УДК 535.33:539.184.268

Н. Н. Колесников
А. Б. Скворцов

ТОЧНЫЙ РАСЧЕТ ЭФФЕКТА ОБЪЕМА ЯДРА В АТОМНЫХ СПЕКТРАХ

Дается аналитическое и численное решение задачи учета эффекта объема ядра на положение электронных уровней в атоме.

Хотя проблема учета эффекта объема ядра в атомных (а также в мезоатомных) спектрах не нова, она вновь приобрела актуальность в связи с исследованием ядер в экстремальных условиях (сверхплотные состояния ядер [1], сверхтяжелые элементы [2]), так как измерение характеристического атомного излучения позволяет не только произвести их идентификацию, но и получить информацию об их структуре, в частности об их размерах. С другой стороны, изучение сверхтяжелых атомов, где объемный эффект играет решающую роль [3] (а также квазиатомов и квазимолекул [4]), связано с фундаментальными вопросами квантовой электродинамики.

Элементарная нерелятивистская теория объемного эффекта была дана Бартлеттом [5] и обобщена на релятивистский случай Рака [6], а также Брейтом и Розенталь [7]. Брох [8] существенно улучшил расчеты, предложив метод сшивания внутреннего и внешнего решений уравнения Дирака, не требующий использования теории возмущений. Бодмер [9] показал, что результаты работ [7, 8] можно обобщить на случай произвольного сферически-симметричного распределения заряда в ядре, если перейти от уравнения Дирака к эквивалентному ему интегральному уравнению Роуза [10]. Дальнейшее развитие метод Броха — Бодмера получил в работах [11—17]. При этом внешние решения уравнения Дирака брались в форме Зоммерфельда — Броха [18, 19], где пренебрегается различием в энергии свободного и связанного электрона. Попытка освободиться от этого недостатка (приводящего к существенным ошибкам в рентгеновских спектрах тяжелых элементов) была сделана в [20]. Однако в [20] предполагалась независимость (от размеров ядра) нормировочной константы, входящей во внешнее решение уравнения Дирака, что оправдывается тем хуже, чем больше заряд. Наиболее точное аналитическое решение задачи было дано в [21]. Однако во всех аналитических расчетах делается упрощающее предположение о малости размеров ядра по сравнению с радиусом орбиты электрона. Чтобы судить о точности аналитических методов и о границах их применимости, а также и для практических целей необходимо иметь точное решение. Нахождение точных численных решений, сравнение их с аналитическими решениями и исследование влияния характера распределения заряда в ядре было целью данной работы.

Отметим, что параллельно главной линии, развитие теории изотопических смещений шло также в направлении учета деформаций ядра

[21], [22—27], сжимаемости ядерного вещества [17, 18, 28], поляризуемости ядер [29, 30], собственной структуры нуклонов [31], вакуумных и других поправок [32, 33]. Для сравнения теории изотопических смещений с экспериментом важно кроме того, учесть такие атомные эффекты, как экранировку ядра и ее изменение при атомных переходах [34].

Решение уравнения Дирака для внешней области. Предположим, следуя Слэтеру [35], что взаимодействие рассматриваемого (оптического или рентгеновского) электрона с другими атомными электронами не влияет на поведение его волновой функции, а меняет лишь численное значение нормировочной константы. Тогда многоэлектронная задача сводится к одноэлектронной. Допустим, что плотность распределения заряда в ядре $Ze\rho(r)$ $(\int\rho(r)d^3r=1)$ сферически-симметрична и обрывается (или же практически неотличима от нуля) на расстояниях $r>R_0$.

Тогда при $r>R_0$ поле ядра $V(r)$ становится чисто кулоновским $\left(V(r)=-\frac{Ze^2}{r}\right)$, а система радиальных уравнений Дирака [36]

$$\left.\begin{aligned}\frac{d\chi_1}{dr}&=\frac{\varkappa}{r}\chi_1+\frac{m_0c}{\hbar}(1-\varepsilon+v(r))\chi_2\\ \frac{d\chi_2}{dr}&=\frac{m_0c}{\hbar}(1+\varepsilon-v(r))\chi_1-\frac{\varkappa}{r}\chi_2\end{aligned}\right\}, \qquad (1)$$

