проекцией μ на ось z , $\psi_{(f)}^{m_1}$ означает волновую функцию i -го электрона с проекцией m_1 момента ℓ_0 на ось z , P_m - означает перестановку m_1 у волновых функций, причем $(-1)^P$ равно $+1$, если перестановка четная, и -1 , если перестановка нечетная, откуда видно, что все m_1 должны быть разными. Коэффициент усиления для каждой $\psi_{(f)}^{m_1}$ определяется формулой (26 А), поэтому для всех электронов со спинами вдоль z получим:

$$R = \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{1}{2\ell+1} \left[\frac{\ell^2 - m^2}{2\ell-1} R_1 + \frac{(\ell+1)^2 - m^2}{2\ell+3} R_2 \right], \quad (12)$$

где R_1 и R_2 - коэффициенты усиления для переходов $\ell_0 \rightarrow \ell_0 - 1$ и $\ell_0 \rightarrow \ell_0 + 1$ соответственно. Так как R_2 для ^{63}Eu значительно меньше R_1 , то им можно пренебречь, и в результате получаем:

$$R = \frac{\ell}{3} R_1 = 1,8; \quad \vec{d} \text{ Eu} = 0,51 \text{ J d}_{\text{Eu}}. \quad (13)$$

Аналогично трехвалентный ион железа имеет конфигурацию d^3 , т.е. для него $R = \frac{2}{3} R_1 = 0,52$; $\vec{d}_{F_{3+}} = 0,21 \vec{d}_0$. В приложении В вычислен коэффициент усиления для иона u^{+8} с конфигурацией $5f^3 4f_{9/2}$. Для других ионов урана, где остается d -электрон, можно в принципе ждать большего усиления, но так как примесь d -электрона обычно приводит к большим угловым моментам, то большая величина R_1 для d -оболочки подавляется малыми коэффициентами Клебша-Гордона.

в) Поляризация кора. Когда на атом действует внешнее поле \vec{E} , внутренние оболочки атома поляризуются: $\vec{P} = a_c \vec{E}$, где a_c - поляризуемость кора. В результате поле, действующее на внешний электрон, уже не будет просто равно $\phi = E \vec{r}$, а изменится в соответствии с поляризацией внутренних оболочек. Если учесть поляризацию кора таким же образом, как это сделано у Сандарса ^{/1/}, то нетрудно прямо оценить, к каким изменениям это приведет в окончательном значении для ΔE . Действительно, учет поляризации кора означает, что поле \vec{E} нужно умножить на экранирующий множитель

$$\frac{a_c + (z-1)r^3}{z a_c + (z-1)r^3},$$

где a_c - поляризуемость кора, а z - заряд ядра. В результате в выражение (12 А) вместо метричного элемента $\langle 0 | \vec{E} \vec{r} | i \rangle$ войдет матричный элемент

$$\langle \langle \frac{a_c + (z-1)r^3}{z a_c + (z-1)r^3} \vec{E} \vec{r} | i \rangle \rangle.$$

Но т.к. определяющей областью для этого матричного элемента является область $r \sim 1$ а $z \gg 1$, то весь этот матричный элемент оказывается просто равным

$$\frac{1}{1 + a_c} \langle 0 | \vec{E} \vec{r} | i \rangle.$$

Судя по таблице, приведенной у Дальгарно ^{/9/}, поляризация кора у всех элементов горячка 1, т.е. видно, что учет поляризации кора не изменяет коэффициента усиления существенным образом.

4. Влияние кристаллического поля

Наконец, остановимся на влиянии кристаллического поля на э.д.м. атома. Это влияние проявляется двояким образом. Во-первых, к самосогласованному потенциалу добавляется потенциал кристаллической решетки. И, во-вторых, кристаллическая решетка искажает внешнее поле, действующее на данный атом. По поводу первого можно сказать следующее. Поскольку для э.д.м. атома важна область r порядка $1/z$ вблизи ядра данного атома, где кулоновский потенциал данного ядра равен z^2 , а потенциал от остальных атомов решетки пропорционален единице, то отсюда следует, что влияние кристаллического поля на э.д.м. атома в z^2 раз меньше влияния поля собственного ядра.

