Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1963

Л. А. БОРИСОГЛЕБСКИЙ

EO-КОНВЕРСИЯ НА ВЫСШИХ ОБОЛОЧКАХ АТОМА

Получены в приближении «точечного» ядра без учета экранирования общие формулы для абсолютной и для относительных вероятностей *EO*-конверсии, а также поправочные множители на конечность размеров ядер, пригодные для любых оболочек атома. Полуэмпирическим методом (путем использования экспериментальных значений энергии связи конверсионных электронов и параметров Слетэра) учтено экранирование. Произведено сравнение численных значений относительных вероятностей *EO*-конверсии, рассчитанных в указанном приближении, с более точными их значениями и результатами эксперимента.

В работах [1—8] исследовалась преимущественно электронная *EO*-конверсия на *K*- и *L*-оболочках. В отношении остальных оболочек авторы ограничивались приведением приближенных оценок относительной вероятности $\frac{L_1}{M_1}$ [1, 4]. В связи с обнаружением [9—10] *M*- и *N*-электронов конверсии при *EO*-переходах могут быть полезны более подробные исследования абсолютных и относительных вероятностей *EO*-конверсии на высших оболочках.

Абсолютная вероятность *EO*-конверсии электрона на любой подоболочке атома может быть представлена в виде [4—5]

$$W(E0) = \rho^2\Omega, \tag{1}$$

где

$$\rho = \sum_{p=1}^{Z} \int \Psi_f^* \left(\frac{r_p}{R}\right)^{2|\varkappa|} \Psi_i\, (d\vec{r}) \tag{2}$$

приведенный ядерный матричный элемент электрического монополя, определяемый волновыми функциями ядра в начальном i и конечном f состояниях Ψ_i и Ψ_f и теоретически вычисляемый на основе различных моделей атомных ядер, R — радиус ядра, $\varkappa = 2\lambda\left(j + \frac{1}{2}\right)$, $\lambda = \pm\frac{1}{2}$, $l = j + \lambda$, l и j — орбитальный и полный моменты электрона, суммирование производится по протонам, интегрирование по конфигурационному пространству ядерных нуклонов,

$$\Omega = \frac{\alpha^2\pi}{|\varkappa|(2|\varkappa| + 1)^2} (a_{j\lambda}^2)_i (a_{j\lambda}^2)_f R^{4|\varkappa|} \tag{3}$$

приведенная вероятность $E0$-конверсии, определяемая релятивистскими волновыми функциями электрона, зависящая от полной энергии ε связанного электрона, от атомного номера Z и энергии ядерного перехода k, α — постоянная тонкой структуры *. Постоянные $a_{j\lambda}$ — кулоновские амплитуды, получаемые путем сшивания электронных функций внутри и вне ядра при $r=R$, равные [11—12]

$$a_{j\lambda} = \left\{ \frac{G^{+}_{j\lambda}F^{-}_{j\lambda} - F^{+}_{j\lambda}G^{-}_{j\lambda}}{g_{j\lambda}F^{-}_{j\lambda} - f_{j\lambda}G^{-}_{j\lambda}} \right\}_{r=R}. \tag{5}$$

Без учета экранирования $F^{\pm}_{j\lambda}$, $G^{\pm}_{j\lambda}$ являются кулоновскими радиальными функциями, $\pm$ — соответствуют значениям параметра $\gamma = \pm \sqrt{\varkappa^2 - \alpha^2 Z^2}$, $f_{j\lambda}$ и $g_{j\lambda}$ — радиальные функции электрона внутри ядра, вид которых зависит от различных предположений о распределении заряда в ядре [4,12] (обычно предполагается равномерное распределение по объему [5,8]).

Вынося за скобки в (5) бо́льшие дираковские компоненты с $\gamma > 0$ ($G^{+}_{j\lambda}$ для $\varkappa < 0$, $F^{+}_{j\lambda}$ для $\varkappa > 0$), а остальное преобразуя с учетом условий $\alpha ZR \ll 1$ и $pR \ll 1$** и подставляя (4) в (3), получим:
для подоболочек с $\varkappa < 0$