где

$$\varepsilon=\frac{E}{m_0c^2},\quad v(r)=\frac{V(r)}{m_0c^2}=-\frac{Ze^2}{m_0c^2\cdot r},$$

$$\text{а } \varkappa=\mp\left(j+\frac{1}{2}\right) \text{ для } j=l\pm\frac{1}{2},$$

после введения безразмерной переменной $\xi=2r\sqrt{1-\varepsilon^2}\,\frac{m_0c}{\hbar}$, а также функций φ_1 и φ_2, связанных с χ_1 и χ_2 соотношениями

$$\chi_1\sqrt{\xi(1+\varepsilon)}=\varphi_1-\varphi_2 \quad\text{и}\quad \chi_2\sqrt{\xi(1-\varepsilon)}=\varphi_1+\varphi_2,$$

(1) преобразуется к системе уравнений:

$$\left.\begin{aligned}\xi\frac{d\varphi_1}{d\xi}&=\left(\frac{\xi}{2}-\left(\nu-\frac{1}{2}\right)\right)\varphi_1-(N+\varkappa)\varphi_2\\ \xi\frac{d\varphi_2}{d\xi}&=(N-\varkappa)\varphi_1-\left(\frac{\xi}{2}-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\right)\varphi_2\end{aligned}\right\}, \qquad (2)$$

где $N=\alpha Z(1-\varepsilon^2)^{-1/2}$, $\nu=\varepsilon N$, $\left(\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}\right)$. Если из системы (2) исключить φ_2, то получится уравнение второго порядка

$$\frac{d^2\varphi_1}{d\xi^2}+\left(-\frac{1}{4}+\frac{n'+\gamma-\frac{1}{2}}{\xi}+\frac{\frac{1}{4}-\gamma^2}{\xi^2}\right)\varphi_1=0, \qquad (3)$$

решением которого конечным на бесконечности является функция Уиттекера [37]:

$$\varphi_1=C_1W_{n'+\gamma-\frac{1}{2},\,\gamma}(\xi). \qquad (4)$$

При написании (3) были использованы обозначения

$$\gamma=\sqrt{\varkappa^2+\nu^2-N^2}=\sqrt{\varkappa^2-\alpha^2 Z^2}, \quad \nu=n'+\gamma.$$

При этом, очевидно,

$$N=\sqrt{\varkappa^2+n'(n'+2\gamma)}=\sqrt{n^2-2n'(|\varkappa|-\gamma)},$$

где $n=n'+|\varkappa|$, а

$$E=m_0c^2\cdot\varepsilon=m_0c^2\left(1+\frac{\alpha^2 Z^2}{(n'+\gamma)^2}\right)^{-1/2}. \tag{5}$$

Отметим, что формула (5) справедлива независимо от того, является ли поле ядра кулоновским всюду или же (за счет конечности размеров ядра) лишь во внешней области.

Аналогично, исключая из (2) φ_1, находим

$$\varphi_2=C_2 W_{n'+\gamma+\frac{1}{2},\gamma}(\xi). \tag{6}$$

Константы C_1 и C_2 в (4) и (6) не являются независимыми, так как φ_1 и φ_2 связаны уравнениями (2). Подставляя $\xi\frac{d\varphi_2}{d\xi}$ во второе из уравнений системы (2), получаем [1]:

$$C_2 n'(n'+2\gamma)=(N-\varkappa)C_1.$$

Отсюда, используя (4) и (6), получаем

$$\left.\begin{matrix}\chi_1\\ \chi_2\left(\dfrac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\end{matrix}\right\}=D\cdot\xi^{-\frac{1}{2}}\{n'(n'+2\gamma)\cdot W_{n'+\gamma-\frac{1}{2},\gamma}(\xi)\mp$$

$$\mp(N-\varkappa)W_{n'+\gamma+\frac{1}{2},\gamma}(\xi), \tag{7}$$

где $D=C_2(1+\varepsilon)^{-\frac{1}{2}}(N-\varkappa)^{-1}$, а ξ можно записать как $\xi=\frac{2Zr}{Na_0}$.

