

КОЛЛЕКТИВНЫЕ УРОВНИ В ТЯЖЕЛЫХ АТОМАХ

Г.В. Гадияк¹⁾, Д.А. Киржниц, Ю.Е. Лозовик²⁾

Показано, что спектр возбуждений оболочки тяжелого атома содержит два оптически активных коллективных уровня с малой шириной. Тем самым, вопрос о реальном существовании коллективных возбуждений атома решается положительным образом.

¹⁾ Вычислительный Центр СО АН СССР.

²⁾ Институт спектроскопии АН СССР.

Вопрос о коллективных уровнях (КУ) электронной оболочки тяжелого атома¹⁾, подобных плазменным колебаниям в макроскопических средах, поставлен уже давно [1] (см. также обзор [2]). Однако, его решению препятствовало отсутствие данных о ширине Γ таких уровней. Из общих соображений ясно [2], что в атоме, в отличие от однородной среды, отношение Γ к энергии уровня ω не содержит малых буквенных параметров. Поэтому только численный расчет мог бы привести к малой величине этого отношения и, тем самым, к выводу о реальном существовании КУ. Ниже приводятся результаты такого расчета и их обсуждение.

1. Для микроскопического описания неоднородной электронной оболочки тяжелого ($Z \gg 1$) атома можно использовать приближение случайных фаз в сочетании с квазиклассическим рассмотрением одночастичных состояний; точность такого приближения определяется параметром $Z^{-2/3}$. Это ведет к выражению для продольной диэлектрической проницаемости системы [4, 2]

$$\epsilon(\omega, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) + \frac{p_0(\mathbf{x}_1)}{\pi^2} \left\{ \frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} + i|\omega| \int_{-\infty}^0 dt \frac{\exp(-it\omega)}{|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_2|} \right\}. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{x}(t)$ – классическая траектория электрона в поле Томаса – Ферми $U(\mathbf{x})$, т. е. решение уравнения $\dot{\mathbf{x}} = -\nabla U$ с начальными условиями $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_1$, $\dot{\mathbf{x}}(0) = p_0(\mathbf{x}_1)\mathbf{n}$; $p_0 = [2(\mu - U)]^{1/2}$ – граничный импульс; черта означает усреднение по направлениям единичного вектора \mathbf{n} ; граничная энергия в нейтральном атоме $\mu = 0$; в статье используются атомные единицы. Частота и затухание КУ определяются действительной и мнимой частями собственного значения уравнения

$$\int d\mathbf{x}_2 \epsilon(\omega, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \phi(\mathbf{x}_2) = 0, \quad (2)$$

где при соответствующей нормировке ϕ – изменение электронной плотности при возбуждении атома.

Использованные при выводе (1) приближения справедливы лишь в сердцевине атома радиуса $R \sim Z^{-1/3}$. Будем рассматривать лишь КУ, локализованные в пределах этой области, налагая граничное условие к (2) в виде $\phi(R) = 0$. Свидетельством локализованности КУ будет служить плато в зависимостях $\omega(R)$, $\Gamma(R)$ (см. ниже рис. 1). Второе очевидное граничное условие имеет вид $\phi(0) < \infty$.

2. При конкретных расчетах использовалось приближение Титца [5]

$$U = Z/[r(1 + \xi)^2], \quad \xi = r/a, \quad a = (9\pi/16)^{1/3}.$$

Траектории в таком поле представляют собой замкнутые самопересекающиеся кривые (период движения T). Нетрудно показать, что мнимая

¹⁾ Речь идет лишь об "истинно" КУ представляющих собой особую ветвь спектра возбуждений (колебания заряженной жидкой капли) и имеющих специфические квантовые числа. Мы не рассматриваем коллективные эффекты в одночастичных переходах, которые исследовались во многих недавних работах (см., например, [3]).

часть ϵ , ведущая к затуханию КУ, связана с полюсами ϵ в точках $\omega T = 2\pi k$ (k — целое число). Это условие отвечает резонансу с одночастичными квазиклассическими переходами. Поэтому обсуждаемое затухание — прямой аналог обычного затухания Ландау в однородной системе.