Теперь рассмотрим, как влияет кристаллическая решетка на искажение внешнего поля, действующего на атом. Для кубического кристалла это влияние хорошо известно и сводится к тому, что на каждый атом действует локальное поле:

$$E_{\text{лок}} = E_0 + \frac{4\pi}{3} P, \quad (15)$$

где E_0 - внешнее поле, а $\frac{4\pi}{3} P$ - лоренцево поле, обусловленное поляризацией вещества: $P = \alpha \cdot E_{\text{лок}}$, (α - поляризуемость). Если ввести диэлектрическую проницаемость $\epsilon = (1 + \frac{8\pi}{3} \alpha) / (1 - \frac{4\pi}{3} \alpha)$, то можно показать, что поле, действующее на данный атом, равно /10/

$$E_{\text{лок}} = \frac{\epsilon + 2}{3} E_0. \quad (16)$$

Если кристалл не кубический и состоит из элементов с различной поляризуемостью, то нужно сначала найти поляризацию атомов каждого элемента. Как показывает пример сегнетоэлектриков, действующее поле может значительно превышать приложенное поле, что, вообще говоря, только на руку эксперименту.

IV. Заключение

Автор приносит свою искреннюю благодарность Ф. Л. Шапиро за постановку задачи и постоянный интерес к ней, М. и В. Фурман за советы и практическую помощь, математикам Н. С. Бахвалову, С. К. Годунову, Е. П. Жидкову, И. Пузырину, А. И. Салтыкову, С. Сердюковой, И. Н. Силину и И. И. Шелопеву, которые охотно делились своим опытом, В. Ефимову, Е. Фурману и Л. Пономареву за то, что они взяли на себя труд прочесть рукопись, и за их ценные указания, а также Б. Васильеву, В. Колкунзову, Я. А. Смородинскому и Нгуену Ван Хьену за полезные обсуждения.

Приложение А

Электрический дипольный момент атома с одним неспаренным электроном

Уравнение Дирака в самосогласованном поле атома для электрона, имеющего э.д.м., можно записать в следующем виде:

$$\{ p_0 + a^2 u - \gamma_1 - a \gamma_0 (\vec{y} \vec{p}) + \xi a^2 \gamma_0 \vec{\Sigma} \vec{V} \} \psi = 0, \quad (1.A)$$

где $p_0 = 1 - a^2 E$; a - постоянная тонкой структуры; E - уровень энергии, измеряемый в единицах $a^2 m c^2$; u - самосогласованный потенциал, имеющий асимптотику в нуле $\frac{2}{r}$, а в бесконечности $u = 1/r$; $\vec{p} = -i \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$; все длины измеряются в единицах $\hbar/mc a$; $\gamma_0, \vec{\gamma}, \vec{\Sigma}$ - матрицы Дирака; ξ - константа, связанная с э.д.м. электрона следующим образом:

$$\vec{d}_0 = \xi \frac{e \hbar}{m c a} \vec{\Sigma}, \quad (2.A)$$

Уравнение (1.A) можно записать в более простом символическом виде:

$$\{ p_0 + a^2 \xi \gamma_0 \vec{\Sigma} \vec{V} \} \psi = 0, \quad (3.A)$$

если через L_D обозначить оператор $p_0 + \alpha^2 u - \gamma_0 - \alpha \gamma_0 (\vec{\sigma} \vec{p})$. В нерелятивистском пределе при $\alpha \rightarrow 0$ L_D переходит в $\alpha^2 L_{III}$, где

$L_{III} = -p^2/2 + u - E$, и уравнение (3.A) переходит в нерелятивистское уравнение

$$[L_{III} + \xi (\vec{\sigma} \vec{V} u)] \psi = 0, \quad (4.A)$$

Согласно теореме Шиффа взаимодействие э.д.м. электрона с полем можно в первом порядке по ξ исключить из уравнения (4.A). Это легко сделать с помощью преобразования

$$\psi = e^{\xi \vec{\sigma} \vec{V}} \psi', \quad (5.A)$$

если записать взаимодействие в виде коммутатора:

$$\xi (\vec{\sigma} \vec{V} u) = \xi (\vec{\sigma} \vec{V}, u) - \xi (\vec{\sigma} \vec{V}, L_{III}) - \quad (6.A)$$

В релятивистском уравнении (1.A) удобно тоже сделать преобразование, аналогичное (5.A), чтобы привести уравнение к такому виду, который в нерелятивистском пределе уже не содержит взаимодействия э.д.м. с полем в первом порядке по ξ . Таким преобразованием может быть следующее:

$$\psi = e^{\xi \vec{\Sigma} \vec{V}} \psi'. \quad (7.A)$$

Оно позволяет переписать уравнение (1.A) в более подходящей форме:

$$[L_D + \xi \alpha^2 (\gamma_0 - 1) (\vec{\Sigma} \vec{V} u)] \psi = 0, \quad (8.A)$$