Учитывая связь между функциями Уиттекера и вырожденными гипергеометрическими функциями [2], решение уравнения Дирака для внешней области можно еще переписать в виде

---

[1] При этом мы учитываем, что [37]

$$\xi\frac{dW_{k,m}}{d\xi}=\left(k-\frac{\xi}{2}\right)W_{k,m}(\xi)-\left(m^2-\left(k-\frac{1}{2}\right)^2\right)W_{k-1,m}(\xi).$$

[2] $$W_{k,m}(\xi)=e^{-\frac{\xi}{2}}\cdot\xi^{\frac{1}{2}+m}\left\{\Gamma(-2m)\,\Gamma^{-1}\left(\frac{1}{2}-m-k\right)\times\right.$$

$$\times F\left(\frac{1}{2}+m-k;\ 2m+1;\ \xi\right)+$$

$$\left.+\xi^{-2m}\cdot\Gamma(2m)\cdot\Gamma^{-1}\left(\frac{1}{2}+m-k\right)F\left(\frac{1}{2}-m-k;\ -2m+1;\ \xi\right)\right\}.$$

$$\left.\begin{array}{l}\chi_1\\ \chi_2\left(\dfrac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\end{array}\right\} = -B\cdot e^{-\frac{\xi}{2}}\,\xi^{\gamma}\left\{[n'F(-n'+1;\ 2\gamma+1;\ \xi)\pm\right.$$

$$\pm(N-\varkappa)\,F(-n';\ 2\gamma+1;\ \xi)]+\xi^{-2\gamma}\frac{\Gamma(2\gamma)\cdot\Gamma(-2\gamma-n')}{\Gamma(-2\gamma)\cdot\Gamma(-n')}\times$$

$$\times[(n'+2\gamma)\,F(-n'-2\gamma+1;\ -2\gamma+1;\ \xi)\pm$$

$$\left.\pm(N-\varkappa)\,F(-n'-2\gamma;\ -2\gamma+1;\ \xi)]\right\}, \qquad (8)$$

$$B=D\cdot\Gamma(-2\gamma)\cdot\Gamma^{-1}(-n'-2\gamma).$$

Формула (8) при целочисленных значениях квантового числа n' в точности переходит в известные решения уравнения Дирака для случая точечного ядра [36]. Для нахождения смещения энергии уровня за счет конечности размеров ядра используется условие непрерывности $\dfrac{\chi_1}{\chi_2}$ на границе ядра. Для точного решения задачи приходится путем численного интегрирования находить решение уравнения Дирака для внутренней области. Для приближенного нахождения внутреннего решения можно использовать аналитические методы.

Однако, чтобы уравнение сшивания можно было разрешить относительно $\Delta n'$ (или ΔE), нужно внешнее решение (8) разложить по степеням $\Delta n'$. Кроме того, чтобы избежать применения таблиц (или ЭВМ) для вычисления специальных функций ($W_{k,m}(\xi)$ или $F(\alpha,\beta,\xi)$), желательно иметь более простые асимптотические выражения для тех ξ, при которых производить сшивание. Эта задача была решена в [21].

Приближенное аналитическое решение. С целью получения достаточно простых аналитических выражений для χ_1 и χ_2 при малых ξ запишем функцию Уиттекера $W_{k,m}(\xi)$ в виде контурного интеграла [37]:

$$W_{k,m}(\xi)=-\frac{\Gamma\left(k+\frac{1}{2}-m\right)}{2\pi i}e^{-\frac{\xi}{2}}\xi^k\int\limits_C(-t)^{-k-\frac{1}{2}+m}\times$$

$$\times\left(1+\frac{t}{\xi}\right)^{k-\frac{1}{2}+m}\cdot e^{-t}\,dt, \qquad (9)$$

где контур C, выходя из $t=-\infty$, обходит начало координат так, что точка $t=-\xi$ остается вне его, а $\arg\xi$ имеет главное значение. Тогда, как показано в [21], формулу (9) можно представить в виде суммы

$$W_{k,m}(\xi)=e^{-\frac{\xi}{2}}\cdot\xi^k\left\{\Gamma^{-1}\left(-k+\frac{1}{2}-m\right)\int\limits_0^\infty t^{-k-\frac{1}{2}+m}e^{-t}\,dt\times\right.$$

$$\times\left[\left(1+\frac{t}{\xi}\right)^{k-\frac{1}{2}+m}-1-\ldots\ldots-\frac{\left(k-\frac{1}{2}+m\right)\ldots\left(k+\frac{1}{2}+m-p\right)}{p!}\right]+$$

