

8/IV-74
СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



СЗ41.1з
И-265

P4 - 7695

1382/2-74

В.К.Игнатович, Ю.М.Останевич, Ц.Пантелеев

ИЗОМЕРНЫЙ СДВИГ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛИНИЙ

1974

ЛАБОРАТОРИЯ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7695

В.К.Игнатович, Ю.М.Останевич, Ц.Пантелеев

ИЗОМЕРНЫЙ СДВИГ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛИНИЙ

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Игнатович В.К., Останевич Ю.М., Пантелеев Ц.

P4 - 7695

Изомерный сдвиг рентгеновских линий

Рассмотрена возможность измерения деформации ядра при его возбуждении по сдвигу рентгеновских линий атомов. На основании численных расчетов, имеющихся в литературе, оценена величина ожидаемого эффекта.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна, 1974

Ignatovich V.K., Ostonevich Yu.M.,
Panteleev Ts.

P4 - 7695

Isomeric Shift of X-Ray Lines

The possibility of measuring nuclear deformation under excitation by means of atomic X-ray line shift is considered. The value of the expected effect is estimated with the help of the numerical data published.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1974

ВВЕДЕНИЕ

Монопольное электрическое взаимодействие ядра с атомными электронами, обусловленное конечными размерами ядра и проникновением в него электронной волновой функции, приводит к изменению энергии атомных уровней на

$$\Delta E = \frac{2}{3} \pi e^2 Z |\Psi(0)|^2 \langle R^2 \rangle, \quad /1/$$

где $\langle R^2 \rangle$ - среднеквадратичный радиус распределения заряда ядра, а $|\Psi(0)|^2$ - внутриядерная плотность волновой функции электронов. В этой записи $\Psi(r)$ предполагается постоянной в области ядра.

Взаимодействие, описываемое выражением /1/, проявляется в том, что энергии атомных переходов, сопровождаемые изменением $\Delta |\Psi(0)|^2$, зависят от $\langle R^2 \rangle$. При изменении среднеквадратичного радиуса на $\Delta \langle R^2 \rangle$ энергия перехода смещается на величину

$$\delta(\Delta E) = \frac{2}{3} \pi e^2 Z \cdot \Delta |\Psi(0)|^2 \Delta \langle R^2 \rangle. \quad /2/$$

Этим фактом обусловлено изотопическое смещение оптических линий тяжелых элементов, которое было рассмотрено более 40 лет тому назад /1/. При таком смещении $\langle R^2 \rangle$ меняется при переходе от изотопа к изотопу за счет изменения числа нейтронов в ядре. Изменение $\langle R^2 \rangle$, обусловленное возбуждением ядра, приводит к так называемому изомерному сдвигу.

Изомерный сдвиг оптических линий впервые исследовался в 1958 году /2/. Однако эти исследования не получили большого развития, т.к. соответствующий сдвиг наблюдается только, если время жизни ядерных уровней $\tau_{\text{яд}}$ значительно больше времени жизни возбужденной электронной оболочки $\tau_{\text{эл}}$, т.е.

$$\tau_{\text{яд}} > \tau_{\text{эл}} \quad /3/$$

Очевидно, при нарушении этого требования возбужденное состояние ядра "разрядится" быстрее, чем электронная оболочка, и соответствующий электронный переход не даст информации о возбужденном состоянии ядра. Условие /3/, таким образом, ограничивает диапазон наблюдений теми уровнями ядер, которые имеют времена жизни $\tau_{\text{яд}} \geq 10^{-7}$ сек, т.е. подавляющее большинство ядерных уровней оказывается "вне игры". Кроме того, трудность наблюдения оптических изомерных переходов состоит в том, что для получения спектральных линий приемлемой интенсивности необходимо иметь достаточное число возбужденных ядер. Процесс накопления возбужденных ядер также требует времени, в связи с чем при современном уровне техники оптические исследования изомерного сдвига возможны лишь при $\tau_{\text{яд}} \geq 1$ сек /3/.

Измерения $\Delta \langle R^2 \rangle$, обусловленного ядерными возбуждениями, в настоящее время выполняются с помощью ЯГР-спектроскопии и, в отдельных случаях, - с помощью μ -мезоатомной спектроскопии /4/. Эти методы уже позволили получить обширную информацию, однако лишь небольшая часть экспериментальных данных к настоящему времени подвергнута адекватному теоретическому анализу /5/. Отчасти такое положение обусловлено ограниченностью экспериментальных возможностей и, как следствие, бессистемностью имеющих результаты. Поэтому поиск иных путей измерения $\Delta \langle R^2 \rangle$ при возбуждении ядер нам представляется оправданным. В работе /6/ нами было показано, что прецизионная нейтронная спектроскопия позволяет измерить $\Delta \langle R^2 \rangle$ для уровней, возбуждаемых при захвате нейтрона, т.е. для уровней с энергией 7 - 9 МэВ. В этой работе мы

обсудим возможности измерения $\Delta \langle R^2 \rangle$ для широкого класса уровней с помощью прецизионной рентгеновской спектроскопии.

2. ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Сущность предлагаемого эксперимента состоит в том, чтобы наблюдать разность между энергиями рентгеновских K_{α} -линий у атомов с возбужденным и невозбужденным ядром. Время жизни электронной "дырки" в 1s-оболочке составляет $10^{-16} - 10^{-17}$ сек /7/, поэтому область доступных для наблюдения ядерных уровней оказывается значительно шире, чем в случае измерения изомерного сдвига оптических линий. Для типичных ядерных уровней с временем жизни $10^{-10} - 10^{-14}$ сек рентгеновский переход успевает сделать "моментальную фотографию" ядерного уровня, если "дырка" в 1s-состоянии образовалась одновременно с возбуждением ядерного уровня. Последнее условие реализуется по крайней мере в двух случаях: при К-захвате и при внутренней конверсии, приводящих к возбуждению исследуемого ядерного уровня.

Для выделения рентгеновских квантов, испущенных, пока ядро находилось в возбужденном состоянии, необходимо применение техники совпадений рентгеновского кванта с предшествующим или последующим ядерным излучением, свидетельствующим о возбуждении уровня. Измерение "реперной" энергии рентгеновского кванта, испускаемого с невозбужденным ядром, может быть выполнено стандартными методами. Возвращаясь к формуле /2/ для сдвига спектральной линии, заметим, что в обсуждаемой постановке реализуется самое большое $\Delta |\Psi(0)|^2$; достижимое с помощью электронов, что, с одной стороны, позволяет ожидать сравнительно больших энергетических сдвигов, с другой - рассчитывать на достаточную надежность теоретических оценок $\Delta |\Psi(0)|^2$. Эти моменты обсуждаются в следующем разделе.

3. ОЦЕНКИ ОЖИДАЕМОГО СДВИГА

Чтобы оценить величину изомерного сдвига рентгеновской линии, необходимо найти плотность К-электронов в области, занимаемой ядром. Сегодня не существует абсолютно строгого решения этой задачи, справедливого для тяжелых ядер, где существенны релятивистские эффекты. Вместе с тем именно для тяжелых ядер изменение электронной плотности при рентгеновском переходе - наибольшее. В связи с этим мы воспроизведем некоторые из существующих схем расчета и соответствующие им результаты. Для дальнейшего удобно формулу /2/ представить в виде:

$$\delta E = \Delta E \frac{\delta \langle R^2 \rangle}{\langle R^2 \rangle}, \quad /4/$$

где ΔE - сдвиг энергии рентгеновской линии, обусловленный конечными размерами ядра, с учетом того, что $\Delta |\Psi(0)|^2 = |\Psi(0)|^2$. В электростатическом приближении, учитывающем только кулоновское взаимодействие "жесткого" ядра с не менее "жесткой" электронной плотностью, ΔE легко находится из выражения:

$$\Delta E = Z e^2 \int_{\text{эл}} \rho_{\text{эл}}(r) \left[\frac{1}{r} - \int_{\text{яд}} \rho_{\text{яд}}(r') \cdot \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \right] d^3 r. \quad /5/$$

Здесь заряды К-электрона $\int \rho_{\text{эл}} dV$ и ядра $\int \rho_{\text{яд}} dV$ нормированы на единицу. Для оценок далее будем считать, что ядро - равномерно заряженный шар с радиусом $R_{\text{яд}} = 1,2 A^{1/3} \cdot 10^{-13} \text{ см}$ /схемы расчетов, учитывающих поляризационные эффекты, обсуждаются, например, в /4/.

А. Водородоподобный атом, нерелятивистский случай

Волновая функция К-электрона имеет вид:

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{2Zr}{a_0}}, \quad /6/$$

где $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ - радиус первой боровской орбиты атома водорода. Вычисление по /5/ дает:

$$\Delta E = 87,07 \cdot Z^4 \left(\frac{R_{\text{яд}}}{a_0} \right)^2 / \text{эВ}. \quad /7/$$

В случае ${}^{238}_{92}\text{U}$ $\Delta E = 123 \text{ эВ}$. Оценка заведомо приближенная, ибо не учитываются как релятивистские эффекты, так и эффекты экранировки. Впрочем, эти два эффекта в известной степени друг друга компенсируют.

