

СВЕРХТОНКОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ АТОМНЫХ УРОВНЕЙ И ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА НЕЙТРОННО-ИЗБЫТОЧНЫХ (ГАЛО) ЯДЕР

А. Исадыков

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы

В данной работе для расчета сверхтонкого расщепления используются упрощенный подход к описанию электронной волновой функции иона $^{11}\text{Be}^+$ и кластерная модель ядра ^{11}Be . В этом подходе исследуется чувствительность величины сверхтонкой аномалии (СТА) к распределениям магнетизации и заряда в ядре. Показано что с увеличением зарядового радиуса величина СТА падает, и растет с увеличением радиуса магнетизации, которая обусловлена валентным нейтроном. При расчете кулоновского потенциала учитывается конечный размер ядра.

1 Введение

Сверхтонкой структурой атомарных уровней называется расщепление электронных уровней, обусловленное взаимодействием магнитного дипольного момента ядра с магнитным полем электронов и электрического квадрупольного момента ядра с неоднородным электрическим полем внутри атома. На сегодняшний день величина сверхтонкого расщепления, а также связанные с ней величины, например, изотопический сдвиг, измерены для многих ядер, в том числе удаленных от линии стабильности [1-4]. С развитием новых экспериментальных методик (получения радиоактивных пучков, разработка ионных ловушек, разработка методик лазерной спектроскопии [5,6]) стало возможным измерение сверхтонкого расщепления в радиоактивных ядрах, в частности, в экзотических (нейтроно- или протонно-избыточных) гало-ядрах.

Эти ядра интересны тем, что в отличие от других нестабильных ядер представляют собой связанную систему стабильных фрагментов. Низколежащие состояния таких ядер в значительной степени определяются кластерными степенями свободы, и возбуждениями самих кластеров. Примерами таких ядер могут являться ^{11}Be , состоящий из кора и валентного нейтрона ($^{10}\text{Be} + n$), ^8B (^7Be и p), ^{11}Li ($^9\text{Li} + 2n$), ^6He ($^4\text{He} + 2n$) и т.д. Для таких ядер характерны низкие энергии связи валентных нуклонов (<2 МэВ) по сравнению со средними энергиями связи нуклонов в этих ядрах. Это приводит к широкому пространственному распределению валентных нуклонов.

2 Теоретическая модель

В гамильтониан сверхтонкого взаимодействия входят два слагаемых:

$$H_{\text{HF}} = H_{\mu} + H_Q, \quad (1)$$

где первое слагаемое определяет энергию взаимодействия магнитного дипольного момента ядра μ_I с электронным магнитным полем B внутри ядра. Второе слагаемое описывает взаимодействие квадрупольного момента ядра с градиентом электрического поля, создаваемого электронной оболочкой в ядре. Магнитное поле B складывается из магнитного поля, создаваемого орбитальным моментом электронов L и спина электронов s :

$$B = B_{el}^{(L)} + B_{el}^{(s)} \quad (2)$$

Вклады в магнитное поле:

$$B_{el}^{(s)} = -\frac{e}{2m_e c} g_s \left\{ \frac{3(\vec{n} \cdot \vec{s}')(\vec{n} \cdot \mu_I) - (\mu_I \cdot \vec{s}')}{|\vec{x}|^3} + \frac{8\pi}{3} (\mu_I \cdot \vec{s}') \delta(x) \right\} \quad (3)$$

В результате гамильтониан взаимодействия дипольного момента ядра с электронным магнитным полем принимает вид:

$$H_{\mu} = 2g_I\mu_N\mu_B \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{L_z} \sum_i \frac{\hat{I}_{zi}}{r_i^3} (\vec{I} \cdot \vec{L}) + g_I\mu_N g_S\mu_B \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{S_z} \sum_i \frac{\hat{S}_{zi}}{r_i^3} \{3(\vec{I} \cdot \vec{r})(\vec{S} \cdot \vec{r}) - (\vec{I} \cdot \vec{S})\} + \frac{2}{3} g_I\mu_N g_S\mu_B \frac{1}{S_z} \sum_i s_{zi} \delta^3(r_i) (\vec{I} \cdot \vec{S}). \quad (4)$$

μ_B - магнетон Бора.

Состояние атома характеризуется квантовым числом $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$, которое определяется как сумма полного углового момента электронов и полного момента ядра.