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

где p — целое число, заключенное в пределах

$$p' \equiv k - \frac{1}{2} - m \geqslant p > k - \frac{3}{2} - m.$$

Если $\xi \ll 1$, то в первой квадратной скобке существен лишь первый член, а во второй — последний. Поэтому

$$W_{k,m}(\xi) \approx \xi^{-m+\frac{1}{2}} \frac{\Gamma(2m)}{\Gamma(-p')} + (-1)^p \frac{\Gamma(2m+p'+1)\cdot\Gamma(p'+1)\cdot\xi^{m+\frac{1}{2}+\Delta n}}{\Gamma(p+1)\cdot\Gamma(2m+\Delta n+1)\cdot\Gamma(1+\Delta n)}, \tag{9'}$$

где $\Delta n \equiv p' - p$. При $k = n' + \gamma \pm \frac{1}{2}$ и $m = \gamma$, $\Delta n = n' = n_0'$, где целое число n_0' соответствует точечному ядру. Если $\Delta n \ll 1$, то с точностью до членов порядка $O(\Delta n^2)$ [21].

$$W_{n'+\gamma-\frac{1}{2},\gamma}(\xi) \approx W_{n_0'+\gamma-\frac{1}{2},\gamma}(\xi)\left\{1 - \Delta n\cdot\frac{2\gamma\cdot\Gamma^2(2\gamma)\,\Gamma(n_0')}{\Gamma(n_0'+2\gamma)}\cdot\xi^{-2\gamma}\right\} \tag{10}$$

и

$$W_{n_0'+\gamma-\frac{1}{2},\gamma}(\xi)\cdot(n_0'+2\gamma) \approx -W_{n_0'+\gamma+\frac{1}{2},\gamma}(\xi). \tag{11}$$

Вместо нахождения решения уравнения Дирака (1) для внутренней области, где в случае сферически-симметричного распределения заряда Ze с плотностью $Ze\rho(v)$

$$V(r) = -4\pi\cdot Ze^2\left\{\frac{1}{r}\int_0^r \rho(r_1)\,r_1^2\,dr_1 + \int_r^\infty \rho(r_1)\,r_1\,dr_1\right\}, \tag{12}$$

удобно искать решение эквивалентного ему интегрального уравнения Роуза [10]:

$$K^{\pm}(\eta) = \frac{\eta^{\pm 2\varkappa}}{2\alpha Z}\int_0^\eta \{(1 \mp \varepsilon \pm v(\eta_1)) + (-1 \mp \varepsilon \pm v(\eta_1)) \times$$

$$\times (K^{\pm}(\eta_1))^2\}\,\eta_1^{\mp 2\varkappa}\,d\eta_1,$$

где $K^+ \equiv \frac{\chi_1}{\chi_2}$ относится к случаю $\varkappa < 0$, а

$$K^- \equiv \frac{\chi_2}{\chi_1} \text{ к } \varkappa > 0;\ \eta = \frac{2Zr}{a_0}.$$

Уравнение (12) решается методом интеграций, и, как было показано в [9] и [21] на примере простейших распределений заряда, уже первая итерация

$$K_1^{\pm}(R_0) = \frac{(1\mp\varepsilon)}{(1+2\lambda)}\cdot\frac{R_0}{\alpha a_0} \mp \frac{\alpha Z}{2\lambda}\left(1 - \frac{1}{(2\lambda+1)}\,\frac{\langle r^{2\lambda}\rangle}{R_0^{2\lambda}}\right) \tag{13}$$

аппроксимирует $K^{\pm}(R_0)$ с ошибкой порядка нескольких % (для $Z < 100$). В (13) $\lambda = |\varkappa|$ и $\langle r^{2\lambda}\rangle = \int \rho(r)\,r^{2\lambda}\,d^3r$.

Приравнивая (при $r=R_0$) отношение $\frac{\chi_1}{\chi_2}$ $\left(\text{или } \frac{\chi_2}{\chi_1}\right)$, вычисленное в соответствии с формулой (11), величине K^+ (или K^-, — в зависимости от знака $\varkappa$), получаем окончательно

$$\Delta n = \frac{\Gamma(n_0' + 2\gamma + 1)}{\Gamma(2\gamma+1)\,\Gamma(2\gamma)\cdot\Gamma(n_0'+1)} \left(\frac{2Zr}{N_0 a_0}\right)^{2\gamma} \Bigl\{(n_0' + \lambda \pm N_0) -$$

$$-(n_0' - \lambda \mp N_0)\left(\frac{1\pm\varepsilon_0}{1\mp\varepsilon_0}\right)^{1/2} K^{\pm}(R_0)\Bigr\} \Bigl\{(n_0' + 2\gamma + \lambda \pm N_0) -$$

$$-(n_0' + 2\gamma - \lambda \mp N_0)\left(\frac{1\pm\varepsilon_0}{1\mp\varepsilon_0}\right)^{1/2} K^{\pm}(R_0)\Bigr\}^{-1}, \tag{14}$$