Б. Релятивистский водородоподобный атом

Плотность заряда К-электрона в области ядра имеет вид:

$$\rho_{\text{эл}}(r) = \frac{2(1+\lambda)}{\Gamma^2(1+2\lambda)} \left(\frac{2Zr}{a} \right)^{2(\lambda-1)} \cdot |\Psi(0)|^2 \quad /8/$$

и, соответственно,

$$\Delta E_{\text{рел.}} = \frac{24(1+\lambda) Z^2 a^2 m c^2}{\lambda(2\lambda+1)(2\lambda+3) \Gamma^2(1+2\lambda)} \left(\frac{2ZR_{\text{яд}}}{a_0} \right)^{2\lambda} /9/$$

где $\lambda = \sqrt{1 - Z^2 a^2}$, Γ - гамма-функция Эйлера, $\Psi(0)$ определено в /6/. Изменению радиуса ядра соответствует энергетический сдвиг

$$\delta E = \lambda \cdot \Delta E_{\text{рел.}} \frac{\delta \langle R^2 \rangle}{\langle R^2 \rangle}. \quad /10/$$

Для ${}^{238}_{92}\text{U}$ $\Delta E = \lambda \cdot \Delta E_{\text{рел.}} = 2240 \text{ эВ}$.

Этот результат, очевидно, может послужить верхней оценкой ожидаемых сдвигов, т.к. учет экранировки в многоэлектронном атоме приводит к уменьшению плотности электронов на ядре. Эти два случая исчерпывают аналитические решения задачи о нахождении $|\Psi(0)|^2$ /8/.

В. Численные расчеты

В настоящее время опубликованы исчерпывающие таблицы нерелятивистских волновых функций для всех элементов периодической системы ^{/9/}, рассчитанные по методу Хартри-Фока с обменным потенциалом, взятым в приближенном виде, предложенном Слэттером. Имеются также таблицы нерелятивистских волновых функций ^{/10/} для всех элементов вплоть до $Z = 86$, рассчитанные строго по схеме Хартри-Фока. Кроме того, нерелятивистскую плотность $1s$ -электронов на ядре Pu можно извлечь из работы ^{/11/}, где расчеты также проводились методом Хартри-Фока.

Релятивистские расчеты, из которых можно получить волновую функцию $1s$ -электрона на ядре, выполнены в ^{/12/} для ядер W, Pt, U , в ^{/13/} для Np и в ^{/14/} для элементов с $Z \leq 64$. Необходимо отметить, что в ^{/12/} вычисления полностью исключали обмен, т.е. проводились по схеме Хартри и предполагали ядро точечным. Вычисления в ^{/13/} наиболее удовлетворительны. Они проводились с учетом конечного размера ядра и по методу Хартри-Фока с точным учетом обменного взаимодействия. В работе ^{/14/} также учитывались конечные размеры ядра, но при расчете по методу Хартри-Фока обменное взаимодействие бралось в приближенном слэттеровском виде.

Для того чтобы получить представление о величине ожидаемого эффекта и надежности различных схем расчетов, нами на основе цитированных работ были вычислены значения ΔE для нескольких элементов. Полученные результаты представлены в табл. 1 и на рис. 1. При использовании нерелятивистских данных результирующие значения ΔE , приведенные в таблице и на рисунке, получались умножением на фактор S' , который состоит из двух множителей ^{/8/}. Первый, по сути дела, - отношение выражений ^{/10/}, полученных с помощью релятивистской и нерелятивистской водородоподобной функций, и для ⁹²U составляет, например, величину, равную 18,2. Второй множитель учитывает изменение волновой функции при переходе от точечного ядра к ядру конечных размеров.

Помимо влияния различных приближений, заложенных

Таблица 1

Значения ΔE для некоторых ядер, полученные разными методами приближенных расчетов

Тип расчета	Ядро		127 I		140 Ce		157 Gd		184 W		195 Pt		238 U		237 Np		242 Pu		Символ на рис. 1	Литература
	53	82	58	82	64	82	74	82	78	82	92	93	94	92	93	94	94	94		
$E_{нрфс}$	2,17	2,77	3,83	7,46	7,46	21,43	32,28	137,28	149,85	166,38									△	/9/
$E_{нрф}$	а) 2,77	б) 2,77	4,98	9,89	9,89	29,23	44,53			239,61									× ◇	/11/ /10/
$E_{рфс}$	а) 2,55	б) 2,55	4,53	8,81	8,81										174				■ ◆	/14/ /13/
$E_{рхт}$						29,26	44,33	207,00											□	/12/
$E_{в}$	8,93		13,67	21,87	21,87	43,44	55,76	123,26	128,40	135,85									+	

$E_{нрфс}$ - нерелятивистские расчеты методом Хартри-Фока-Слэттера, умноженные на релятивистский коэффициент S' ,

$E_{нрф}$ - нерелятивистские расчеты методом Хартри-Фока, умноженные на релятивистский коэффициент S' ,

$E_{рфс}$ - релятивистские расчеты методом Хартри-Фока-Слэттера с учетом конечных размеров ядра.