$$\Omega_{-|\varkappa|} = \frac{\alpha^2 \pi R^4}{|\varkappa|(2|\varkappa|+1)^2} [G^{+}_{j\lambda=-\frac{1}{2}}(\varepsilon)\, G^{+}_{j\lambda=-\frac{1}{2}}(E)]^2_{r=R} \times$$
$$\times \left\{ \frac{(2\gamma)^2}{[(|\varkappa|+\gamma)\, g'_{j\lambda=-\frac{1}{2}}(\varepsilon) + \sqrt{\varkappa^2-\gamma^2}\, f'_{j\lambda=-\frac{1}{2}}(\varepsilon)]^2} \times \right. \tag{6}$$
$$\left. \times \frac{(2\gamma)^2}{[(|\varkappa|+\gamma)\, g'_{j\lambda=-\frac{1}{2}}(E) + \sqrt{\varkappa^2-\gamma^2}\, f'_{j\lambda=-\frac{1}{2}}(E)]^2} \right\}_{r=R},$$

для подоболочек с $\varkappa > 0$

$$\Omega_{+|\varkappa|} = \frac{\alpha^2 \pi R^4}{|\varkappa|(2|\varkappa|+1)^2} [F^{+}_{j\lambda=\frac{1}{2}}(\varepsilon)\, F^{+}_{j\lambda=\frac{1}{2}}(E)]^2_{r=R} \times$$
$$\times \left\{ \frac{(2\gamma)^2}{[(|\varkappa|+\gamma)\, f'_{j\lambda=\frac{1}{2}}(\varepsilon) - \sqrt{\varkappa^2-\gamma^2}\, g'_{j\lambda=\frac{1}{2}}(\varepsilon)]^2} \times \right. \tag{6'}$$
$$\left. \times \frac{(2\gamma)^2}{[(|\varkappa|+\gamma)\, f'_{j\lambda=\frac{1}{2}}(E) - \sqrt{\varkappa^2-\gamma^2}\, g'_{j\lambda=\frac{1}{2}}(E)]^2} \right\}_{r=R},$$

---

* Все величины берутся в релятивистских единицах. В теории Дирака

$$\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{\left(1 + \frac{\alpha Z}{n'+\gamma}\right)^2}}, \tag{4}$$

здесь n — главное квантовое число, $\gamma = \sqrt{\varkappa^2 - \alpha^2 Z^2}$, $n' = n - |\varkappa|$.

** p — импульс конверсионного электрона в конечном состоянии сплошного спектра, равный $\sqrt{E^2 - 1}$, где E — полная энергия электрона в этом состоянии. Условие $pR \ll 1$ при $R = 0{,}426\alpha A^{\frac{1}{3}}$ [14] равносильно условию $E \ll 2\alpha^{-1} A^{-\frac{1}{3}}$. Если учесть, что $E = \varepsilon + k$ и ε мало отличается от единицы, то должно быть также $k \ll 2\alpha^{-1} A^{-\frac{1}{3}}$ (для U^{238}, например, $k \ll 50$). Условие $\alpha ZR \ll 1$ выполняется практически для всех Z и A.

а аргументы ε и E указывают на принадлежность радиальных функций к дискретному и сплошному спектру энергий электрона. Выражения (6—6′) без фигурных скобок дают нам приведенную вероятность электронной EO-конверсии в так называемом приближении «точечного» ядра [4]. В этом случае радиальная функция внутри ядра считается постоянной на всем протяжении области, занимаемой ядром, и равна значению бо́льшего кулоновского радиального компонента на его поверхности. Множители в фигурных скобках в (6) и (6′) (будем обозначать их через $B^{\mp}{}_{|\varkappa|}$) являются поправками на конечность размеров ядер. Как показывают исследования, эти поправочные множители будут одинаковы (при одинаковых γ, $|\varkappa|$ и n) *, если будут выполняться неравенства

$$|V| \gg E + 1, \tag{7}$$

или

$$\varepsilon + 1 \ll |V| \ll k, \tag{8}$$

где V — потенциальная энергия электрона внутри ядра, равная по порядку величины $|V| \simeq 2ZA^{-\frac{1}{3}}$ (при равномерном распределении заряда по объему или по поверхности ядра), так как тогда

$$g_{j\lambda=-\frac{1}{2}} \simeq f_{j\lambda=\frac{1}{2}}, \quad f_{j\lambda=-\frac{1}{2}} \simeq -g_{j\lambda=\frac{1}{2}} \tag{9}$$

