Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 3 — 1963

Н. Н. КОЛЕСНИКОВ, Ю. П. ГРИГОРЬЕВ

К ТЕОРИИ ИЗОТОПИЧЕСКИХ СМЕЩЕНИЙ

Выводится уточненная релятивистская формула с учетом искажения электронных волновых функций для подсчета смещения электронного $nj = \left(l \pm \frac{1}{2}\right)$ уровня, возникающего за счет конечности размеров ядра при произвольных сферически-симметричных нуклонных плотностей, обрывающихся на конечных расстояниях. Результаты обобщаются на случай нуклонных плотностей, не обрывающихся на конечных расстояниях, а также не обладающих сферической симметрией.

Главной частью изотопического смещения электронных уровней средних и тяжелых элементов является эффект объема ядра, возникающий вследствие отклонения электронного поля реальных ядер от поля точечных частиц [1—2]. Элементарная нерелятивистская теория изотопического объемного эффекта была дана Бартлетом [3] и обобщена на релятивистский случай Рака [4], а также Брейтом и Розенталь [5]. Последние показали, что не учитывать релятивистские свойства электрона недопустимо при численной оценке объемного эффекта, так как это приводит к результатам, заниженным для тяжелых элементов более чем в 10 раз. Брох [6] и ряд других авторов [7] улучшили теорию путем приближенного учета искажения электронных волновых функций для случаев поверхностного и равномерно-объемного распределений заряда ядра. В дальнейшем были рассмотрены и некоторые другие виды протонных плотностей $\rho(r)$ [9—11]. Изотопические смещения чувствительны к изменению не только объемов ядер, но и их формы [12—16] и поэтому могут быть использованы для исследования эффективных размеров ядер [8—11] и параметров деформации β и γ [12—16], а также сжимаемости ядерного вещества [17]. Измерение изомерных смещений [18] дает ценный материал о свойствах возбужденных состояний ядер. Изотопическое и изомерное смещения представляют собой разностные эффекты и требуют для их надежной оценки уточненного расчета объемного эффекта. Последнее и явилось целью работы. При этом не рассматривались поправки, связанные с электромагнитной структурой самих нуклонов [1], вакуумными эффектами [20], поляризацией [21—22], сжимаемостью ядер [17] и т. д. [23].

Предположим, что взаимодействие внешнего электрона с другими не изменяет характера его волновой функции вблизи ядра, а изменяет лишь численное значение константы, характеризующей поведение волновой функции в нуле, благодаря чему можно свести многоэлектронную задачу к одноэлектронной [8, 9, 19].

Тогда, если $\rho(r)$ произвольно, но обрывается на расстояниях R_0, малых по сравнению с радиусом электронной орбиты, то при $r > R_0$ поле будет чисто кулоновским, и поэтому решение уравнения Дирака для радиальных функций χ_1 и χ_2 может быть выражено через функции Уиттекера $W_{k,m}$ [24] (см. приложение 1)

$$\chi_1(r) = D\xi^{-\frac{1}{2}}\{n!\,(n'+2\gamma)\,W_{n'+\gamma-\frac{1}{2},\gamma}(\xi) - (N-\varkappa)\,W_{n'+\gamma+\frac{1}{2},\gamma}(\xi)\},$$

$$\chi_2(r) = D\left(\frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\xi^{-\frac{1}{2}}\{n'(n'+2\gamma)\,W_{n'+\gamma-\frac{1}{2},\gamma}(\xi) + $$
$$+ (N-\varkappa)\,W_{n'+\gamma+\frac{1}{2},\gamma}(\xi)\Big\}, \qquad (1)$$

где

$$\xi = \frac{2Zr}{Na_0}, \quad \gamma = \sqrt{k^2-\alpha^2Z^2}, \quad N = \sqrt{n^2-2n'(k-\gamma)},$$

$$\varepsilon = \frac{E}{E_0} = \left\{1+\frac{\alpha^2Z^2}{(n'+\gamma)^2}\right\}^{-\frac{1}{2}}, \qquad (2)$$

$$\varkappa = \pm\left(l+\frac{1}{2}\right)-\frac{1}{2},$$

$$\text{для}\quad j = l\pm\frac{1}{2}, \quad k = |\varkappa|.$$

Главное квантовое число $n = n'+k$ становится целочисленным и равным n_0 лишь в случае точечных ядер. Тем не менее $\Delta n = n - n_0 \ll 1$ для всех реальных ядер, размеры которых малы по сравнению с радиусами электронных орбит. Поэтому внешние решения χ_1 и χ_2 при $r \ll a_0$ с большей степенью точности можно аппроксимировать с помощью асимптотических выражений для функций $W_{k,m}(\xi)$ (см. приложение (2, 1). Определив Δn из условия непрерывности отношения χ_1/χ_2, на границе внешней и внутренней областей получим, пользуясь (2), следующую формулу для вычисления смещения n, $j = \left(l\pm\frac{1}{2}\right)$ электронного уровня за счет конечности размеров ядра