где $K^{\pm}(R_0)$ выражается формулой (13), а

$$\varepsilon_0 = \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(n_0'+\gamma)^2}\right)^{-1/2}; \quad N_0 = \sqrt{\varkappa^2 + n_0'(n_0' + 2\gamma)}\ ;$$

верхний знак соответствует состояниям с $j = l + \frac{1}{2}$, нижний — с $j = l - \frac{1}{2}$. Для нахождения ΔE следует учесть, что (согласно (5))

$$\Delta E = \frac{3\alpha^2 Z^2 \cdot E_0 \cdot \Delta n}{2(n_0'+\gamma)\,[\alpha^2 Z^2 + (n_0'+\gamma)^2]}. \tag{15}$$

Недостатком аналитического метода является, во-первых, зависимость результатов от радиуса сшивания, в связи с чем в случае необрывающихся плотностей возникает проблема выбора R_0. Во-вторых, сложность вычисления поправочных членов для внутреннего и особенно для внешнего решений делает трудной оценку точности метода, в особенности при приближении αZ к единице. Отсюда необходимость проведения численных расчетов.

Численное решение. При численном решении задачи уравнение Дирака (1) для внутренней области интегрировалось численно и затем сшивалось (при $r=R_0$) с аналитическим решением для внешней области в форме (8), причем программа включала вычисление входящих в (8) гипергеометрических и Г-функций. Были рассмотрены: а) поверхностное, б) равномерно объемное и в) хофстадтеровское распределение заряда. Особенно подробно был исследован случай а), для которого расчеты проводились для $Z=5$, 25, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 110, 120, 125, 130 и 135 при R_0 от 5 до 10 Ф с шагом 1 Ф — для всех n_0 от 1 до 10 и $\varkappa = -1$ (ns-состояния), $\varkappa = +1$ ($np_{1/2}$-состояния) и $\varkappa = -2$ ($np_{3/2}$-состояния); Δn находилось путем сшивания внешнего решения (8) с внутренним, последнее в данном случае выражается через элементарные функции:

$$\chi_1(r) = B_1 \sqrt{r}\, J_{\left|\varkappa - \frac{1}{2}\right|}\left(\sqrt{b^2-1}\,\frac{m_0 c r}{\hbar}\right),$$

$$\frac{K}{\varkappa}\chi_2(r) = B_1 \frac{\varkappa}{k}\left(\frac{b+1}{b-1}\right)^{1/2} \sqrt{r}\, J_{\left|\varkappa + \frac{1}{2}\right|}\left(\sqrt{b^2-1}\,\frac{m_0 c r}{\hbar}\right), \tag{16}$$

где
$$b = \varepsilon + \frac{Ze^2}{R_0 \cdot m_0 c^2}.$$

Программа включала вычисление гипергеометрических функций (в (8)) и бесселевых функций (в (16)), а также нахождение Δn из полученного уравнения. На основании таблиц значений Δn были получены интерполяционные формулы, позволяющие вычислить Δn с точностью до 0,5% для ns и $np_{1/2}$-состояний и нескольких процентов — для $np_{3/2}$-состояний. Они имеют общую структуру

$$\Delta n (Z, R_0, n) = \left(1 - \frac{q(Z, R_0)}{n_0^2}\right) \cdot a(Z, R_0), \qquad (17)$$