как для связанных, так и для свободных состояний электрона. В этом случае относительная вероятность EO-конверсии электронов с одинаковым квантовым числом j (с одинаковым абсолютным значением $\varkappa$), принадлежащих одной и той же оболочке, не зависит от конечных размеров ядер. Условие (8) трудносовместимо с условием $pR \ll 1$. При выполнении же условия (7) указанные поправочные множители $B^{\mp}{}_{|\varkappa|}$ не только одинаковы, но вследствие равенств

$$f_{j\lambda}(\varepsilon) \simeq f_{j\lambda}(E), \quad g_{j\lambda}(\varepsilon) \simeq g_{j\lambda}(E) \tag{10}$$

принимают более простой вид:

$$B_{\mp|\varkappa|} = \left[\frac{2\gamma}{(|\varkappa| + \gamma)\, g'_{j\lambda=-\frac{1}{2}} + \sqrt{\varkappa^2 - \gamma^2}\, f'_{j\lambda=-\frac{1}{2}}}\right]^4_{r=R} \tag{11}$$

и относительная вероятность EO-конверсии электронов с одинаковым j уже не будет зависеть от конечных размеров ядер даже в том случае, когда электроны принадлежат различным оболочкам атома **.

---

* n принимает значения 1—6 для K- и P-оболочек атома.

** Следует отметить, что условие (7) выполняется для достаточно больших Z, а для достаточно больших k и малых Z оно может и не выполняться. Так, для Ca^{40}, энергия EO-перехода которого $k=6{,}7$ [10], E будет составлять примерно 50% от $|V|$. Если $|V|$ сравнимо с E, но удовлетворяет частично условию (8) — неравенству $|V| \gg \varepsilon+1$, то поправочный множитель на конечность размеров ядер для относительной вероятности имеет вид

$$\frac{B_{-|\varkappa|}}{B_{+|\varkappa|}} = \left[\frac{(|\varkappa| + \gamma) f'_{j\lambda=\frac{1}{2}}(E) - \sqrt{\varkappa^2 - \gamma^2}\, g'_{j\lambda=\frac{1}{2}}(E)}{(|\varkappa| + \gamma) g'_{j\lambda=-\frac{1}{2}}(E) + \sqrt{\varkappa^2 - \gamma^2}\, f'_{j\lambda=-\frac{1}{2}}(E)}\right]^2_{r=R}. \tag{11′}$$

В приближении «точечного» ядра для подоболочек с одинаковым $|\varkappa|$ (с определенным j) вычисление $\Omega_{\mp|\varkappa|}$ с учетом условий $\alpha ZR \ll 1$ и $pR \ll 1$, но без учета экранирования, дает для вероятности EO — конверсии следующее выражение:

$$W_{\mp|\varkappa|} = \rho^2 \frac{\alpha\Gamma(2\gamma+n')(|\varkappa|+\gamma)^2(\varepsilon|\varkappa|\pm\gamma)(E|\varkappa|\pm\gamma)\,p}{4Z|\varkappa|(2|\varkappa|+1)^2 n'!\,\Gamma^2(2\gamma+1)(1+\gamma)}\left(\frac{2\alpha ZR\varepsilon}{n'+\gamma}\right)^{2\gamma+2}\cdot F(Z,p), \tag{12}$$

где $F(Z,p)$—функция Ферми, используемая при β-распаде [13], равная

$$F(Z,p) = \frac{2(1+\gamma)(2pR)^{2\gamma-2}e^{\frac{\pi\alpha ZE}{p}}\left|\Gamma\left(\gamma+\frac{i\alpha ZE}{p}\right)\right|^2}{\Gamma^2(2\gamma+1)}. \tag{13}$$

Для относительной вероятности EO-конверсии электронов с одинаковыми j и $n \geqslant 2$ получаем без учета экранирования простую формулу

$$w \equiv \frac{W_{-|\varkappa|}}{W_{+|\varkappa|}} = \frac{\varepsilon|\varkappa|+\gamma}{\varepsilon|\varkappa|-\gamma}\cdot\frac{E|\varkappa|+\gamma}{E|\varkappa|-\gamma}. \tag{14}$$

Вероятности с различными j (с различным $|\varkappa|$) не сравнимы, так как вследствие наличия множителя $R^{4\gamma}$ в (12) $W_{\mp(|\varkappa|+1)}$, меньше $W_{\mp|\varkappa|}$ примерно в $R^{-4} \simeq 10^{10}A^{-\frac{4}{3}}$ раз (в $10^9 - 10^7$ раз, что отмечалось в работах [4,7]). Поэтому прямая EO-конверсия электронов на подоболочках, расположенных выше, чем 1-я и 2-я маловероятна.