Чтобы при переходе к нерелятивистскому пределу всё же не потерять взаимодействия э.д.м. с полем в первом порядке по ξ , необходимо в получающемся уравнении Шредингера сохранить релятивистские поправки, пропорциональные α^2 :

$$\left[L_{\text{ш}} + \frac{\alpha^2}{4} \bar{\sigma}_p (1 - E) \sigma_p - \frac{\xi \alpha^2}{2} \bar{\sigma}_p (\bar{\sigma} \nabla_{\text{ш}, u}) - \bar{\sigma}_p \right] \psi = 0, \quad (9.A)$$

При наличии внешнего поля \vec{E} уравнения (8.A) и (9.A) обретут члены, пропорциональные \vec{E} .

$$\left[L_D + \alpha^2 \vec{E} \vec{r} + (\alpha^2 (\gamma_0 - 1) \vec{\Sigma} \nabla_u + \xi \alpha^2 (\gamma_0 - 1) \vec{\Sigma} \vec{E}) \right] \psi = 0, \quad (10.A)$$

$$\begin{aligned} & \left[L_{\text{ш}} + \vec{E} \vec{r} + \frac{\alpha^2}{4} \bar{\sigma}_p (u - E) \bar{\sigma}_p + \frac{\alpha^2}{4} \bar{\sigma}_p (\vec{E} \vec{r}) \bar{\sigma}_p - \right. \\ & \left. - \xi \frac{\alpha^2}{2} \bar{\sigma}_p (\bar{\sigma} \nabla_{\text{ш}, u}) - \bar{\sigma}_p - \xi \frac{\alpha^2}{2} \bar{\sigma}_p \left[\vec{E} \frac{p^2}{2} \right] \right] \psi = 0. \end{aligned} \quad (11.A)$$

Обозначим невозмущенные волновые функции через ψ_0 , а соответствующие им уровни энергии через E_0 . нас будет интересовать сдвиг уровня ΔE , пропорциональный \vec{E} , т.к. дипольный момент атома определяется через производную $\vec{J}_n = - \frac{\partial \Delta E}{\partial \vec{E}}$. В низшем порядке по ξ и α^2 этот сдвиг ΔE в релятивистском и нерелятивистском случае равен:

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{рел.}} = & -\xi \langle 1 | | \gamma_0 - 1 | \vec{\Sigma} \vec{E} | 0 \rangle + \\ & + 2 \sum_1 \frac{\langle 0 | \vec{E} \vec{r} | 1 \rangle \langle 1 | (\gamma_0 - 1) \vec{\Sigma} \nabla_u | 0 \rangle}{E_1 - E_0}, \end{aligned} \quad (12.A)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{нерел.}} = & -\xi \alpha^2 \left[\frac{1}{2} \langle 0 | \bar{\sigma} \vec{E} \frac{p^2}{2} | 0 \rangle + \right. \\ & \left. + 2 \sum_1 \frac{\langle 0 | \vec{E} \vec{r} | 1 \rangle \langle 1 | \frac{p^2}{2} u \bar{\sigma} \nabla - \bar{\sigma} \nabla u \frac{p^2}{2} | 0 \rangle}{E_1 - E_0} \right], \end{aligned} \quad (13.A)$$

где $|0\rangle$ означает невозмущенное состояние, а $|i\rangle$ - возбужденные состояния. Если учесть, что $\frac{p^2}{2}|i\rangle = (u - E_i)|i\rangle$ и что $\sum_i |i\rangle\langle i| = 1$, то выражение для $\Delta E_{\text{нерел.}}$ переписывается в следующем виде:

$$\Delta E_{\text{нерел.}} = -\xi \alpha^2 \left[\frac{1}{2} \langle 0 | \vec{\sigma} \cdot \vec{\sigma} (u - E_0) | 0 \rangle + \frac{1}{2} \langle 0 | (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_u, \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_u) | 0 \rangle + \right. \\ \left. + 2 \sum_i \frac{\langle 0 | \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_u | i \rangle \langle i | E_0 (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_u) - (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_u)^2 | 0 \rangle}{E_i - E_0} \right]. \quad (14.A)$$