$$\Delta E_{см^{-1}} = \frac{\alpha Z^2}{2\pi a_0}\cdot\frac{\varepsilon^3}{(n_0'+\gamma)^3}\Delta n \approx$$
$$\approx \frac{\alpha Z^2}{2\pi a_0}\cdot\frac{\varepsilon^3}{(n_0'+\gamma)^3}\cdot\frac{\Gamma(n_0'+2\gamma+1)}{\Gamma(2\gamma+1)\,\Gamma(2\gamma)\,\Gamma(n_0'+1)}\left(\frac{2ZR_0}{Na_0}\right)^{2\gamma}\times$$
$$\times\frac{\left\{(n_0'+k\pm N_0)-(n_0'-k\mp N_0)\cdot\left(\frac{1\pm\varepsilon}{1\mp\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}K^{\pm}(R_0)\right\}}{\left\{(n_0'+2\gamma+k\pm N_0)-(n_0'+2\gamma-k\mp N_0)\cdot\left(\frac{1\pm\varepsilon}{1\mp\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}K^{\pm}(R_0)\right\}}, \qquad (3)$$

где $K^{+}(\xi)$ обозначает отношение решений $\chi_1(\xi)$ и $\chi_2(\xi)$ для внутренней области ($r \ll R_0$) и $K^{-}(\xi) = [K^{+}(\xi)]^{-1}$.

Сравним выражение (3) с величиной объемного смещения nl' $(l'=k-1)$ уровня, вычисленного в нерелятивистском приближении по теории возмущений

$$\Delta E_H = \frac{1}{2\pi\hbar c}\int |\psi^H(\vec{r})|^2\left(V(r)+\frac{Ze^2}{r}\right)d^3r\ см^{-1}, \qquad (4)$$

где $\psi^H(\vec{r})$ — нерелятивистская волновая функция электрона. С помощью соотношения $\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}=\frac{1}{2\pi^2}\int\frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2}d^3k$ выражение для $V(r)=-Ze^2\times$ $\times\int\frac{\rho(r')\,d^3r'}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$ можно также переписать в виде

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}+4\pi Ze^2\sum_{q=1}^{\infty}\frac{\langle r^{2q}\rangle}{\Gamma(2q+2)}\nabla^{2q-2}\delta(\vec{r}), \qquad (5)$$

где

$$\langle r^{2q}\rangle=\int\rho(r)\,r^{2q}\,dv,\ (\langle r^{\circ}\rangle=1),$$

$$\delta(\vec{r})=(2\pi)^{-3}\int e^{i\vec{k}\vec{r}}\ d^3k.$$

Подставляя (5) в (4) и учитывая, что

$$\int f(\vec{r})\,\nabla^{2q-2}\,\delta(\vec{r})\,d^3r=\{\nabla^{2q-2}f(\vec{r})\}_{\vec{r}=0},$$

получаем

$$\Delta E_H = 2\alpha Z\sum_{q=1}^{\infty}\frac{\langle r^{2q}\rangle}{\Gamma(2q+2)}\{\nabla^{2q-2}|\psi^H(\vec{r})|^2\}_{\vec{r}=0}. \qquad (6)$$

В частности, если в (6) ограничиться главным членом суммы, то

$$\Delta E_H \approx 2\alpha Z\frac{\langle r^{2l'+2}\rangle}{\Gamma(2l'+4)}\{\nabla^{2l'}|\psi^H_{nl'}(\vec{r})|^2\}_{\vec{r}=0}, \qquad (7)$$

где [25]

$$\{\nabla^{2l'}|\psi^H_{nl'}(\vec{r})|^2\}_{\vec{r}=0}=\frac{\Gamma(n+l'+1)}{8\pi n\,\Gamma(n-l')\,\Gamma(2l'+2)}\cdot\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{2l'+3}.$$

В соответствии с (7) формула (3) перепишется следующим образом:

$$\Delta E\ см^{-1}=2\alpha Z\{\nabla^{2k-2}|\psi^H_{n,k-1}(\vec{r})|^2\}_{\vec{r}=0}\frac{\varepsilon^3 n_0^2}{(n_0'+\gamma)^3}\left(\frac{n_0}{N_0}\right)^{2k}\times$$

$$\times\left(\frac{2Z}{N_0a_0}\right)^{2(\gamma-k)}\frac{\Gamma(n_0^1+2\gamma+1)\,\Gamma(2k)}{\Gamma(2\gamma+1)\,\Gamma(2\gamma)\,\Gamma(n_0^1+2k)}\times$$

$$\times\frac{R_0^{2\gamma}\left\{(n_0'+k\pm N_0)-(n_0'-k\mp N_0)\left(\frac{1\pm\varepsilon}{1\mp\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}K^{\pm}(R_0)\right\}}{\left\{(n_0'+2\gamma+k\pm N_0)-(n_0'+2\gamma-k\mp N_0)\left(\frac{1\pm\varepsilon}{1\mp\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}K^{\pm}(R_0)\right\}}. \qquad (8)$$

Для нахождения $K^{\pm}(R_0)$ во внутренней области ($r \leqslant R_0$) целесообразно воспользоваться интегральным уравнением Роуза [26, 14] (см. приложение 3), которое удобно записать в следующей форме:

$$K^{\pm}(\xi_0) = K_{\mathrm{I}}^{\pm}(\xi_0) - \frac{R_0}{\alpha a_0}\int_0^1 [1 \pm \varepsilon \mp v(\nu)]\,[K^{\pm}(\nu)]^2\,\nu^{2k}\,d\nu, \tag{9}$$