где для ns-состояний ($\varkappa = -1$):

$$q(Z, R_0) = \frac{0,084 - 9,507 \times 10^{-7} (Z-50)^{3/2} (R_0 - 5)}{5,9005 - 26,5443 (\alpha Z) + 49,9803 (\alpha Z)^2 - 43,9271 (\alpha Z)^3 - 14,9275 (\alpha Z)^4}; \qquad (18)$$

$$a(Z, R_0) = \left(\frac{2ZR_0}{a_0}\right)^{2\gamma} \cdot R_0^{-\delta} \left\{\frac{1}{6} + [0,04419 + 0,2994 (\alpha Z) + 0,4969 (\alpha Z)^2 - 0,4955 \cdot \exp(-22,22(1-\alpha Z))]^2\right\}, \qquad (19)$$

$$\delta = \frac{2,06 \cdot 10^{-3}}{(\gamma - 0,5)^2 + 3,868 \cdot 10^{-2}} + \frac{4,5 \cdot 10^{-6}}{(\gamma - 0,72)^2 + 5,63 \cdot 10^{-4}}. \qquad (20)$$

Для $np_{1/2}$-состояний ($\varkappa = +1$):

$$q(Z, R_0) = -1,8466 + 20,2864 (\alpha Z) - 52,0156 (\alpha Z)^2 + 58,6793 (\alpha Z)^3 - 24,4754 (\alpha Z)^4, \qquad (21)$$

$$a(Z, R_0) = \left(\frac{2ZR_0}{a_0}\right)^{2\gamma} \cdot R_0^{-\delta} (\alpha Z)^2 \{0,1576 (\alpha Z) + 0,1798 \exp(-20,6(1-\alpha Z)^2)\}, \qquad (22)$$

$$\delta = \frac{1,27 \cdot 10^{-3}}{(\gamma - 0,456)^2 + 0,04725}. \qquad (23)$$

Для $np_{3/2}$-состояний с точностью до 5 %

$$q(Z, R_0) = 9,825 - 35,3539 (\alpha Z) + 47,4918 (\alpha Z)^2 - 19,9077 (\alpha Z)^3, \qquad (24)$$

$$a(Z, R_0) = \left(\frac{2ZR_0}{a_0}\right)^{2\gamma} \cdot (1,7 + 5 (\alpha Z)^{3,67}) \cdot 10^{-3}. \qquad (25)$$

В формулах (17)—(25) радиусы R_0 и a_0 выражены в единицах Ферми (10^{-13} см).

Для случая равномерно-объемного распределения заряда в ядре задача решалась аналогичным образом с той разницей, что внутреннее решение не выражалось более через известные функции, а находилось численным интегрированием. В случае хофстадтеровского распределения нужно было, кроме того, выбрать радиус сшивания R_0. Выбор производился исходя из точности проводимых расчетов: R_0 бралось таким, чтобы его дальнейшее увеличение не приводило к изменению Δn больше, чем на 0,1%. Практически это требование удовлетворяется для всех ядер, если положить $R_0=20$ Ф. Расчеты с хофстадтеровским распределением проводились только для $Z=90$, 110 и 130 и для таких значений A, которые соответствуют наиболее β-стабильным изотопам этих элементов, а именно для ^{229}Th $^{292}110$ и $^{354}130$ [138].

Как показал анализ полученных результатов, вычисление Δn для распределений, отличающихся от поверхностного, можно производить по тем же формулам (17)—(25), если под R_0 подразумевать не радиус сшивания, а величину $<r^{\beta}>^{1/\beta}$. Здесь $<r^{\beta}>$ определяется через плотность распределения заряда в ядре $\rho(r): <r^{\beta}> = \int \rho(r) r^{\beta} d^3r$, причем β близко к 1,80 для ns- и $np_{1/2}$-состояний и к 3,60 для $np_{3/2}$-состояний (см. табл.).

Z	β	
	для $\varkappa = \pm 1$	для $\varkappa = -2$
90	1,80	3,60
110	1,80	3,62
130	1,84	3,72

Интересно сопоставить результаты вычислений по формулам (14)—(15) с численными расчетами. Расчет по формулам (14)—(15) дает сначала завышение по сравнению с (17)—(25) для ns и $np_{1/2}$-состояний вплоть до $Z \approx 120$, а затем занижение. При $Z=50$ расхождение порядка 3%, при $Z=100$ оно составляет 8% и достигает 12% при $Z=120$; при $Z=135$ оно снова составляет 8%, но отклонение уже в другую сторону. При приближении к $Z=137$ расхождение резко возрастает. Аналогичная картина и для состояний $np_{3/2}$. При этом расхождение почти не зависит от значений n и R_0.