Это выражение несколько отличается от того, которое приведено у Стандарса ^{11/}:

$$\Delta E_{\text{нерел.}} = 2\xi \alpha^2 \sum_i \frac{\langle 0 | \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_u | i \rangle \langle i | (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_u)^2 | 0 \rangle}{E_i - E_0}. \quad (15.A)$$

Однако, как показано в приложении Б, добавочные члены малы, поэтому ими можно пренебречь. Точно так же можно пренебречь первым слагаемым в формуле (11.A), т.е. принять, что

$$\Delta E_{\text{рел.}} = -2\xi \sum_i \frac{\langle 0 | \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_u | i \rangle \langle i | (y_0 - 1) \sum \vec{\nabla}_u | 0 \rangle}{E_i - E_0}. \quad (16.A)$$

Для конкретного расчета на электронно-вычислительной машине выражения (15.A) и (16.A) нужно переписать иначе:

$$\Delta E_{\text{рел.}} = -2\xi \int \bar{\psi}_0 (y_0 - 1) (\sum \vec{\nabla}_u) \psi_0 d^3 r, \quad (17.A)$$

$$\Delta E_{\text{нерел.}} = 2\xi\alpha^2 \int \bar{\psi}_0^{\vec{\sigma}} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} u^2) \psi_0 d^3r, \quad (18.A)$$

где

$$\bar{\psi}_0 = \sum_i \frac{|i\rangle \langle i| \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} |0\rangle}{E_i - E_0} \frac{1}{L} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} \psi_0. \quad (19.A)$$

Причем в релятивистском случае ψ_0 и $\bar{\psi}_0$ - релятивистские функции и $L = L_D / \alpha^2$, а в нерелятивистском пределе ψ_0 и $\bar{\psi}_0$ - нерелятивистские функции и $L = L_{\text{ш}}$. Если волновые функции ψ_0 являются собственными функциями полного момента, т.е.

$$\psi_0^{\text{рел.}} = \begin{pmatrix} -\frac{g_{j\ell}(r)}{r} \Omega_{j\ell m} \\ \frac{f_{j\ell}(r)}{r} \Omega_{j\ell' m} \end{pmatrix}, \quad (20.A)$$

$$\psi_0^{\text{нерел.}} = \frac{1}{r} R_{j\ell}(r) \Omega_{j\ell m}$$

(где $\Omega_{j\ell m}$ - шаровые спиноры, а $g_{j\ell}$, $f_{j\ell}$ и $R_{j\ell}$ - радиальные части волновых функций), то в выражениях (17.A) и (18.A) можно произвести интегрирование по углам и в результате окажется, что:

$$\Delta E_{\text{рел.}} = 2\xi \frac{j}{j(j+1)} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} \int_0^\infty f_{j\ell'}(r) \left(\frac{d}{dr} u \right) f_{j\ell}(r) dr, \quad (21.A)$$

$$\Delta E_{\text{нерел.}} = \xi\alpha^2 \frac{j}{j(j+1)} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} \int_0^\infty R_{j\ell'} \left(\frac{d}{dr} u^2 \right) R_{j\ell}(r) dr, \quad (22.A)$$

где j означает полный момент, а $\vec{l}_{j\ell'}$ и $\vec{R}_{j\ell'}$ связаны следующим образом с $\vec{\psi}_0$:

$$\frac{1}{|\vec{\xi}|} \vec{\psi}_0 \text{ рел.} = \left(\begin{array}{c} -\frac{i}{r} \gamma_{j\ell'} \Omega_{j\ell'm} \\ \frac{1}{r} \Gamma_{j\ell'} \Omega_{j\ell'm} \end{array} \right) \quad (23A)$$

$$\frac{1}{|\vec{\xi}|} \vec{\psi}_0 \text{ нерел.} = \vec{R}_{j\ell'} \Omega_{j\ell'm} .$$

В частности, $\vec{R}_{j\ell'}$ подчиняется уравнению

$$\left[\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell'(\ell'+1)}{2r^2} + u(r) - E_0 \right] \vec{R}_{j\ell'} = r R_{j\ell'}(r), \quad (24A)$$