где

$$K_{\mathrm{I}}^{\pm}(\xi_0) = \frac{(1 \mp \varepsilon)R_0}{(2k+1)\,\alpha a_0} \mp \frac{\alpha Z}{2k}\left[1 - \frac{\langle r^{2k}\rangle}{(2k+1)\,R_0^{2k}}\right],\quad \nu = \frac{r}{R_0}. \tag{10}$$

Уравнение (9) удобно решать методом последовательных приближений, причем уже первое приближение $K_{\mathrm{I}}^{\pm}(\xi)$ аппроксимирует для всех разумных видов $\rho(r)$ с ошибкой не более 5—6%. Быстрый характер сходимости приближений для случая поверхностного распределения заряда приведен в таблице.

Z	10	20	40	60	80	100	
A^*	20	42	88	146	200	260	
$\dfrac{K_2(\xi)-K_1(\xi)}{K_1(\xi)}$, %	$4{,}57\cdot10^{-2}$	0,168	0,637	1,39	2,44	3,8	$\varkappa = 1$
$\dfrac{K_3(\xi)-K_1(\xi)}{K_1(\xi)}$, %	$4{,}575\cdot10^{-2}$	0,169	0,647	1,431	2,563	4,1	
$\dfrac{K_\infty(\xi)-K_1(\xi)}{K_1(\xi)}$, %	$4{,}58\cdot10^{-2}$	0,17	0,65	1,44	2,57	4,17	
$\dfrac{K_2(\xi)-K_1(\xi)}{K_1(\xi)}$, %	$1{,}956\cdot10^{-2}$	0,0713	0,273	0,598	1,039	1,628	$\varkappa = 2$
$\dfrac{K_3(\xi)-K_1(\xi)}{K_1(\xi)}$, %	$1{,}956\cdot10$	0,0715	0,274	0,605	1,061	1,724	
$\dfrac{K_\infty(\xi)-K_1(\xi)}{K_1(\xi)}$, %	$1{,}96\cdot10^{-2}$	0,0716	0,275	0,606	1,062	1,73	

Используя первое приближение (10) для $K(\xi_0)$, получим при $\alpha^2Z^2 \ll 1$ для nS-состояний более простую, но менее точную формулу

$$\Delta E_{см-1} = \frac{2\alpha Z}{3}\,|\psi_H(0)|^2\,\langle r^2\rangle\,\frac{\Gamma(n_0' + 2\gamma + 1)\,(n_0^1 + 1)}{(n_0' + \gamma)\,(n_0' + \gamma + 1)\,\Gamma(2\gamma+1)\,\Gamma(2\gamma)\,\Gamma(n_0'+1)} \times$$

$$\times\left(\frac{2ZR_0}{Na_0}\right)^{2(\gamma-1)}\left\{1 + \frac{\alpha^2Z^2}{(n_0'+\gamma)^2}\right\}^{-\frac{3}{2}}, \tag{11}$$

в которой эффект ядерной структуры проявляется лишь через посредство квадратичного радиуса.

Для того чтобы распространить полученные результаты на случай $\rho(r)$, не обрывающихся на конечных расстояниях R_0, но быстро спадающих на расстояниях много меньших размеров электронных орбит, рассмотрим следующее вспомогательное распределение заряда $\rho_1(r)$:

$$\rho_1(r)=\begin{cases}\dfrac{\left(1-\lambda\int\limits_0^{R_0}\rho(r)\,d^3r\right)\delta(r-R_0)}{4\pi r^2} & \text{при } r\leqslant R_0,\\[2ex] 0 & \text{при } r>R_0\end{cases}$$

и подберем параметры λ и R_0 таким образом, чтобы

$$\langle r_1^2\rangle\equiv\int\rho_1(r)\,r^2\,d^3r=\int\rho(r)\,r^2\,d^3r\equiv\langle r^2\rangle$$

и

$$\langle r_1^4\rangle\equiv\int\rho_1(r)\,r^4\,d^3r=\int\rho(r)\,r^4\,d^3r\equiv\langle r^4\rangle,$$

причем $<r_1^0>=<r^0>=1$.

Вычислим смещение уровня δE при переходе от распределения $\rho_1(r)$ к $\rho(r)$, пользуясь теорией возмущений с электронными функциями $\psi_1(\vec{r})$, соответствующими распределению заряда ядра $\rho_1(\vec{r})$. Это дает аналогично (6)

$$\delta E=2\alpha Z\sum_{q=1}^{\infty}\frac{\langle r^{2q}\rangle-\langle r_1^{2q}\rangle}{\Gamma(2q+2)}\{\nabla^{2q-2}|\psi_1(\vec{z})|\}_{\vec{r}=0}. \quad (12)$$

