

УДК 539.184.2

О КОЛЛАПСЕ 4f-ЭЛЕКТРОНОВ В ИЗОЭЛЕКТРОННОМ РЯДУ КСЕНОНА

С. Я. Горощенко, В. С. Ростовский, Н. П. Юдин

(кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

В работе исследуется коллапс 4f-электронов и связанная с ним перестройка других nf -уровней ($n=5,6$) в изоэлектронном ряду Хе в конфигурации $3d^9nf$ при непрерывном изменении заряда ядра в интервале

$$53,9 \leq Z \leq 55,1. \quad (1)$$

В рассматриваемом изоэлектронном ряду, согласно экспериментальным данным по фотопоглощению [1], происходит коллапс 4f-электронов при переходе от Хе ($Z=54$) к Cs^+ ($Z=55$). Теоретическое изучение одночастичных характеристик коллапсирующих состояний [1, 2] обнаруживает сильную зависимость результата от метода исследования. Так, например, в согласии с соответствующими выводами работы [1] самосогласованный расчет методом Хартри—Фока (ХФ) возбужденного состояния $^1P(3d^94f)$ иона Cs^+ дает для энергии и среднего радиуса 4f-состояния величины, близкие к кулоновским: $\epsilon_{4f} = -0,26$ Ry, $r_{4f} = 8,01$ (неколлапсированный электрон), в то время как использование модели ХФ с усреднением по термам приводит к значениям $\epsilon_{4f} = -0,49$ Ry, $r_{4f} = 1,54$ (коллапсированный электрон). Все величины даны в атомных единицах (а. е.), энергия — в Ry. Последовательное применение нерелятивистского метода требует, чтобы в изучаемом изоэлектронном ряду возбужденные состояния иона имели квантовые числа 1P . Ниже показано, что такие возбужденные $^1P(3d^9nf)$ -состояния, полученные в рамках метода ХФ с замороженным остовом [3], удовлетворяют экспериментальной ситуации в отношении коллапса 4f-электронов. В данном методе каждое nf -состояние рассчитывается без самосогласования с остовом. Поскольку также не учитываются релятивистские эффекты, то количественные результаты носят оценочный характер. Качественная же сторона явления раскрывается достаточно полно.

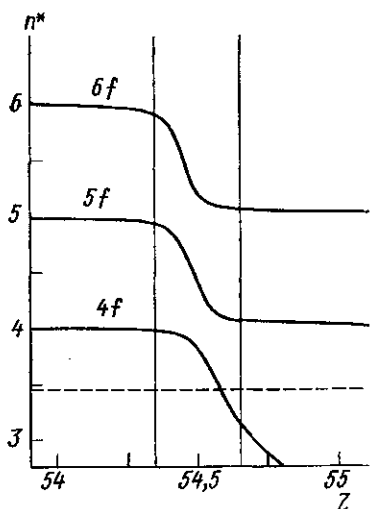
В эффективном потенциале, действующем на nf -электроны, выделим прямую часть. Она состоит из двух ям, разделенных потенциальным барьером, и одинакова для всех nf -состояний (остов фиксирован). Запишем ее в виде

$$V_f(r) = \frac{l_f(l_f+1)}{r^2} - \frac{2}{r} (Z - N(r)), \quad (2)$$

где $l_f=3$, $N(r)$ — эффективный заряд электронов остова на расстоянии r . Для Z из (1) барьер потенциала (2) имеет положительный максимум в окрестности преимущественной локализации внешних 5s- и 5p-оболочек остова (~ 2 а. е.). Положение максимума барьера будет выбрано в качестве условной границы внутренней области иона. В пределах внешней (кулоновской) ямы прямая часть (2) вносит основной вклад в полный эффективный nf -потенциал.

Эффективные квантовые числа $n^* = (Z - N) |\epsilon|^{-1/2}$ ($\epsilon = \epsilon_{nf}$, $N = N(\infty) = 53$ — полное число электронов остова) и средние радиусы \bar{r}_{nf} возбужденных nf -состояний при непрерывном переходе от Хе к Cs^+ представлены на рис. 1 и 2 соответственно. Характер изменения этих

величин иллюстрирует происходящий здесь коллапс $4f$ -электронов и перестройку других nf -уровней. Штриховыми линиями отмечены параметры минимума внешней ямы потенциала (2), значения которых для всех Z из (1) практически не отличаются от кулоновских, т. е. $(l_f(l_f+1))^{1/2} \approx 3,46$ — величина минимума в единицах n^* (рис. 1) и $l_f(l_f+1)(Z-N)^{-1}$ — его положение (рис. 2). Переходная область за-



ключена в пределах $54,35 < Z < 54,65$. Слева от нее весь nf -спектр локализован во внешней яме потенциала (2) (или полного эффективного nf -потенциала) и с большой точностью является кулоновским. Справа от переходной области $4f$ -уровень коллапсирован (в том числе в ионе Cs^+), а перестроенные nf -состояния ($n > 4$) близки к водородоподобным $(n-1)f$ -состояниям и образуют кулоновскую ветвь полного nf -спектра.