Величина расщепления задается матричным элементом

$$E_{\mu} = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)]A, \quad (5)$$

где $A = \frac{2eK\mu_N}{J+1} \sum_{i=0}^A \langle IJ|G|IJ \rangle$, а $G = \begin{cases} g_{li}L_{zi} + g_{si}S_{zi}, & r \leq R \\ g_{li}L_{zi} + g_{si}d_{zi} \frac{r}{R^3}, & r > R. \end{cases}$

r - электронная радиальная часть, R - ядерная радиальная часть. Заметим, что величина полного расщепления зависит и от электрического квадрупольного взаимодействия E_Q , т.е. $E = E_{\mu} + E_Q$. Поскольку целью этой работы является определение сверхтонкой магнитной аномалии (СМА), зависящая лишь от энергии магнитного расщепления (см. формулу (5)), мы не приводим хорошо известного выражения для E_Q (см. например [1]).

2.1 Ядерная волновая функция

Здесь мы рассматриваем сверхтонкое расщепление в Li-подобном ионе $^{11}\text{Be}^+$. Как показано в многочисленных работах [3,7] достаточно хорошей моделью для описания структуры ^{11}Be является двухчастичная модель. В этой модели ядро ^{11}Be состоит из кора ^{10}Be и валентного нейтрона в состоянии $2S_{1/2}$. Оба фрагменты, кор и нейтрон, дают вклад в магнитный момент ^{11}Be .

Волновая функция их относительного движения имеет вид:

$$\psi_{JM}^{J_x J_y I_y}(\vec{y}) = \sum_{m_{J_x} m_{J_y} m_{I_y} m_s} C_{J_x m_{J_x} J_y m_{J_y}}^{JM} C_{I_y m_{I_y} 1/2 m_s}^{J_y m_{J_y}} \chi_{1/2 m_s} \varphi_{J_x I_x}(\zeta_c) \phi_{J_y I_y m_{I_y}}(\vec{y}), \quad (6)$$

где $\chi_{1/2 m_s}$ - спиновая функция валентного нейтрона

$Y_{l_y m_{I_y}}(\Omega \vec{y})$ - сферическая функция, соответствующая относительно орбитальному движению нейтрона и кора с угловым моментом l_y и проекцией m_{I_y} , J_y и m_{J_y} - полный момент валентного нейтрона и его проекция. $\varphi_{J_x I_x}(\zeta_c)$ - внутренняя волновая функция кора ^{10}Be . Волновая функция валентного нейтрона

$$\phi_{J_y I_y m_{I_y}}(\vec{y}) = R_{J_y I_y}(y) Y_{l_y m_{I_y}}(\Omega \vec{y}), \quad (7)$$

где $R_{J_y I_y}(y)$ - радиальная часть волновой функции (6). Радиальная часть (7) может быть определена различными способами. Так в случае S-волнового нейтрона ее можно аппроксимировать функцией Юкавы с параметром α , соответствующем энергии отделения валентного нейтрона E_s :

$$R_{1/2 0}(\vec{y}) = \frac{\alpha^{1/2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-2y}}{y},$$

где $\alpha^2 = \frac{2\mu E_s}{(\hbar c)^2}$.

В этом случае легко получить среднее квадратичное расстояние от кора до валентного нейтрона:

$$\langle y^2 \rangle = \frac{1}{2\alpha^2} = \frac{(\hbar c)^2}{4mE_s}$$

Волновая функция может быть найдена как численное решение уравнения Шредингера с неким реалистическим потенциалом, параметры которого подобраны так, чтобы воспроизвести как E_s , так и среднеквадратичный радиус ядра $\langle y^2 \rangle$ (зарядовый и материальный). Они определяются разнообразными экспериментальными методами и представлены в литературе [8-10].