Для относительной вероятности EO-конверсии электронов с одинаковым $|\varkappa|$, находящихся на различных оболочках атома, из (12) мы получаем

$$w' \equiv \frac{W_{n_1,\mp|\varkappa|}}{W_{n_2,\mp|\varkappa|}} = \frac{\Gamma(2\gamma+n_1')}{\Gamma(2\gamma+n_2')}\,\frac{n_2'!}{n_1'!}\,\frac{\varepsilon_1|\varkappa|\pm\gamma}{\varepsilon_2|\varkappa|\pm\gamma}\,\frac{E_1|\varkappa|\pm\gamma}{E_2|\varkappa|\pm\gamma}\times$$

$$\times\left[\frac{\varepsilon_1(n_2'+\gamma)}{\varepsilon_2(n_1'+\gamma)}\right]^{2\gamma+2}\frac{p_2 f(Z,p_1)}{p_1 f(Z,p_2)}, \tag{15}$$

где $n_1' = n_1 - |\varkappa|$, $n_2' = n_2 - |\varkappa|$, n_1 и n_2 — главные квантовые числа, определяющие оболочки атома, $f(Z,p)$ — приведенная функция Ферми, протабулированная в книге [14], равная

$$f(Z,p) = p^{2\gamma}e^{\frac{\pi\alpha ZE}{p}}\left|\Gamma\left(\gamma+\frac{i\alpha ZE}{p}\right)\right|^2. \tag{16}$$

Из (15) видно, что в нерелятивистском приближении (Z — мало, $\gamma \simeq 1$, $\varepsilon_2 \simeq \varepsilon_1 \simeq 1$, $p_2 \simeq p_1$) при $|\varkappa| = 1$ $w' = \left(\frac{n_2}{n_1}\right)^3$, т. е. относительная вероятность w' удовлетворяет известному соотношению [1,4]:

$$K : L_{\mathrm{I}} : M_1 : N_1 : \ldots = 1 : \frac{1}{8} : \frac{1}{27} : \frac{1}{64} : \ldots \tag{17}$$

Сравнение численных значений w и w', получаемых по формулам (14—15), с более точными их значениями, найденными для w при $|\varkappa| = 1$

и $n = 2$ $\left(\text{т. е. для } \frac{L_I}{L_{II}} [4]\right)$ и для w' при $|\varkappa| = 1$* $n_1 = 1$ и $n_2 = 2$ $\left(\text{т. е. для } \frac{K}{L_I} [4, 8]\right)$ непосредственно по формуле (3) с постоянными $a_{j\lambda}$, которые определяются с помощью численного интегрирования системы дифференциальных уравнений для радиальных функций Дирака [15] с учетом экранирования на основе статистической модели атома Томаса — Ферми — Дирака [4, 8, 16, 18], показывает, что формулы (14—15) более пригодны для высоких, чем для низких Z. Так, например, при $k = 2$ и $Z = 100$ w и w' согласно (14—15) отклоняются от более точных их значений [4, 8] менее чем на 5%** (в то время как для $k = 1$ и $Z = 40$ более чем на 20%). Такой же результат сравнения относительных вероятностей, вычисляемый по формулам (14—15), с экспериментальными данными. Если при $Z = 40$ и $k = 3{,}448$ (1,762 *Мэв* — энергия $E0$-перехода ядра Zr^{90}) различие между теоретическим значением $w'' = \frac{K}{L + M + N + \ldots} = 4{,}6$ и экспериментальным значением $w'' = 7{,}06 \pm 0{,}08$ [10] значительно, то при $Z = 92$ и $k = 1{,}585$ (0,810 *Мэв* — энергия $E0$ — перехода U^{234}). Эти значения отличаются лишь на 5% ($w''_{\text{теор}} = 3{,}7$, а $w''_{\text{эксп}} = 3{,}9$ [9]).

Лучшую применимость формул (14—15) при больших Z, по-видимому, можно объяснить тем, что, во-первых, эффект экранирования вообще ослабевает с ростом Z и, во-вторых, — вследствие уменьшения размеров атома с увеличением Z электронные оболочки размещаются все теснее и теснее и различие в эффектах экранирования для K-, L-, M- и N-электронов будет все уменьшаться.