Рис. 1. Эффективные квантовые числа n^* для энергии nf -состояний и минимума кулоновской ямы (штриховая линия) потенциала (2) в зависимости от Z из (1). Вертикальные сплошные линии на этом и других рисунках — границы переходной области

В пределах переходной области одночастичные характеристики nf -состояний перестают быть кулоновскими, при этом имеет место немонокотонное изменение радиусов \bar{r}_{nf} с $n > 4$, в чем находит свое проявление резонанс уровней — эффект, специфичный для двухъямного потенциала при условии относительной независимости обеих ям [4, 5]. В данном случае свойствами такого потенциала обладает полный эффективный $4f$ -потенциал, содержащий прямую часть (2) и обменный член (влияние которого эффективно сводится к углублению внутренней ямы потенциала (2) и понижению барьера).

Отметим характерные особенности резонанса уровней. Начиная с некоторого Z во внутренней области иона становится возможным появление первого связанного f -уровня ($4f$), который вступает во взаимодействие с кулоновским nf -спектром. При дальнейшем увеличении Z волновая функция каждого nf -состояния (n меняется от ∞ до 5), взаимодействующего с появившимся внутри иона $4f$ -уровнем, в узком интервале значений Z (когда энергии состояний примерно сравниваются) деформируется таким образом, что ее амплитуда во внутренней области иона сначала заметно возрастает (убывает во внешней области), а первый узел (ближайший к $r=0$) перемещается из внешней ямы потенциала (2) в область барьера ($r \sim 3-5$ а. е. при $n=5$), после чего амплитуда в промежутке от нуля до первого узла резко убывает (возрастает вне этого промежутка) без заметного смещения узла, что и отражается в резонансном поведении кривых \bar{r}_{nf} . Можно сказать, что каждое из этих nf -состояний становится одновременно квази- $4f$ -уровнем внутри иона при соответствующих Z . Кулоновский $4f$ -уровень последним в nf -спектре взаимодействует с появившимся внутри иона связанным состоянием, преобразуясь сначала в гибридное $4f$ -состояние (амплитуда волновой функции имеет по максимуму в каждой из областей иона), которое затем, с ростом Z , смещаясь (по энергии) ниже

минимума внешней ямы потенциала (2), полностью локализуется во внутренней области иона.

На рис. 3 изображены вероятности W_{nf} нахождения nf -электронов во внутренних областях ионов (до максимума барьера потенциала (2)) в интервале Z , включающем переходную область. Границы последней определялись по методике, близкой к предложенной в работе [5]: в окрестности $Z=54,35$ (нижняя граница) все вероятности $W_{nf} \sim 0,01$ и при уменьшении Z быстро падают, а при $Z \approx 54,65$ (верхняя граница) заканчи-

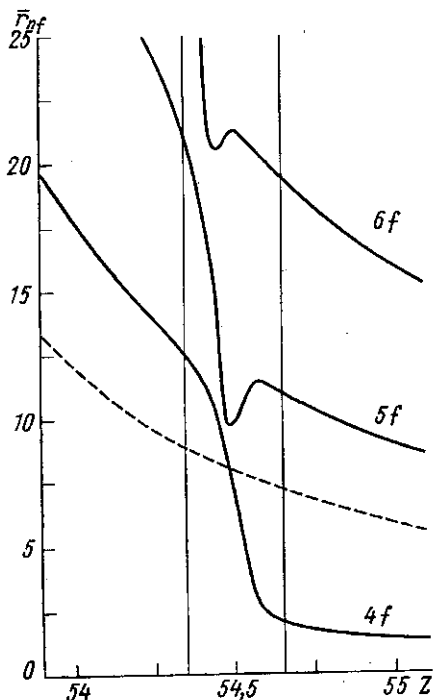


Рис. 2. Средние радиусы \bar{r}_{nf} nf -состояний в атомных единицах для Z из (1) и положение минимума внешней ямы потенциала (2) (штриховая линия)

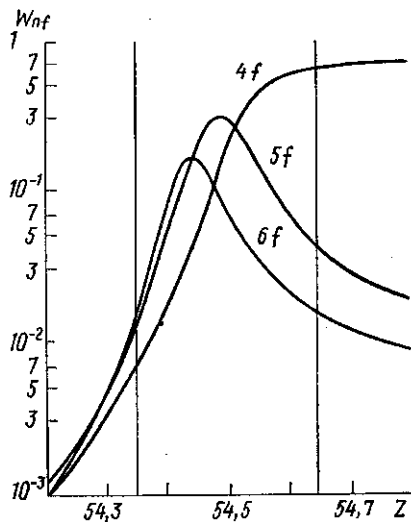


Рис. 3. Вероятности W_{nf} локализации nf -состояний во внутренней области иона в окрестности переходной области

ваются все процессы, связанные с коллапсом $4f$ -электрона. Общий вид кривых W_{nf} ($n > 4$) в пределах переходной области — резонансное прохождение через максимум — еще одно прямое свидетельство существования в ней множества квази- $4f$ -уровней, как об этом сказано выше.

Рассмотренные результаты находятся в качественном согласии с полученными для ряда нейтральных атомов, близких к La (или Eu), где также происходит коллапс $4f$ -электронов [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Майсте А. А. и др. ЖЭТФ, 1980, 78, с. 941. [2] Каразия Р. И. УФН, 1981, 135, № 1, с. 79. [3] Amusia M. Ya., Cherepkov N. A. Case Studies in Atom. Phys., 1975, 5, p. 47. [4] Griffin D. C., Andrew K. L., Cowan R. D. Phys. Rev., 1969, 177, p. 62. [5] Банд И. М., Тржасковская М. Б., Фоми-чев В. И. Изв. АН СССР, сер. физ., 1981, 45, с. 2268.

Поступила в редакцию
05.07.83