2.2 Волновая функция электрона в уравнении Дирака

Уравнение Дирака в полярной форме записывается как:

$$W\psi = H\psi = \left[i\gamma_5 \sigma_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{\beta}{r} K \right) + V + \beta \right] \psi, \quad (8)$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Собственная функция Дирак-Кулоновского гамильтониана имеет вид

$$\psi_{kjm_j} = \begin{bmatrix} g(r) \chi_{lk}^{jm_j}(\theta, \varphi) \\ if(r) \chi_{l-k}^{jm_j}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}. \quad (10)$$

2.2.1 Решения уравнения Дирака для электрона в кулоновском поле точечного заряда

Уравнения Дирака для двух компонентной волновой функции [11]:

$$\begin{cases} \frac{1}{\hbar c} (E - mc^2 - V(r))f + \frac{dg}{dr} - \frac{k}{r} g = 0 \\ \frac{1}{\hbar c} (E + mc^2 - V(r))g + \frac{df}{dr} - \frac{k}{r} f = 0 \end{cases} \quad (11)$$

В случае водородоподобных атомов потенциал:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} = -\frac{Za\hbar c}{r} \quad (12)$$

Решение системы уравнений находится в виде рядов

$$\left. \begin{aligned} f(\rho) &= e^{-\rho} \sum_{v=0}^{\infty} \rho^{s+v} a_v \\ g(\rho) &= e^{-\rho} \sum_{v=0}^{\infty} \rho^{s+v} b_v \end{aligned} \right\}, \quad (13)$$

$$E_N = \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{N + \sqrt{k^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (14)$$

где $N=0,1,2,\dots$, $k = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

2.2.2 Волновая функция электрона в кулоновском поле ядра конечного размера

В случае конечного ядра, то есть для распределенного заряда, кулоновский потенциал записывается как:

$$V(r) = \frac{Z\alpha\hbar c}{r} \int_0^r \rho_{ch}(x)x^2 dx + Z\alpha\hbar c \int_r^\infty \rho_{ch}(x)xdx, \quad (15)$$

где ρ_{ch} - распределение заряда в ядре.

Распределение заряда в ядре ^{11}Be записывается через свертку зарядового распределения кора с волновой функцией относительного движения кор-нейтрон:

$$\rho_{ch}(r) = \int |\phi(\vec{x})|^2 Z_c \rho_c \left(\left| \vec{r} - \frac{m_n}{m_n + m_c} \vec{x} \right| \right) d^3 \xi_c, \quad (16)$$

где ρ_c - плотность заряда кора.

Распределение нейтронов в ^{11}Be :

$$\rho_n(r) = \int |\phi(\vec{x})|^2 \left[N_c \rho_c \left(\left| \vec{r} - \frac{m_n}{m_n + m_c} \vec{x} \right| \right) + 1 \right]. \quad (17)$$

Распределение магнетизации:

$$\rho_\mu = \{g_I \mu_N \rho_n\} + \{g_I \mu_I \rho_{ch}\}. \quad (18)$$

В области ядра мы имеем значительное различие в поведении потенциала. Таким образом, можно ожидать, что именно в этой области учет конечного ядра приведет к изменению волновой функции электрона. В этом и состоит эффект сверхтонкой аномалии (см. ниже - формула (29)).

2.3 Эффект экранирования 1s электронов в Li-подобном ионе

Выше мы рассмотрели случай вычисления волновой функции электрона в водородоподобном атоме. В случае Li-подобного атома необходимо учитывать все три электрона. В общем случае такой учет сводится к решению многочастичной задачи. В наших расчетах мы постараемся свести задачу к двухчастичной, модифицируя потенциал кулоновского взаимодействия.

Для этого предположим, что два электрона находятся в замкнутой оболочке в состоянии 1S. В этом случае они не дают вклад в магнитный момент электронов и соответственно в магнитном поле.

Магнитный момент полностью определяется электроном в незамкнутой оболочке в состоянии 2S[12-14].

Экранированный кулоновский потенциал вычисляется из (12) как:

$$V(r) = \frac{Z\alpha\hbar c}{r} \int_0^r |\psi_{12}|^2 x^2 dx + Z\alpha\hbar c \int_r^\infty |\psi_{12}|^2 x dx. \quad (19)$$

Таким образом, экранированный потенциал записывается как:

$$V(r) = \frac{Z\alpha\hbar c}{r} \Phi(r) \quad (20)$$

Функция, учитывающая экранировку имеет вид:

$$\Phi(r) = 1 - \frac{4\pi}{Z} \left\{ \int_0^r \rho_{el}(x)x^2 dx + r \int_r^\infty \rho_{el}(x)xdx \right\} + \frac{C_s}{Z} (81/8\pi)^{1/3} \rho_{el}^{1/3}(r), \quad (21)$$