$E_{рхт}$ - релятивистские расчеты методом Хартри, ядро точечное.

$E_{в}$ - нерелятивистские расчеты по формуле водородоподобного атома.

в соответствующие схемы расчета, оценка ΔE может быть завышена на небольшую величину за счет смещения уровней энергии наружных электронов при изменении радиуса ядра /например, для K_{α_2} -линий необходимо учитывать не только смещения $1s$ -уровней, но и $2p_{1/2}$ -уровней. Однако поправка этого рода для K -линий не превышает 1% и поэтому нами не учитывается.

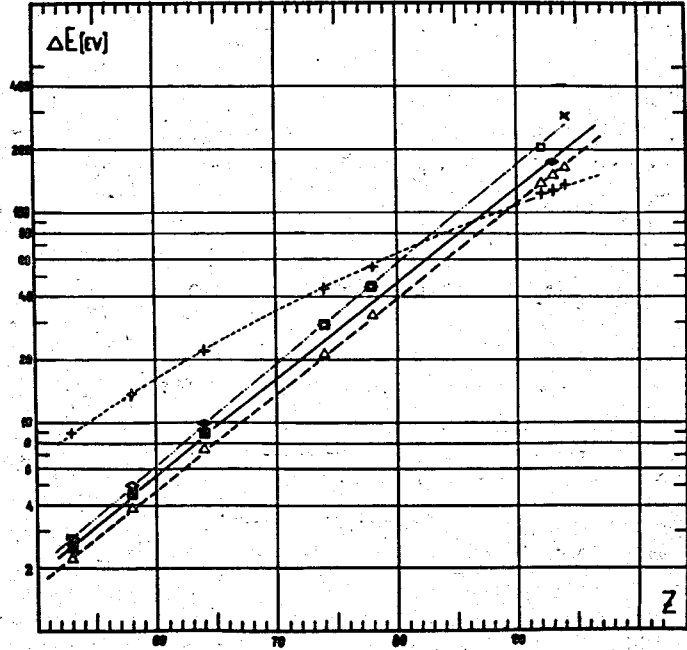


Рис. 1

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Возможность измерения обсуждаемого сдвига в конечном счете зависит от двух факторов: точности измерения малых сдвигов рентгеновских линий и величины $(\delta \langle R^2 \rangle) / \langle R^2 \rangle$. Современная техника измерения малых сдвигов, применяемая для исследования химического сдвига рентгеновских линий, позволяет обнаружить сдвиг

Таблица 2

Тип эксперимента	Область энергий возбуждения	Область Z, A	Ограничения по спину и времени жизни возб. состояния	Область исслед. $\delta \langle R^2 \rangle / \langle R^2 \rangle$
ЯПР	< 150 кэВ	$Z \geq 19$	$10^{-10} \leq \tau \leq 10^{-5}$ сек	$10^{-3} + 10^{-4}$
μ -мезоатомы	70 кэВ - 3 МэВ	избирательно $Z \geq 60$	$S = S_0 \pm (0,1,2)$	
нейтронные резонансы	$E \approx E$ связи (7-9 МэВ)	$Z \geq 50$ $A = A$ стаб +1	$\tau < 10^{-7}$ сек $S = S_0 \pm 1/2$	$\geq 10^{-5}$ $\geq 10^{-1}$ при $Z=50$ $\geq 10^{-3}$ при $Z=90$
изомерный сдвиг оптич. линий	любые	$Z > 50$	$\tau > 1$ сек	$\geq 10^{-3}$
изомерный сдвиг рентгеновских линий	≤ 1 МэВ	$Z \geq 50$	$\tau > 10^{-16}$ сек	$\geq 10^{-1}$ при $Z \approx 50$ $\geq 10^{-3}$ при $Z \approx 90$