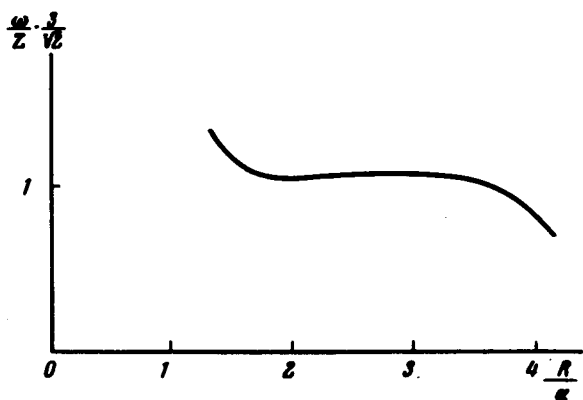


Рис.1

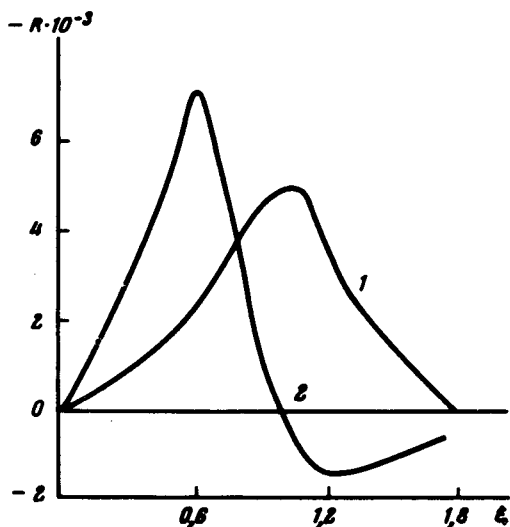


Рис.2

Будучи величиной, пропорциональной Z (см. [2] и ниже (3)), затухание Ландау играет буквально наиболее важную роль. Кроме того, имеется радиационное затухание, безусловно малое по сравнению с ω . Более существенен механизм затухания, связанный с выходом возбуждения на наружные оболочки атома; его описание потребовало бы привлечения специальных методов. Ясно, однако, что соответствующая ширина не зависит от Z и потому мала по сравнению с ω , хотя и может стать сравнимой с вычисляемой в этой работе величиной Γ , которая оказывается численно аномально малой (см. ниже (3)).

3. Численный расчет проводился на ЭВМ БЭСМ-6 ВЦ СО АН СССР методом дополненного вектора [6]. В результате поиска КУ с относительно малой шириной обнаружено два таких уровня, относящихся к дипольному типу ($\phi(x) = R(r) \cos \theta$).

$$\omega_1 = 13,74 Z \text{ эв}, \Gamma_1 = 3 \cdot 10^{-3} Z \text{ эв}; \quad \omega_2 = 36,04 Z \text{ эв}, \Gamma_2 \approx 10^{-4} Z \text{ эв}.$$

(3)

Эти значения отвечают плато на кривых $\omega(R)$, $\Gamma(R)$ (см. рис. 1, где приведена лишь первая кривая; вторая имеет аналогичный вид). На рис. 2 приведены соответствующие собственные функции уравнения (2).

Интересно отметить, что физическая картина КУ отвечает, грубо говоря, колебаниям оболочки как целого относительно ядра (эта картина уже давно обсуждалась Е.Л.Фейнбергом); однако, на самом деле оболочка несколько деформируется, оставаясь неподвижной вблизи ядра и на периферии атома.

4. Вопрос об экспериментальном проявлении КУ не прост и требует специального обсуждения. Возможно, что КУ могли бы проявиться как узкие резонансы в сечении фотопоглощения, а также привести к характерной "боровской" картине протекания атомных реакций [2].

Подробное изложение результатов этой статьи, а также расчетов сил осцилляторов КУ будет предметом отдельных работ.

Мы благодарны Е.Л.Фейнбергу и участникам руководимого им семинара за полезные дискуссии.

Физический институт
им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
12 декабря 1974 г.

Литература

- [1] F. Bloch. Z.Phys., **81**, 363, 1933; H. Jensen. Z.Phys., **106**, 620, 1937.
- [2] Д.А.Киржниц, Ю.Е.Лозовик. УФН, **89**, 39, 1966.
- [3] W.Brandt, L.Eder, S.Lundqvist. JQRST **7**, 185. 1967; G.Wendin. Phys. Lett., **37A**, 445, 1971; J. Phys., **B5**, 110, 1972; **B6**, 42. 1972; М.Я.Амусья, Н.А.Черепков, С.Г.Шапиро. ЖЭТФ, **63**, 889, 1972.
- [4] Д.А.Киржниц, Ю.Е.Лозовик. Препринт ФИАН А-111, М., 1965; Д.А.Kirzhnits. Field Theoretical Methods in Manybody Systems, Perg, Press, Oxford, 1967.
- [5] T.Tietz, J. Chem. Phys., **22**, 2094, 1954.
- [6] Н.И.Калиткин. ЖВМ и МФ, **5**, 1107, 1965.