Из формулы (12) следует, что с точностью до членов порядка не выше $\frac{<r^4>}{a_0^4}$ оба распределения приводят к одним и тем же результатам, ввиду чего вычисление объемного эффекта ядра с плотностью заряда $\rho(r)$, не обрывающейся на конечных расстояниях, сводится к вычислению по формуле (8) объемного эффекта для распределения $\rho_1(r)$, обрывающегося при $r=R_0$ с параметрами R_0 и λ, определяющимися соотношениями

$$(R_0^2-\langle r^2\rangle)\int\limits_0^{R_0}\rho(r)\cdot(R_0^4-r^4)\,d^3r=(R_0^4-\langle r^4\rangle)\int\limits_0^{R_0}\rho(r)\cdot(R_0^2-r^2)\,d^3r$$

и

$$\frac{1}{\lambda}=\int\limits_0^{R_0}\rho(r)\,\frac{(R_0^4-r^4)}{(R_0^4-\langle r^4\rangle)}\,d^3r.$$

Объемный эффект деформированных ядер зависит лишь от распределения заряда ρ по отношению к системе координат, неподвижной в пространстве. В частности, поэтому объемный эффект четно-четных ядер следует вычислять по тем же формулам (8) или (11), подставляя в них плотность заряда $\bar{\rho}$, усредненную по углам ориентации ядерной оси по отношению к оси, неподвижной в пространстве

$$\bar{\rho}(r)=\frac{1}{4\pi}\int\rho(\vec{r})\,d\Omega.$$ Так, если

$$\rho(\vec{r})=\begin{cases}\rho_0 & \text{при } r\leqslant r_0[1+\alpha_2P_2(\cos\theta)],\\ 0 & \text{при } r>r_0[1+\alpha_2P_2(\cos\theta)],\end{cases} \quad (13)$$

$$\bar{\rho}(r) = \begin{cases} \rho_0 & \text{при } r < m = r_0\left(1 - \dfrac{\alpha_2}{2}\right), \\ \rho_0\left[1 - \left(\dfrac{r-m}{M-m}\right)^{\frac{1}{2}}\right] & \text{при } m \leqslant r \leqslant M = r_0(1+\alpha_2), \\ 0 & \text{при } r > M. \end{cases}$$

Отсюда при $\alpha_2 \leqslant 1$

$$\langle r^{2q}\rangle = \int \bar{\rho}(r)\, r^{2q}\, d^3r \approx R_0^{2q}\, \frac{3}{2q+3} \times$$
$$\times \left\{1 + \frac{[(2q+2)(2q+1)-6]}{10}\alpha_2^2\right\},$$
$$\left(\int \bar{\rho}(r)\, d^3r = \frac{4\pi}{3} R_0^3\rho_0\right), \qquad (14)$$

где R_0 — радиус сферы равновеликого объема. В частности, для nS-уровней ($q=1$), $\langle r^2\rangle = \frac{3}{5} R_0^2(1+\alpha_2^2)$, а поэтому в соответствии с (11) эффект деформации приводит (по сравнению со сферически-симметричным ядром) к относительному увеличению объемного эффекта в $(1+\alpha_2^2)$ раз.

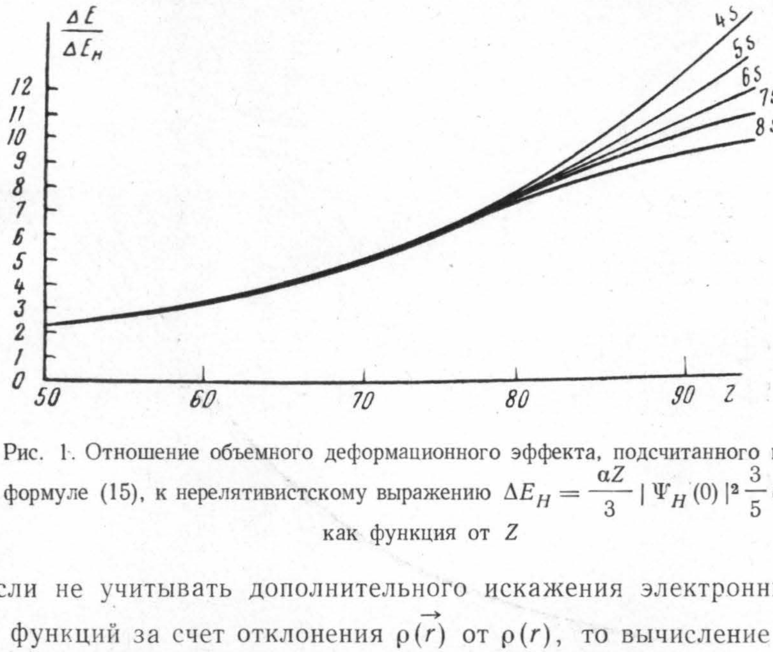

Рис. 1. Отношение объемного деформационного эффекта, подсчитанного по формуле (15), к нерелятивистскому выражению $\Delta E_H = \frac{\alpha Z}{3} \mid \Psi_H(0) \mid^2 \frac{3}{5} \alpha_2^2$ как функция от Z