где $\rho_{el}(x) = \int_0^{\infty} |\psi_{12}|^2 d^3r_{12}$, последний член поправка обмена Слэтера, для которого обычно $C_3=1$. Этот потенциал, представленный в интегральной форме, может быть достаточно хорошо аппроксимирован экспоненциальной функцией.

$$V(r) = \frac{z\alpha\hbar c}{r} \frac{1}{2}(e^{-\varpi r} + 1) = \frac{Z_{eff}(r)\alpha\hbar c}{r}, \quad (22)$$

где ϖ подобрано из условия наилучшего описания экранирующего потенциала. В случае иона ^{11}Be мы имеем $\varpi=0.000068 \text{ fm}^{-1}$. Таким образом, мы введем эффективный заряд, который меняется очень медленно по сравнению с изменением волновой функции. Энергия зависит от радиуса как

$$E(r) = \left[1 + \left(\frac{\alpha Z_{eff}(r)}{N + \sqrt{k^2 - (\alpha Z_{eff}(r))^2}} \right)^2 \right]^{-1/2}. \quad (23)$$

На рисунке 1а и 1б приводятся результаты расчетов волновой функции с учетом (16) и без учета (1а) экранировки. Видно, что в случае экранировки кулоновского потенциала волновая функция (13) электрона примерно в 2 раза шире.

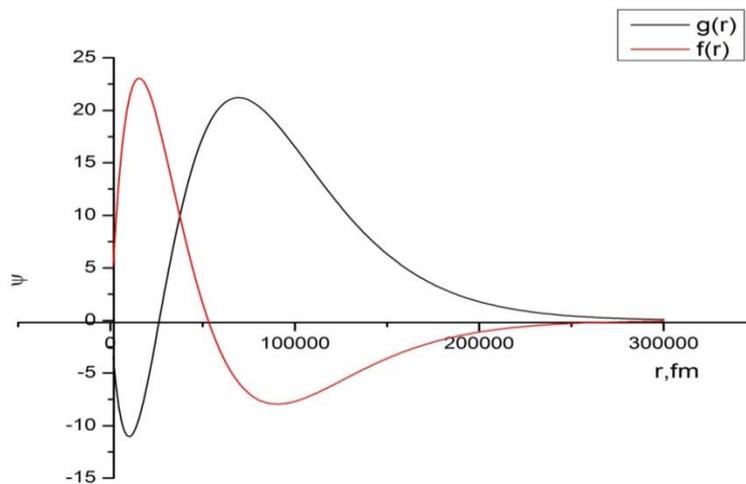


Рис. 1а. Волновая функция 2s электрона, рассчитанная с неэкранированным (12) кулоновским потенциалом. Красной линией показаны f функции и черной линией g функции

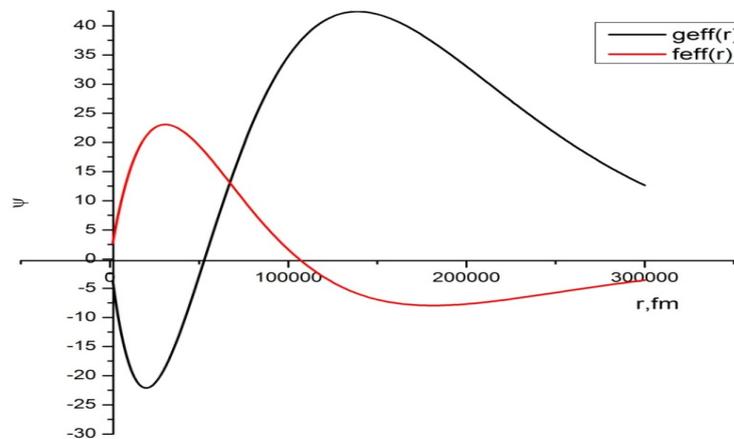


Рис. 1б. Волновая функция 2s электрона, рассчитанная с экранированным (22) кулоновским потенциалом. Красной линией показаны f функции и черной линией g функции

2.4 Константа Сверхтонкого расщепления (СТР)

Для конечного ядра энергия возмущения выглядит следующим образом:

$$W' = \frac{1}{2} \{F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)\} a_I, \quad (24)$$