В сложном атоме, однако, нельзя считать, что электрон обладает определенным моментом \vec{j} , в частности, если осуществляется расщепление-сваундеровская связь, то следует волновую функцию электрона взять в виде

$$\psi_0 = \Pi_{\ell} Y_{\ell}^m \chi^{\mu}, \quad (25A)$$

где Y_{ℓ}^m - сферическая функция, а χ^{μ} - спинор. Тогда ΔE нерел. после интегрирования по угловым переменным окажется равным:

$$\Delta E \text{ нерел.} = \frac{2\xi}{2\ell+1} \left[\frac{\ell^2 - m^2}{2\ell - 1} R_1 + \frac{(\ell+1)^2 - m^2}{2\ell + 3} R_2 \right] \mu \xi, \quad (26A)$$

где

$$R_i = 2(z\alpha)^2 \int_0^{\infty} \text{Re}_{\ell} \left[\frac{d}{dr} \left(\frac{v}{r} \right)^2 \right] \Pi_{\ell} dr \quad (i=1,2), \quad (27A)$$

R_{l_1} подчиняются уравнению (24.A) с $l' = l_1 = l - 1$ и $l' = l_2 = l + 1$ для $i = 1, 2$ соответственно, а $\frac{v}{r}$ связано с u следующим образом:

$$u = \frac{z \cdot v}{r} \quad (28.A)$$

R_{l_1} и R_{l_2} называются в тексте "коэффициентами усиления". Как видно из формулы (27.A), фактическим параметром, по которому производится разложение, является не a^2 , а $(za)^2$. Поэтому (27.A) справедлива при $(za)^2 \ll 1$.

Приложение Б

Есть два способа оценить величину э.д.м. атома в точной релятивистской теории и в нерелятивистской. Первый способ основывается на квазиклассических оценках; а второй - на кулоновском приближении (что под этим понимается, будет сказано ниже).

Итак, рассмотрим оба способа.

1. Квазиклассические оценки

Квазиклассические оценки позволяют получить приближенную зависимость коэффициента усиления от z . Мы рассмотрим как нерелятивистский, так и релятивистский случай.

а) Нерелятивистское приближение. В нерелятивистском приближении э.д.м. атома определяются выражением (14.A). Максимальный вклад в это выражение дает член (15.A), содержащий матричный элемент $\langle 1 | (\vec{a} \cdot \vec{\nabla} + u^2) | 0 \rangle$. Действительно, наиболее существенной областью для этого матричного элемента является область малых r порядка $1/k$, где заряд ядра еще не экранирован, и поэтому u можно взять в чисто кулоновском виде: $u = \frac{z}{r}$. Т.к. квазиклассические волновые функции вблизи ядра пропорциональны $1/\sqrt{r}$, то величина рассматриваемого матричного элемента оказывается пропорциональной

$$\langle i | \alpha \nabla^2 \left(\frac{r}{r} \right)^2 | 0 \rangle \approx \sqrt{z} z^{\Delta} \sqrt{z} \frac{1}{z^3} = z^{\Delta}. \quad (1.Б)$$

Далее, матричный элемент $\langle 0 | \xi \nabla^2 | i \rangle$ пропорционален единице, т.к. для него существенна область $r \sim 1$, где ядро экранировано уже полностью, и квазиклассические волновые функции пропорциональны 1. Если еще учесть, что уровни энергии для внешних электронов тоже пропорциональны единице, то оценить величину выражения (15.А) уже не составит никакого труда:

$$\Delta E_{\text{керон}} \sim \xi \xi \alpha^2 z^{\Delta}. \quad (2.Б)$$

Все остальные члены в выражении (14.А) дают в z^{-1} , z^{-2} или в z^{-3} раз меньший вклад по сравнению с (2.Б), т.к. содержат матричные элементы от менее сингулярных операторов.

6) Релятивистское приближение. Оценку релятивистского выражения тоже можно произвести методами квазиклассики.

Рассмотрим систему уравнений Дирака для радиальных функций:

$$\alpha \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) f + (p_0 - 1 + a^2 u) g = 0, \quad (3.Б)$$

$$\alpha \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) g - (p_0 + 1 + a^2 u) f = 0,$$

где $\kappa = \pm (j + 1/2)$, j — полный момент, g/r и f/r — радиальные части соответственно больших и малых компонент шпировского спинора. Обозначим $p_0 - 1 + a^2 u = T_-$, $p_0 + 1 + a^2 u = T_+$ и перепишем систему (3.Б) в виде двух уравнений 2-го порядка — отдельно для функций g и f :

$$\left\{ T_+ \frac{d}{dr} \frac{1}{T_+} \frac{d}{dr} + \frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} - T_+ \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_+} \right) \right\} g = 0,$$

$$\left\{ T_- \frac{d}{dr} \frac{1}{T_-} \frac{d}{dr} + \frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} + T_- \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_-} \right) \right\} f = 0. \quad (4.Б)$$