Если не учитывать дополнительного искажения электронных волновых функций за счет отклонения $\rho(\vec{r})$ от $\rho(r)$, то вычисление объемного эффекта ядер, не являющихся четно-четными, также может быть произведено по формулам (8) и (11). Приведем результаты подсчета поправки к объемному эффекту равновеликого ядра с $\rho(r)$ вида (13) (по отношению к оси, неподвижной в пространстве)

$$\Delta E = \frac{\alpha_2^2 Z^2}{10} R_0^{2\gamma} \frac{4(n_0'+1)^2}{\alpha^2 Z^2} \left(\frac{2Z}{Na_0}\right)^{2\gamma+1} \times$$
$$\times \frac{\Gamma(2\gamma + n_0' + 1)}{\Gamma^2(2\gamma+1)\,\Gamma(n_0'+1)} \cdot \frac{(1-\varepsilon)}{4N_0(N_0 - \varkappa)}. \qquad (15)$$

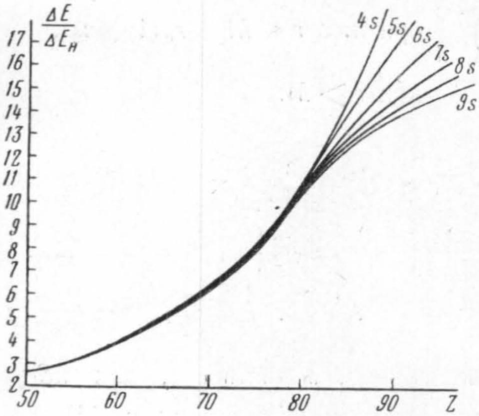

Рис. 2. Отношение ΔE, вычисленного по формуле (7), к ΔE_H для ns-состояний

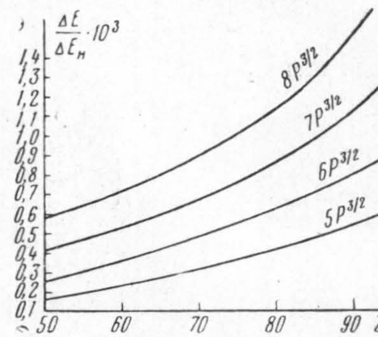

Рис. 4. Отношение ΔE, вычисленного по формуле (8) для np $^3/_2$-состояний, к ΔE_H (см. (7)) для ns-состояний

Рис. 3. Отношение ΔE, вычисленного по формуле (8) для состояний np $^1/_2$, к ΔE_H (см. 7) для ns-состояний

Формула (15) уточняет известную формулу Вилетса [13]: в ней учитывается искажение электронных волновых функций. Возникающие при этом поправки достаточно существенны для тяжелых ядер (рис. 1). На рис. 2, 3 и 4 с целью вычисления изотопических смещений приводятся результаты расчета объемных эффектов для ns $np^1/_2$ и $np^3/_2$ электронных уровней, производившиеся по формулам (8) и (9) в предположении равномерно-объемного распределения заряда.

Приложение 1. Решение уравнения Дирака для внешней области. Уравнение Дирака:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \{c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2 + v(r)\}\, \Psi(\vec{r}, t)$$

с помощью подстановки

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \begin{pmatrix} i\,\dfrac{\chi_2(r)}{r}\,\Omega_{jM}(l \pm 1) \\ \dfrac{\chi_1(r)}{r}\,\Omega_{jM}(l) \end{pmatrix},$$

где $\Omega_{jM}(l) = \sum\limits_{\mu} (l \tfrac{1}{2} M-\mu, \mu \mid jM)\, Y_{l, M-\mu}(\theta)\, \eta_\mu - \eta_\mu$ двухкомпонентная спиновая функция приводится к следующей системе уравнений для радиальных функций $\chi_1(r)$ и $\chi_2(r)$:

$$\frac{d\chi_1}{dr} = \frac{\varkappa}{r}\chi_1 + \frac{mc}{\hbar}\{1 - \varepsilon + v(r)\}\,\chi_2, \qquad (1,1)$$

$$\frac{d\lambda_2}{dr} = \frac{mc}{\hbar}\{1 + \varepsilon - v(r)\}\,\chi_1 - \frac{\varkappa}{r}\chi_2,$$

где

$$v(r) = \frac{V(r)}{mc^2}.$$

Если $V(r) = -\dfrac{ze^2}{r}$, то вводя обозначения

$$r = \frac{\hbar}{2mc}(1 - \varepsilon^2)^{-\frac{1}{2}}\xi,$$

$$\nu = \frac{\alpha Z}{2}\left[\left(\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} - 1\right], \quad N = \frac{\alpha Z}{2}\left[\frac{(1-\varepsilon)^{\frac{1}{2}}}{(1+\varepsilon)^{\frac{1}{2}}} + 1\right]$$

и полагая

$$\chi_1 = \left[\frac{\hbar}{mc(1+\varepsilon)\,\xi}\right]^{\frac{1}{2}} [\varphi_1(\xi) - \varphi_2(\xi)],$$

$$\chi_2 = \left[\frac{\hbar}{mc(1-\varepsilon)\,\xi}\right]^{\frac{1}{2}} [\varphi_1(\xi) + \varphi_2(\xi)], \qquad (1,2)$$