Эффект экранирования для относительных вероятностей $E0$-конверсии может быть учтен на основе формулы (12) и поправочных множителей $B_{\mp|\varkappa|}$ полуэмпирическим методом — путем использования экспериментальных энергий связи (тогда ε будет равно единице минус энергия связи) и постоянных экранирования s (т. е. путем замены в формуле (12) и в поправочных множителях $B_{\mp|\varkappa|}$ зарядового числа Z на $Z_{\text{эф}} = Z - s$ и γ на $\gamma_{\text{эф}} = \sqrt{\varkappa^2 - \alpha^2 Z^2_{\text{эф}}}$).

Расчет, выполненный таким методом для $Z = 40$ и $k = 3{,}448$ при $s_K = 0{,}3$, $s_{L_I} = s_{L_{II}} = 3{,}5$ [19] и $s_{M_I} = 8{,}5$ [20], дает значения для $\frac{L_I}{L_{II}}$ и $\frac{K}{L_I}$, отличающиеся от указанных выше более точных [4, 8] лишь на 4 и 3% соответственно. $\frac{L_I}{M_I}$ оказалось равным 6,02, что почти в два раза больше нерелятивистской оценки согласно (17), а $w''_{\text{теор}} = \frac{K}{L + M + N + \ldots} = 8{,}29$, что значительно ближе экспериментального значения ($w'' = 7{,}06 \pm 0{,}08$), чем это имело место без учета экранирования. Причину еще заметного различия между $w''_{\text{теор}}$ и $w''_{\text{эксп}}$ следует искать в выборе несколько завышенного значения для параметра s_{M_I}.

---

* В этом случае относительная вероятность $E0$-конверсии w с учетом $E = \varepsilon + k$ согласно (14) записывается в виде

$$w = \frac{\varepsilon + \gamma}{\varepsilon - \gamma} \frac{k + \varepsilon + \gamma}{k + \varepsilon - \gamma}. \tag{14'}$$

** Если же учесть поправочные множители на эффект конечных размеров ядер (множители в фигурных скобках в (6—6′), то эти отклонения еще меньше.

Зная относительные вероятности $E0$-конверсии w и w', можно по известным абсолютным приведенным вероятностям $E0$-конверсии на K- и L-оболочках [4, 8] найти приведенную абсолютную вероятность $E0$-конверсии на любой оболочке атома.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fowler R. H. Proc. Roy. Soc., **A129**, I, 1930.
2. Jukawa H., Sakata S. Proc. Phys.-Math. Soc. Japan, **17**, 397, 1935.
3. Thomas R. Phys. Rev., **58**, 714, 1940.
4. Church E. L., Weneser J. Phys. Rev., **103**, 1035, 1956.
5. Гречухин Д. П. ЖЭТФ, **32**, 1036, 1957.
6. Reiner A. S. Physica, **23**, 338, 1957.
7. Гречухин Д. П. ЖЭТФ, **33**, 1037, 1957.
8. Листенгартен М. А., Банд И. М. «Изв. АН СССР», сер. физическая, **23**, 235, 1959.
9. Gallagher C. J., Thomas T. D. Nucl. Phys., **14**, 1, 1959.
10. Nessin M., Kruse T. H., Eklund K. E. Phys. Rev., **125**, 639, 1962.
11. Слив Л. А. ЖЭТФ, **17**, 1049, 1947.
12. Слив Л. А., Волчок Б. А. Таблицы кулоновских фаз и амплитуд. Изд-во АН СССР, М. — Л., 1956.
13. Давыдов А. С. Теория атомного ядра. Физматгиз, М., 1958.
14. Вапстра А. Х., Г. И. Нийх, Р. Ван Лишут. Таблицы по ядерной спектроскопии. Госмехатомиздат, М., 1960.
15. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. Физматгиз, М., 1953.
16. Слив Л. А., Банд И. М. Таблицы коэффициентов внутренней конверсии γ-излучения, ч. I, K — оболочка. Изд-во АН СССР, М.—Л., 1956.
17. Листенгартен М. А. В книге: «Гамма-лучи». Изд-во АН СССР, М.—Л., 1961.
18. П. Гомбаш. Проблема многих частиц в квантовой механике. ИЛ, М., 1952.
19. Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. ИЛ, М., 1960.
20. Ельяшевич М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия. Физматгиз, М. — Л., 1962.

Поступила в редакцию
25. 3 1963 г.

Кафедра
электродинамики и квантовой теории