В этих уравнениях удобно сделать преобразование [12]:

$$g_{\pm} = \int T_{\pm} dr, \quad g(r) = g(r(t_{\pm})),$$

$$f(r) = f(r(t_{\pm})). \quad (5.Б)$$

После чего они примут вид:

$$\frac{d^2}{dt_+^2} g + \frac{1}{T_+^2} \left[\frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} - T_+ \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_+} \right) \right] g = 0,$$

$$\frac{d^2}{dt_-^2} f + \frac{1}{T_-^2} \left[\frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} + T_- \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_-} \right) \right] f = 0. \quad (6.Б)$$

Решение уравнений типа $\frac{d^2 y}{dt^2} + Q(t)y = 0$ легко находится в квазиклассическом приближении:

$$y = \frac{1}{|Q|^{1/4}} \exp(i \int \sqrt{|Q|} dt). \quad (7.Б)$$

Откуда видно, что амплитуды волновых функций g/r и f/r пропорциональны:

$$\frac{g}{r} \approx \frac{\sqrt{T_+}}{r \left[\frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} - 1 + \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_+} \right) \right]^{1/2}}, \quad (8.Б)$$

$$\left[T_+ \frac{d}{dr} \frac{1}{T_+} \frac{d}{dr} + \frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} - T_+ \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_+} \right) \right] g = 0,$$

$$\left[T_- \frac{d}{dr} \frac{1}{T_-} \frac{d}{dr} + \frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} + T_- \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_-} \right) \right] f = 0, \quad (4.Б)$$

В этих уравнениях удобно сделать преобразование [12]:

$$t_{\pm} = \int T_{\pm} dr, \quad g(r) = g(r(t_{\pm})),$$

$$f(r) = f(r(t_{\pm})), \quad (5.Б)$$

После чего они примут вид:

$$\frac{d^2}{dt_+^2} g + \frac{1}{T_+^2} \left[\frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} - T_+ \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_+} \right) \right] g = 0,$$

$$\frac{d^2}{dt_-^2} f + \frac{1}{T_-^2} \left[\frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} + T_- \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_-} \right) \right] f = 0. \quad (6.Б)$$

Решение уравнений типа $\frac{d^2 y}{dt^2} + Q(t)y = 0$ легко находится в квазиклассическом приближении:

$$y = \frac{1}{|Q|^{1/4}} e^{\pm i \int \sqrt{Q(t)} dt}. \quad (7.Б)$$

Откуда видно, что амплитуды волновых функций g/r и f/r пропорциональны:

$$\frac{g}{r} \approx \frac{\sqrt{T_+}}{r \left[\frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} - T_+ \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} \frac{1}{T_+} \right) \right]^{1/4}}, \quad (8.Б)$$

$$\frac{i}{r} = \frac{\sqrt{T_-}}{r \left[\frac{T_+ T_-}{a^2} - \frac{\kappa^2}{r^2} + T_- \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa}{r} - \frac{1}{T_-} \right) \right]^{1/2}} \quad (8.Б)$$

Вспоминая определение T_- и T_+ и учитывая, что $p_0 = 1 - a^2 E$, где E — уровень энергии, который для внешних электронов по порядку величины равен 1, получим, что в области $r \approx 1/z$

$$\frac{1}{r} \approx 1 \approx z^{3/2} a. \quad (9.Б)$$

Отсюда, аналогично нерелятивистскому случаю, видно, что первый член (12.А) пропорционален a^2 , тогда как второй — $z^3 a^2$, т.е. в z^3 раз больше. К сожалению, эти оценки оказываются очень заниженными, т.к. численные расчеты дают зависимость z^4 , поэтому интересно произвести оценки и с несколько иной точки зрения.

2. Кулоновское приближение

Под кулоновским приближением здесь понимается следующее: все матричные элементы от сингулярных операторов нужно вычислять с кулоновскими функциями, определенными в поле ядра с зарядом z , т.к. для этих матричных элементов существенна область r вблизи ядра, где заряд еще не экранирован. Для несингулярных матричных элементов следует брать кулоновские функции, определенные в поле ядра с зарядом 1, т.к. для этих матричных элементов существенна область $r \approx 1$, где ядро уже полностью экранировано остальными электронами.