где константа сверхтонкого расщепления

$$\begin{aligned} a_I &= -\frac{2ek}{Ij(j+1)} \left\langle \hat{O}_I^{M_F} \left| \frac{1}{2} \int (R \times J(R))_z d^3 R \left\{ \int_{r>R} f_k g_k dr_e + \int_{r>R} \frac{r^3}{R^3} f_k g_k dr \right\} \right| \hat{O}_I^{M_F} \right\rangle = \\ &= -\frac{2ek}{Ij(j+1)} \left\langle \hat{O}_I^{M_F} \left| \frac{1}{2} \int (R \times J(R))_z d^3 R \left\{ \int_0^\infty f_k g_k dr_e - \int_0^R f_k g_k dr_e + \int_0^R \frac{r^3}{R^3} f_k g_k dr \right\} \right| \hat{O}_I^{M_F} \right\rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

Она может быть записана как константа для точечного ядра с поправкой $a_I^{(I)}$:

$$a_I = a_I^{(0)} (1 + \epsilon) = a_I^{(0)} + a_I^{(I)}, \quad (26)$$

где величина сверхтонкой аномалии (СТА) ϵ определяется как:

$$\epsilon = -\frac{\int_0^R f_k g_k dr_e - \int_0^R \frac{r^3}{R^3} f_k g_k dr}{\int_0^\infty f_k g_k dr_e}. \quad (27)$$

Для ^{11}Be магнитный момент рассчитывается как:

$$\mu = \alpha^2 \mu_N (2S_{1/2}) + \frac{7}{15} \beta^2 \mu_N (1d_{5/2}) - \frac{1}{3} \beta^2 \mu (2^+), \quad (28)$$

где α^2 и β^2 - веса. В данной работе мы взяли $\alpha^2=1$. При этом мы получаем величину магнитного момента $-1.913 \mu_N$, в то время как экспериментальная величина составляет $-1.6813(5) \mu_N$ [15].

Для ^{11}Be μ и ϵ :

$$\begin{aligned} \mu &= -1.913 \cdot \alpha^2 - (0.3585 + 1.1298 g_s^{\text{eff}}) \beta^2, \\ \epsilon &= -\frac{g_s^{(n)} S_z \int_0^\infty dR \left(\int_0^R f_k g_k dr - \frac{D_z}{S_z} \int_0^R \frac{r^3}{R^3} f_k g_k dr \right) |\psi_{\text{nucl}}(R)|^2 R^2}{\mu_I \int_0^\infty f_k^{(0)} g_k^{(0)} dr}. \end{aligned} \quad (29)$$

3 Результаты расчета для ^{11}Be

Мы варьируем нейтронный радиус в пределах от 2 до 7 фм, а зарядовый радиус от 2 до 4 фм. Характерные изменения величины СТА сравнимы, но имеют разные функциональные зависимости. С увеличением зарядового радиуса абсолютное значение величины СТА падает, и растет с увеличением радиуса магнетизации, обусловленной валентным нейтроном (рис. 2).

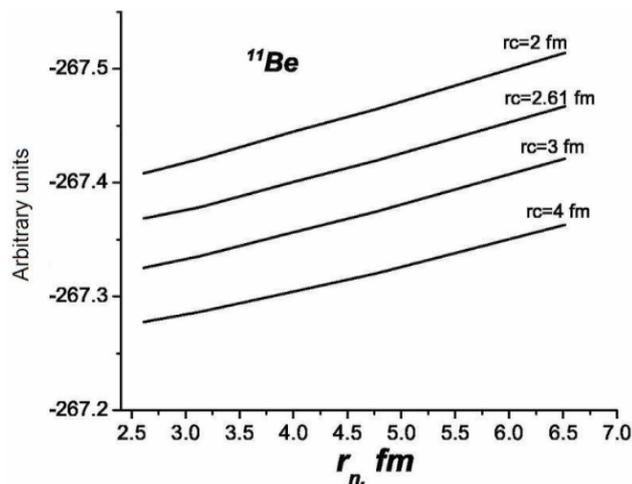


Рис. 2. Зависимость ϵ от нейтронного радиуса (r_n) посчитанная для разных значений зарядового радиуса r_c

Выводы

1. С увеличением зарядового радиуса величина СТА падает, и растет с увеличением радиуса магнетизации, обусловленной широким распределением валентного нейтрона. Таким образом, при анализе экспериментальных данных по сверхтонкому расщеплению очень важно учитывать разницу в распределениях магнетизации и заряда.