можно переписать систему (1,1) в следующей форме:

$$\xi\frac{d\varphi_1(\xi)}{d\xi} = \left\{\frac{\xi}{2} - \left(\nu - \frac{1}{2}\right)\right\}\varphi_1(\xi) + (N + \varkappa)\,\varphi_2(\xi),$$

$$\xi\frac{d\varphi_2(\xi)}{d\xi} = (N - \varkappa)\,\varphi_1(\xi) - \left\{\frac{\xi}{2} - \left(\nu - \frac{1}{2}\right)\right\}\varphi_2(\xi). \qquad (1,3)$$

Уравнение (1, 3) удовлетворяется при подстановке вместо $\varphi_1(\xi)$ и $\varphi_2(\xi)$ функций Уиттекера $W_{k,m}$:

$$\varphi_1(\xi) = D_1 W_{\nu - \frac{1}{2}, \gamma}(\xi), \tag{1,4}$$

$$\varphi_2(\xi) = D_2 W_{\nu + \frac{1}{2}, \gamma}(\xi),$$

если

$$\gamma^2 = \varkappa^2 - N^2 + \nu^2$$

и

$$\frac{D_1}{D_2} = \varkappa + N = \frac{\gamma^2 - \nu^2}{\varkappa + K}.$$

Учитывая соотношения (1,2) и (1,4), можно записать систему уравнений (1,1) в виде уравнения (1).

При целочисленных значениях $n = (n_0)$ решения $\chi_1(r)$ и $\chi_2(r)$ переходят в обычные решения уравнения Дирака для случая чисто кулоновского взаимодействия (от $r = 0$ до $r = \infty$); если положить нормировочную константу

$$D = \frac{Na_0}{2Z} \frac{\Gamma(-n_0' - 2\gamma)}{\Gamma(-2\gamma)} \frac{\sqrt{\Gamma(2\gamma + n' + 1)}}{\Gamma(2\gamma + 1)\sqrt{\Gamma(n' + 1)}} \sqrt{\frac{1 - \varepsilon}{4N(N - \varkappa)} \left(\frac{2z}{Na_0}\right)^{\frac{3}{2}}}.$$

Приложение 2. Асимптотическая формула для функций Уиттекера. Функция Уиттекера $W_{km}(\xi)$ является решением уравнения

$$\frac{d^2 W_{k,m}\xi}{d\xi^2} + \left\{\frac{1}{4} + \frac{k}{m} + \frac{\frac{1}{4} - m^2}{\xi^2}\right\} W_{k,m} = 0, \tag{2,1}$$

конечном при $\xi \to \infty$.

Решение уравнения (2,1) записывается в виде контурного интеграла [25]

$$W_{k,m}(\xi) = -\frac{\Gamma\left(k + \frac{1}{2} - m\right)}{2\pi j} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^k \int_C (-t)^{-k - \frac{1}{2} + m} e^{-t} \left(1 + \frac{t}{z}\right)^{k - \frac{1}{2} + m} dt, \tag{2,2}$$

где контур интегрирования c выходит из $+\infty$, и, обходя начало координат, возвращается в $+\infty$.

Разбивая контурный интеграл

$$\int_C (-t)^{-k - \frac{1}{2}m} \left(1 + \frac{t}{z}\right)^{k - \frac{1}{2}m} e^{-t}\, dt$$

на сумму трех интегралов, взятых в пределах от ρ до δ и от δ до ρ по окружности радиуса δ и устраняя неоднозначность в подынтегральной функции $(-t)^{-k - \frac{1}{2} + m}$ путем ее замены на $e^{\left(-k + m - \frac{1}{2}\right)\ln t}$, получаем

$$-e^{-i\pi\left(-k - \frac{1}{2} + m\right)} \int_\delta^\rho t^{-k - \frac{1}{2}m} \left(1 + \frac{t}{\xi}\right)^{k - \frac{1}{2} + m} e^{-t}\, dt +$$

$$+ e^{i\pi\left(-k - \frac{1}{2} + m\right)} \int_\delta^\rho t^{-k - \frac{1}{2} + m} \left(1 + \frac{t}{\xi}\right)^{k - \frac{1}{2} + m} e^{-t}\, dt -$$

$$- i\delta^{-k + \frac{1}{2} + m} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i\left(-k + \frac{1}{2} + m\right)\varphi} e^{\delta(\cos\varphi + i\sin\varphi)} \left(1 - \frac{\delta e^{i\varphi}}{\xi}\right)^{k - \frac{1}{2} + m} \delta\varphi, \tag{2,3}$$

где при интегрировании по окружности радиуса δ было положено $-t=\delta e^{i\varphi}$. Контур интегрирования c всегда можно выбрать таким образом, чтобы $\delta \ll |\xi|$ и обеспечить сходимость ряда

$$\sum_{q=0}^{\infty}(-1)^q \frac{\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(q+1)\,\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}-q\right)}\left(\frac{\delta e^{i\varphi}}{\xi}\right)^q=\left(1-\frac{\delta e^{i\varphi}}{z}\right)^{k-\frac{1}{2}+m},$$