а) Нерелятивистское приближение. В безразмерных единицах $\rho = zr$, кулоновская волновая функция пропорциональна $\psi_0(r) = z^{3/2} P_0(\rho)$. Таким образом, матричный элемент $\langle i | \left(\frac{d}{dr} \right)^2 | 0 \rangle$ оказывается пропорциональным:

$$\int \psi_0 \frac{d}{dr} \left(\frac{\kappa v}{r} \right)^2 \psi_1 d^3 r = z^3 z^3 \frac{1}{z^3} \int P_0(\rho) \frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{\rho} \right)^2 P_1(\rho) d^3 \rho = z^5. \quad (10.Б)$$

И поэтому все выражение (15.A) оказывается пропорциональным z^5 . С помощью таких же рассуждений, как и в 1 а), можно показать, что вкладом в дипольный момент атома от тех членов (14.A), которые не вошли в (15.A), можно пренебречь.

б) Релятивистское приближение. Радиальная функция малых компонент дираковского спинора в безразмерных единицах $\rho = z r$ равна

$$\frac{1}{r} f_{j\ell}(r) = z a z^{j/2} f_{j\ell}(\rho).$$

Таким образом $\Delta E_{\text{рел.}}$ оказывается пропорциональной $z^5 a^3$.

Итак, кулоновское приближение дает завышенную оценку. Это происходит потому, что уровень энергии в кулоновских функциях пропорционален z^2 , тогда как на самом деле он пропорционален единице. Точные численные расчеты показывают, что э.д.м. атома пропорционально z^4 , таким образом, ни квазиклассическое, ни кулоновское приближение не дают правильной оценки. Однако оба подхода указывают на существование усиления и на быстрый рост усиления э.д.м. электрона в атоме с ростом атомного номера.

Приложение В

Ниже будет рассмотрена конфигурация $f^3 4d_{9/2}$, которая, например, встречается у трехвалентного иона ^{92}U . Будем считать, что волновые функции ионов не отличаются от волновых функций нейтральных атомов.

Построим сначала волновую функцию 3-х электронов с максимальной проекцией $M_L = 6$:

$$\psi_6^6 = \Gamma(-1)^4 [\psi_3^3(1) \psi_3^2(2) \psi_3^1(3)] = \psi^{321} \quad (1B)$$

где $\psi_3^m(\mathbf{r})$ означает волновую функцию $3s$ -электрона с проекцией m . В дальнейшем мы будем считать, что полная волновая функция антисимметризована по номерам электронов и спин у них настроены параллельно.

Функцию ψ_6^M можно получить путем применения L_+ (1В) оператора L_+ :

$$\psi_6^{M-1} = \frac{1}{\sqrt{(L+M)(L-M+1)}} L_+ \psi_6^M. \quad (2.B)$$

Но $L_+ = \sum \hat{L}_+$, которые, в свою очередь, действуют на одночастичные функции.

Приведем все волновые функции ψ_6^M , а также L_+ коэффициент N_1^M, N_2^M для каждого данного M . При этом ограничимся только N_2 , так как N_1 значительно меньше, чем N_2 .

N_2^M, N_1^M	ψ_6^M	
$\frac{13}{35}$	ψ_6^5	$\psi^{(4)}$
$\frac{4}{35}$	ψ_6^4	$\sqrt{5} \psi^{(2)}$
$\frac{163}{395}$	ψ_6^3	$\frac{1}{\sqrt{11}} (\sqrt{5} \psi^{(2,1)} + \sqrt{7} \psi^{(1,1)})$
$\frac{34}{77}$	ψ_6^2	$\frac{1}{\sqrt{11}} (2\sqrt{2} \psi^{(3,1)} + \sqrt{2} \psi^{(2,2)} + \psi^{(2,1)})$
$\frac{5}{11}$	ψ_6^1	$\frac{1}{\sqrt{33}} (3 \psi^{(2,1)} + 2\sqrt{2} \psi^{(1,1)} + \sqrt{15} \psi^{(3,1)} + \psi^{(2,2)})$
$\frac{178}{385}$	ψ_6^0	$\frac{1}{\sqrt{66}} (\sqrt{15} \psi^{(2,0)} + 3\sqrt{2} \psi^{(1,1)} + 5 \psi^{(3,0)} + 2\sqrt{2} \psi^{(2,1)})$
$\frac{184}{393}$	ψ_6^0	$\frac{1}{\sqrt{462}} (5 \psi^{(4,0)} + 16 \psi^{(3,0)} + 9 \psi^{(2,2)} + 5\sqrt{2} \psi^{(2,1)} + 5\sqrt{3} \psi^{(3,1)})$

Теперь нужно сложить угловой момент со спином 3/2, чтобы получить минимальное $l = \frac{9}{2}$. Рассмотрим только проекцию $M_j = \frac{9}{2}$.