линии на $\approx 0,1$ эВ ^{15/}. Величина $(\delta\langle R^2 \rangle) / (\langle R^2 \rangle)$ существенно зависит от характера деформации ядра при возбуждении. Типичные значения $\delta\langle R^2 \rangle / \langle R^2 \rangle$ для первых возбужденных уровней, наблюдаемые с помощью ЯГР-спектроскопии, находятся в пределах $10^{-3} \div 10^{-4}$ /4, 16, 17/. Однако в ряде случаев эта величина может достигать и значений $\approx 10^{-1}$ /6/. Для $\delta\langle R^2 \rangle / \langle R^2 \rangle = 10^{-1}$ изучать изомерный сдвиг рентгеновских линий вполне возможно, уже начиная с $Z = 50$. В области делящихся ядер возможно изучение деформаций с $\delta\langle R^2 \rangle / \langle R^2 \rangle \geq 10^{-3}$. Заметим также, что рентгеновский аналог оптического изотопического сдвига с $\delta\langle R^2 \rangle / \langle R^2 \rangle = 2/3 \cdot 1/A \approx 3 \cdot 10^{-3}$ уже был предметом экспериментального изучения для ядер с $60 \leq Z \leq 82$ /18/.

Таким образом, современные экспериментальные возможности позволяют считать обсуждаемый эксперимент вполне осуществимым, хотя и потребуются ряд технических усложнений. В заключение нам представляется интересным сравнить возможности всех известных схем измерения изомерного сдвига.

Как видно из табл. 2, каждая постановка эксперимента обладает своими достоинствами и своими ограничениями, причем области применимости перекрываются лишь в незначительной степени. Это позволяет считать, что обсуждаемый эксперимент не только осуществим, но и целесообразен, поскольку появляется возможность систематических исследований $\Delta\langle R^2 \rangle$ с малым числом ограничений.

Литература

1. I.E. Rosenthal and G. Breit. *Phys. Rev.*, 41, 459 (1932) and 42, 348 (1932).
 Подробную историю вопроса см. G. Breit. *Rev. Mod. Phys.*, 30, 507 (1958).
2. P. Вайнер. *ЖЭТФ*, 35, 284 /1958/.
3. I. Bonn, G. Huber, H. I. Kluge, U. Köpf, L. Kugler, E. W. Otten, I. Rodriguez. *J. Phys. Soc. Japan*, 34, Suppl., 317 (1973).
4. G. M. Kalvius. In "Hyperfine Interactions in Excited Nuclei". Gordon and Brech, New-York, London, Paris (1971), v. 2, p. 523, H. Backe, R. Engfer, U. Jahnke, E. Kankleit, K. H. Lindenberger, C. Petitjean,

- H. Schenewly, W. U. Schroder, H. K. Walter, K. Wien, *ibid.*, p. 723.
5. J. Meyer and J. Spetch. *J. Phys. Soc. Jap.*, 34, Suppl., 569 (1973).
 M. Sano and M. Wakai, *ibid.*, p. 581.
6. В. К. Игнатович, Ю. М. Останевич, Л. Чер. Сообщение ОИЯИ, Р4-7296, Дубна, 1973.
7. Э. Е. Берлович, С. С. Василенко, Ю. Н. Новиков. "Времена жизни возбужденных состояний атомных ядер". Наука, Л., 1972.
8. D. A. Shirley. *Rev. Mod. Phys.*, 36, 339 (1969).
9. F. Herman, S. Skillman. "Atomic Structure Calculations" Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1963.
10. C. Froese Fisher. *Atomic Data @ 4*, 312 (1972); *Atomic and Nuclear Data Tables*, 12, 87 (1973).
11. M. Wilson. *Phys. Rev.*, 176, 58 (1968).
12. S. Cohen. UCRL 8633-8635 (1959).
13. B. D. Dunlap et al. "Hyperfine Interactions in Excited Nuclei". Proceedings of the Conf. on Hyperfine Interactions, Detected by Nuclear Radiations, held at Rehovoth and Jerusalem in 1970. Ed. by G. Golding and R. Kalish, v. 2, p. 709, Gordon and Brech, New-York, a. o. 1971.
14. И. М. Банд, М. Б. Тржасковская. Препринт ЛФТИ, 367, Ленинград, 1971.
15. В. И. Марушенко, Л. А. Попеко, А. И. Смирнов. Препринт ЛФТИ, 387, Ленинград /1972/.
16. H. K. Walter, H. Backe, R. Engfer, E. Kankleit, C. Petitjean, H. Schenewly and W. U. Schroder. *Phys. Lett.*, 38B, 64 (1972).
17. E. Kankleit. *J. Phys. Soc. Jap.*, 34, Suppl., 553 (1973).
18. P. L. S. Lee. *California Inst. Technol. Pasadena, USA, Thesis* (1972).

Рукопись поступила в издательский отдел
 24 января 1974 года.