а также положить $\rho=\infty$. При этом последний член в (2, 3) можно преобразовать следующим образом:

$$\sum_{q=0}^{\infty}(-1)^{q+1}\frac{\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(q+1)\,\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}-q\right)}\cdot\frac{i\delta^{-k+\frac{1}{2}+m+q}}{\xi q}\times$$

$$\times\int_{-\pi}^{\pi} e^{i\left(-k+\frac{1}{2}+m+q\right)\varphi}\,e^{\delta(\cos\varphi+i\sin\varphi)}\,d\varphi=$$

$$=\sum_{q=0}^{p}(-1)^{q+1}\frac{\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}\right)2i\sin\pi\left(-k+\frac{1}{2}+m+q\right)}{\Gamma(q+1)\,\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}-q\right)\xi q}\left[\Gamma\left(-k+\frac{1}{2}+m+q\right)-\right.$$

$$\left.-\int_{\delta}^{\infty} t^{-k-\frac{1}{2}+m+q}\,e^{-t}\,dt\right]+\sum_{q=p+1}^{\infty}(-1)^{q+1}\frac{\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(q+1)\,\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}-q\right)}\times$$

$$\times\frac{i\delta^{k+\frac{1}{2}+m+q}}{\xi q}\int_{-\pi}^{\pi} e^{i\left(-k+\frac{1}{2}+m+q\right)}\,e^{\delta(\cos\varphi+i\sin\varphi)}\,d\varphi. \qquad (2,\ 4)$$

В (2,4) мы воспользовались формулой [25]

$$-2i\sin\pi z\,\Gamma(z)=2i\sin\pi z\int_{\delta}^{\infty} t^{z-1}e^{-t}\,dt-i\delta^z\int_{-\pi}^{\pi} e^{iz\varphi+\delta(\cos\varphi+i\sin\varphi)}\,d\varphi$$

и положили $k-\frac{1}{2}-m\geqslant\rho>k-\frac{3}{2}-m$ (ρ — целочисленно).

При $\delta\to 0$ каждый из членов последней суммы в (2,4) исчезает, так как в ней $q\geqslant p+1$ и, следовательно, при $\delta\to 0$, $\rho\to\infty$ (2, 4) переходит в

$$\sum_{q=0}^{\infty}(-1)^{q+1}\frac{\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(q+1)\,\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}-q\right)}\,2i\sin\pi\left(-k+\frac{1}{2}+m+q\right)\times$$

$$\times\left[\Gamma\left(-k+\frac{1}{2}+m+q\right)-\int_{0}^{\infty} t^{-k-\frac{1}{2}+m+q}\,e^{-t}\,dt\right]. \qquad (2,5)$$

Для функций $W_{k,m}(\xi)$ при стремлении $\delta \to 0$ и $\rho \to \infty$ получаем в соответствии с (2,3) и (2,5) следующую интегральную формулу [11]:

$$W_{k,m}(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^k \left\{ \frac{1}{\Gamma\left(-k+\frac{1}{2}+m\right)} \int_0^\infty t^{-k-\frac{1}{2}+m} e^{-t}\, dt \times \right.$$

$$\times \left[\left(1+\frac{t}{\xi}\right)^{k-\frac{1}{2}+m} - \sum_{q=0}^{k-\frac{3}{2}-m<p\leqslant k-\frac{1}{2}-m} \frac{\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(q+1)\,\Gamma\left(k+m+\frac{1}{2}-q\right)\xi^q} t^q \right] +$$

$$+ \left[1 + \sum_{q=0}^{p} \frac{\left[m^2-\left(k-\frac{1}{2}\right)^2\right]\cdot\ldots\cdot\left[m^2-\left(k-q+\frac{1}{2}\right)^2\right]}{\Gamma(q+1)\,\xi^q} \right]. \qquad (2,6)$$

Из (2,6) автоматически получается интегральная формула для функций Уиттекера, справедливая для $-k-\frac{1}{2}+m>0$ (25), а также асимптотическая формула для больших ξ (25) (см. также [11]).

При нахождении асимптотической формулы для функций Уиттекера, справедливой для малых ξ, следует в (2,6) пренебречь всеми, кроме первого члена в первой квадратной скобке и последнего члена во второй квадратной скобке. Это дает

$$W_{k,m}(\xi \to 0) \approx \xi^{-m+\frac{1}{2}} \frac{\Gamma(2m)}{\Gamma(-p+\Delta n)} +$$

$$+ \frac{(-1)^p \xi^{m+\frac{1}{2}+\Delta n}}{\Gamma(p+1)} \cdot \frac{\Gamma(2m+p+1+\Delta n)}{\Gamma(2m+\Delta n+1)} \cdot \frac{\Gamma(p+1+\Delta n)}{\Gamma(1+\Delta n)}, \qquad (2,7)$$

где

$$\Delta m \equiv p' - p = k - \frac{1}{2} - m - p.$$

Предположим, что $\Delta n \leqslant 1$. Тогда

$$W_{k,m} \approx (-1)^p \xi^{m+\frac{1}{2}} \frac{\Gamma(2m+p+1)}{\Gamma(2m+1)} + (-1)^{p+1}\,\Gamma(p+1)\,\xi^{-m+\frac{1}{\xi}} \Delta n$$

$$(\Delta n \ll 1;\quad \xi \ll 1). \qquad (2,8)$$

При вычислении изотопических смещений для реальных ядер оказывается невозможным пренебречь ни одним из членов в (2,8). Оценки, произведенные для наименее благоприятного случая $z=100$ и $n=4$, при радиусе сшивания $R_0=10f$ показывают, что ошибки приближения (2,7) не превышают 1—2%. При вычислении изотопических смещений всех реальных ядер суммарная ошибка приближения (2,8) не больше 1,5—2,5% (обычно порядка нескольких десятых долей процента).