Обозначим спиновую функцию $\xi_{3/2}^M$. Это полностью симметричный спинор третьего ранга. По нему нужно усреднять матрицы σ_i . При этом получается:

$$\langle \xi_{3/2}^{3/2} | \sigma_{z_1} | \xi_{3/2}^{3/2} \rangle = 1; \quad \langle \xi_{3/2}^{3/2} | \sigma_{x_1} | \xi_{3/2}^{3/2} \rangle = -\frac{1}{3},$$

$$\langle \xi_{3/2}^{-3/2} | \sigma_{z_1} | \xi_{3/2}^{-3/2} \rangle = -1; \quad \langle \xi_{3/2}^{-3/2} | \sigma_{x_1} | \xi_{3/2}^{-3/2} \rangle = -\frac{1}{3}.$$

Обозначим волновую функцию с моментом $J = 9/2$ через Ψ^M , а d_z — через $d_z^0 \sigma_z$, тогда:

$$\Psi^M = \sum_{\mu} C(9/2, 6, 3/2 | M, m, \mu) \psi_6^m \xi_{3/2}^{\mu}, \quad (3.B)$$

$$\begin{aligned} \frac{d_z^0 \Psi^M}{R_1} &= \frac{1}{d_0 R_1} \langle \Psi^M | d_z | \Psi^M \rangle = \\ &= \frac{1}{d_0 R_1} \sum_{\mu} C^2(9/2, 6, 3/2 | M, m, \mu) \langle \psi_6^m | d_z^0 | \psi_6^m \rangle \langle \xi_{3/2}^{\mu} | \sigma_z | \xi_{3/2}^{\mu} \rangle. \quad (4.B) \end{aligned}$$

Подстановка численных значений дает:

$$\frac{d_z^0}{R_1} = -0.3. \quad (5.B)$$

Но так как дипольный момент атома с заданным значением J можно представить как

$$\vec{d} \approx d_n \vec{J} , \quad (6B)$$

то для d_n , исходя из (5B), можно получить:

$$d_n \approx 0,07 R d_0 . \quad (7B)$$

для U^{34}

$$d_n \approx 0,6 d_0 .$$

Л и т е р а т у р а

1. P.G.H. Sanders, Phys Lett, 22, 299 (1966).
2. P.G.H.Sanders, Phys. Lett., 14, 194 (1965).
3. N.S. Stein, J.P. Curricio, E. Lipworth, M.C. Weiskopf, Phys.Rev. Lett., 13, 731 (1967).
4. R.I. Porosco, A. Wornick, IEEE Intern. Conf. Record, 13, 20 (1966).
5. E. Herrman and S. Skillman, Atomic Structure Calculations. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.Y. (1965).
6. R.M.S. Sternheimer, Revs. Rev., 12, 149 (1965).
7. C.H. Townes, Handbuch der Physik, XXVII/1 (1963).
8. R.L. Mössbauer and M.I. Grosses, Hyperfine Interactions Academic Press, New-York-London (1965).
9. I.E. Salpeter, Phys. Rev., 112, 1643 (1957).
10. A. Dalgaard, Advances in Physics, 11, 281 (1965).
11. Ч. Киттон, Введение в физику твердого тела. Гостехиздат, М., 1957.
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика. Физматгиз, М., 1968.
13. Л. И. Новиков, Лекции по квантовой механике, Препринт, ИФФ-67-53, Киев, 1968.

13. P.G.H. Sandars. I. Phys. B (Proc. Phys. Soc.) /2/ 1, 511 (1968).
14. S. Cohen. Preprint UCRL-8734 (1959);
S. Cohen. Preprint UCRL-8633 — UCRL-8635 (1959).

Рукопись поступила в издательский отдел
5 ноября 1968 года.