2. В случае экранировки кулоновского потенциала волновая функция (13) электрона в экранированном кулоновском потенциале примерно в 2 раза шире.

3. Необходимо отметить, что оценки величины сверхтонкой аномалии и сверхтонкого расщепления были уже проведены для ^{11}Be (см. например, [16]). Исследовалась связь зарядового радиуса ядра из величины СТА. При этом радиусы магнетизации и зарядового распределения полагались одинаковыми. Таким образом, до настоящего дня вопрос о различии в распределениях магнетизации и заряда не затрагивался.

Литература

1. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. - ФМ, Москва, 1963.
2. Johnson J., Sorensen R.A. // Phys.Rev. C2, 1970. – P.102.
3. Fujita T., Arima A. // Nucl.Phys. A254, 1975. –P.513.
4. Žáková M., Andjelkovic Z. et. al. Isotope shift measurements in the $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ transition of Be^+ and extraction of the nuclear charge radii for $^{7,10,11}\text{Be}$ //J. Phys. G 37, 2010, 055107.
5. Otten E.W. Nuclear radii and moments of unstable isotopes, Treatise on heavy-ion science // Bromley D.A., Editor, 1989. –P.517-638.
6. Kluge H.-J. Atomic physics techniques for studying nuclear ground state properties, fundamental interactions and symmetries: status and perspectives // Hyperfine Interact. 196, 2010, - P. 295.
7. Parfenova Y., Leclercq-Willain Ch. // Phys. Rev. C 72, 2005, 024312.
8. Ozawa A. et al. // Nucl.Phys. A 691, 2001, 599.
9. De Vries H. et al. // Phys.Rev.Lett. 43, 1979, 1373.
10. Angeli I., // At. Data Nucl. Data Tables 87, 2004, 185.
11. Давыдов А.С., Квантовая механика. – М.: Наука, 1973. - С.315-319.
12. Asaga T. et al., Hyperfine anomaly in hydrogen and hydrogen-like high Z atoms // Nihon University Report No.NUP-98-3, 1998.

13. Enders K. et al. // Phys. Rev. A **52**, 1995, 4434.
14. Wada M. et al. // Nucl. Phys. A **626**, 1997, 365.
15. Nörtershäuser W., Tiedemann D., Záková M. Nuclear Charge Radii of $^{7,9,10}\text{Be}$ and the One-Neutron Halo Nucleus ^{11}Be // Phys. Rev. Lett. **102**, 2009, 062503.
16. Fujita T., Ito K., Suzuki T. // Phys. Rev. C **59**, 1999, 210.

АТОМДЫҚ ДЕҢГЕЙЛЕРДІҢ АСА НӘЗІК ТҮЗІЛІСІ ЖӘНЕ НЕЙТРОНДЫ АРТЫҚ (ГАЛО) ЯДРОЛАРДЫҢ КЕҢІСТІК ҚҰРЫЛЫМЫ

А. Исадыков

Бұл жұмыста аса нәзік түзілісіндегі есептеулер жүргізу кезінде $^{11}\text{Be}^+$ ионының электрондық толқындық функциясын сипаттауға және ^{11}Be кластерлік моделінің оңайтылған әдісі қолданылды. Бұл әдісте ядроның зарядының және магниттелуінің таралуына аса нәзік аномаль шамасының сезімталдығы зерттелінді. Зарядтың таралу радиусы өскен сайын аса нәзік аномаль шамасы төмендейді, ал валенттік нейтронмен байланысты магниттелу радиусы өскенде-төмендейді. Кулон потенциалын есептеу барысында ядроның ақырғы өлшемі ескеріледі.

SUPERTHIN SPLITTING OF NUCLEAR LEVELS AND SPATIAL STRUCTURE NEUTRON SUPERFLUOUS (GALO) NUCLEUS

A. Isadykov

In the given work for calculation of superthin splitting are used the simplified approach to the description of electronic wave function of an ion $^{11}\text{Be}^+$ and the cluster model of a nucleus ^{11}Be . In this approach sensitivity of size of superthin anomaly (STA) distributions of magnetization and a charge in a nucleus is investigated. It is shown that with increase in charging radius the size of STA falls, and grows with increase in radius of magnetization which is caused by a valent neutron. At calculation of a kulon potential the final size of a nucleus is taken into account.