Приложение 3. Интегральные уравнения для функций $K^{\pm}(\xi)$. Функции $K^{\pm}(r)$, определенные в (10), удовлетворяют в соответствии с (1,1) уравнению

$$\frac{dK^{\pm}(\eta)}{d\eta} - \frac{2k}{\eta} K^{\pm}(\eta) = \frac{1}{2\alpha Z} \{(1 \mp \varepsilon \pm v) - (1 \pm \varepsilon \mp v)\,[K^{\pm}(\eta)]^2\}, \qquad (2,9)$$

где $\eta = \frac{2Zr}{a_0}$.

Умножив на интегральный множитель η^{2k} и проинтегрировав (2,9), получим интегральное уравнение

$$K^{\pm}(\eta) = \frac{\eta^{-2k}}{2\alpha z}\int\limits_0^{\eta}\{(1 \mp \varepsilon \pm v(\eta) - (1 \pm \varepsilon \mp v(\eta')[K^{\pm}(\eta')]^2 \eta'^{2k}\} d\eta', \qquad (3,0)$$

которое для всех разумных $p(r)$ с подстановкой $K^{\pm}(\eta)=0$ в правую часть (3,0) может решаться методом итераций. Сходимость итераций иллюстрируется в таблице для случая поверхностного распределения заряда, предполагая, что $R_0=1,2\ A^{*\,1/3}f$, где A^* — массовое число наиболее стабильного (при заданном Z) изотопа [11].

ЛИТЕРАТУРА

1. Foster E. Rep. on Prog. Phys., **14**, 288, 1951; Хилл Д. Строение атомного ядра. ИЛ, М., 1959; Стриганов А. Р., Донцов Ю. П. «Успехи физических наук», **56**, 1955.
2. Иваненко Д. Д., Соколов А. А. Квантовая теория поля; Соколов А. А. Введение в квантовую электродинамику.
3. Bartlett J. Nature, **128**, 408, 1931.
4. Racah G. Nature, **129**, 723, 1932.
5. Rosenthal J., Breit G. Phys. Rev., **41**, 459, 1932.
6. Broch E. Arch. Math og Naturwid., **48**, 1, 1945; Broch E. Arch. Math og Naturwid., **48**, 25, 1945.
7. Иваненко Д. Д., Цандер А. ЖЭТФ, **18**, 434, 1948; Смородинский Я. А. ЖЭТФ, **17**, 1035, 1947.
8. Crawford M., Schawlow A. Phys. Rev., **76**, 1310, 1949.
9. Humbach W. Zs. f. Phys., **133**, 589, 1952.
10. Bodmer A. Proc. Phys. Soc., **66A**, 1041, 1953; **21**, 347, 1960.
11. Колесников Н. Н. Диссертация. МГУ, 1955.
12. Brix P., Kopfermann H. Zs. f. Phys., **126**, 344, 1949; 133, 282, 1952; Festschrift Akad. Wiss. Gottingen, Mat.-Fys., **17**, 1951; Phys. Rev., **85**, 1050, 1952.
13. Wilets L., Hill D., Ford K. Phys. Rev., **91**, 1488, 1953; Ford K. W. Phys. Rev., **90**, 29, 1953.
14. Bodmer A. Proc. Phys. Soc., **47**, 622, 1945; Breit G. Rev. Mod. Phys., **30**, 507, 1958.
15. Rustgi M. L. Phys. Rev., **123**, 2110, 1961.
16. Гречухин Д. П. Nucl. Phys., **24**, 576, 1961.
17. Ionesco-Pallas N. J. Nuovo Cim., **15**, 323, 1960.
18. Weiner R. Phys. Rev., **114**, 256, 1956.
19. Layzez D. Ann. of Phys., **8**, 271, 1959; Jonesco-Pallas N. J. Progress Theor. Phys., **21**, 655, 1959.
20. Иваненко Д. Д., Колесников Н. Н. ДАН СССР, **91**, 47, 1953.
21. Breit G., Arfken G., Clendeni W. Phys. Rev., **78**, 390, 1950.
22. Cooper L. N., Henley E. Phys. Rev., **92**, 837, 1957.
23. Gottfried K. Nucl. Phys., **15**, 92, 1960.
24. Уиттекер Е., Ватсон Г. Курс современного анализа, т. II. ОНТИ, М. — Л., 1934.
25. Бете Г. Квантовая механика простейших систем. ОНТИ, М. — Л., 1935.
26. Rose M., Newton R. Phys. Rev., **82**, 470, 1951.

Поступила в редакцию
4. 6 1962 г.

Кафедра
электродинамики и квантовой
теории