Таким образом, аналитическая формула (14) дает лучшие результаты, чем это можно было ожидать. Укажем для сравнения, что известная формула Брейта и Розенталь, не учитывающая искажения электронных волновых функций, дает при $Z=120$ завышение в 2,3 раза, а формула Смородинского [13] — в 1,5 раза, отклонение для формул работ [8—9], [16—17] и [26] в тех же пределах, что и для [13].

Авторы благодарят А. А. Соколова, А. В. Борисова, В. С. Ростовского, Н. П. Юдина, В. Ч. Жуковского за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Amsden A. A. et. al. «Phys. Rev. Lett.», 1975, 35, 1905: Kitezoe Y., Sano M., Toki H. «Lett. Nuovo Cim.», 1975, 18, 139; Алешин В. И. и др. «Ядерная физика», 1977, 26, 916.
2. Флеров Г. Н. «Вестн. АН СССР», 1977, 7, 50; Fox F. D. et al. «Phys. Rev. Lett.», 1976, 37, 629; Petrovich F. et al. «Phys. Rev. Lett.», 1976, 37, 558.
3. Воронков В. В., Колесников Н. Н. ЖЭТФ, 1960, 39, 189.
4. Каун К., Манфресс И., Франк Ф. ЭЧАЯ, 1976, 8, 1246.
5. Bartlett J. «Nature», 1931, 128, 408.
6. Racah G. «Nature», 1932, 129, 723.
7. Rosenthal J., Breit G. «Phys. Rev.», 1932, 41, 459.
8. Broch E. «Arch. Mat. og Naturwid.», 1945, 48, 25.
9. Bodmer A. «Proc. Phys. Soc.», 1953, 66, 1041.
10. Rose M., Newton R. «Phys. Rev.», 1951, 82, 470.
11. Schawlow A., Townes C. «Phys. Rev.», 1955, 100, 1273.
12. Humbach H. «Zs. f. Phys.», 1952, 133, 589.
13. Смородинский Я. А. ЖЭТФ, 1947, 17, 1034.
14. Wertheim M. S., Igo G. «Phys. Rev.», 1955, 98, 1.
15. Иваненко Д. Д., Цандер А. Ф. ЖЭТФ, 1948, 18, 434.
16. Соколов А. А., Иваненко Д. Д. Квантовая теория поля. М., 1952.
17. Фрадкин Э. В. ЖЭТФ, 1962, 42, 787.
18. Sommerfeld E. «Zs. f. Phys.», 1941, 118, 295.
19. Broch E. «Arch. Mat. og Naturwid.», 1945, 48, 1.

20. Бабушкин Ф. А. ЖЭТФ, 1962, **42**, 1604; 1963, **44**, 1661.
21. Колесников Н. Н., Григорьев Ю. П. «Вестн. Моск. ун-та. Сер. физ., астрон.», 1963, № 3, 92.
22. Brix P., Kopferman H. «Zs. f. Phys.», 1949, **126**, 344.
33. Wilets L., Hill D., Ford K. «Phys. Rev.», 1953, **91**, 1488.
24. Breit G. «Rev. Mod. Phys.», 1958, **30**, 507.
25. Rustgi M. I. «Phys. Rev.», 1963, **123**, 2110.
26. Гречухин Д. П. «Nucl. Phys.», 1961, **24**, 576.
27. Reiner A. S. «Physica», 1955, **21**, 783.
28. Ionesco-Pallas N. J. «Nuovo Cim.», 1960, **15**, 323.
29. Breit G., Arfken G., Clendeni H. «Phys. Rev.», 1950, **78**, 390.
30. Cooper L. N., Henley J. «Phys. Rev.», 1953, **92**, 837.
31. Колесников Н. Н. ЖЭТФ, 1957, **33**, 819.
32. Иваненко Д. Д., Колесников Н. Н. ДАН СССР, 1953, **91**, 47.
33. Gottfried K. «Nucl. Phys.», 1960, **15**, 92.
34. Crowford M. F., Schawlow A. L. «Phys. Rev.», 1949, **76**, 1310.
35. Slater F. «Phys. Rev.», 1930, **36**, 57.
36. Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика систем с одним и двумя электронами. М., 1960.
37. Уиттекер Э. Г., Ватсон Дж. Н. Курс современного анализа, ч. 2. М., 1963.
38. Колесников Н. Н. «Вестн. Моск. ун-та. Сер. физ., астрон.», 1966, № 6, 766.

Поступила в редакцию
1.9 1977 г.
Кафедра
квантовой теории