arXiv:2305.01208v1 [physics.atom-ph] 2 May 2023

有限核尺寸对电四极超精细算符的影响

V. A. Dzuba、V. V. Flambaum*School of Physics,*
University of New South Wales, Sydney 2052, Australia

我们给出了一个考虑有限核尺寸的电四极超精细相互作用算符表达式。我们将使用该算符得到的结果与忽略有限核尺寸的标准方法所得结果进行了比较。我们发现，在类氢系统中，更换算符对超精细常数 B 的影响很小。在多电子原子中，这种影响显著增强，这是由较大的 $s_{1/2}-d_{3/2}$、$d_{5/2}$ 和 $p_{1/2}-p_{3/2}$ 非对角矩阵元对原子实极化、关联修正和组态相互作用修正的贡献所致。电四极超精细相互作用诱导的跃迁振幅也会出现类似的增强。

PACS 编号:

I. 引言

研究重原子与超重原子系统中的超精细结构（hfs），是获取原子核信息的一种重要手段 [1, 2]。通过比较实验测得的超精细结构与理论计算得到的磁偶极超精细结构常数 A 及电四极超精细结构常数 B，可以提取核磁矩 μ 和核电四极矩 Q。形变核中的电四极效应 Q 会显著增强。这有助于搜寻核稳定岛，因为预计岛附近的原子核呈球形（例如参见 [3]）。

有限核尺寸对磁性超精细结构常数 A 的影响已在大量文献中得到广泛研究。只需提及玻尔–魏斯科普夫效应：常数 A 并不与核磁矩严格成正比，因为它还取决于原子核内部磁化强度的分布——例如参见 [4–12] 及其中的参考文献。另一方面，我们尚未发现关于有限核尺寸对电四极超精细结构常数影响的此类研究。

II. 电四极算符

电四极超精细相互作用（ Q_{20} 分量）的标准算符形式为 [1, 2]

$$\hat{Q} = Y_{20}/r^3, \tag{1}$$

其中， Y_{20} 是球函数， r 是到原子核的距离。这里省略了一个系数，因为它对后续讨论没有影响；我们将讨论超精细结构常数 B 的相对修正，即 $\delta B/B$。根据问题的对称性，我们可以得出，原子核中心处的四极电场为零，$\mathbf{E} = -\nabla\phi = 0$。梯度为零意味着， $r = 0$附近的四极静电势为 $\phi \propto r^2 Y_{20}$。由此得到一个简单的解析形式的四极算符，它考虑了有限核半径 R:

$$\hat{Q} = F(r)Y_{20}, \qquad F(r) = \begin{cases} r^2/R^5, & r \le R \\ 1/r^3, & r > R \end{cases} \tag{2}$$

III. 有限核尺寸效应的定性考察

我们先定性考察 B 对核半径 R的依赖关系。奇异四极算符（1）的矩阵元积分主要由原子核附近的小距离 r 决定；在此处，我们可以忽略电子能量（相对于库仑势而言），也可以忽略电子对核库仑势的屏蔽。零能量下，库仑场中的径向狄拉克方程的解可用贝塞尔函数 $J_{\gamma_j}(x)$和 $J_{\gamma_j-1}(x)$表示，其中$\gamma_j = \sqrt{(j+1/2)^2 - Z^2\alpha^2}$， j 是电子角动量， Z 是核电荷， α 是精细结构常数， $x = (8Zr/a)^{1/2}$ 是无量纲距离变量， a 是玻尔半径——参见例如文献 [13, 14]。因此，电子电荷密度的径向依赖关系可表示为

$$\rho(r) = \frac{C_{nlj}}{r^2} f(x), \tag{3}$$

其中，归一化常数 C_{nlj} 可以省略，因为它在比值 $\delta B/B$ 中会相互抵消；无量纲函数 $f(x)$表示为贝塞尔函数的乘积。算符 (1) 的矩阵元可表示为

$$B \sim \int_0^\infty \frac{\rho(r)}{r^3} f(x) r^2 dr = C_{nlj}\,(8Z/a)^2\, I, \tag{4}$$
$$I = 2\int_0^\infty \frac{f(x)}{x^3} dx \sim 1$$

在原子核附近，当 $x \ll 1$时，贝塞尔函数 $J_{\gamma_j}(x)$ 可以展开，我们有 [13, 14]

$$\rho(r) = C_{nlj}\,(8Z/a)^{2\gamma_j}\, r^{2(\gamma_j-1)}. \tag{5}$$

如果我们使用算符 (2) 代替奇异算符 (1)，原子核内部区域的贡献会显著减弱，这种效应会使超精细结构常数 B 发生变化，

$$\delta B \sim -C_{nlj}\int_0^R \frac{\rho(r)}{r^3} f(x) r^2 dr,$$
$$\frac{\delta B}{B} \sim -\left(\frac{RZ}{a}\right)^{2(\gamma_j-1)}. \quad (6)$$

应注意，密度 $\rho(r)$ 的式 (5) 在原子核外有效，此处核库仑势等于 $V(r) = -Ze^2/r$。然而，实际上，几乎所有超精细结构的数值计算都已在电子波函数中考虑了原子核的有限尺寸。文献 [13, 14] 对有限尺寸原子核势 $V(r)$（而非点状势 $V(r) = -Ze^2/r$）中的电子波函数进行了解析计算。主要区别在于，主导项为 $\rho(r) \propto r^{2j-1}$（而非 $r^{2(\gamma_j-1)}$；r 的幂次差异为 $\sim Z^2\alpha^2/(j+1/2)$）。原子核内部对 $\rho(r)$ 的这种修正会在 $\delta B/B$ 的估算中引入系数 ~ 1，但不会改变任何结论。这很容易解释，因为对于 $r > R$，库仑波函数为原子核内部的解在 $r = R$ 处提供边界条件，因此，无论如何，$\delta B/B$ 的估算中都会出现因子 $\left(\frac{RZ}{a}\right)^{2(\gamma_j-1)}$。

$s_{1/2}$ 和 $p_{1/2}$ 电子态的B为零。对于总角动量为 $j > 1/2$ 的态进行简单估算，得到的 $\delta B/B$ 仅为百分之几的很小一部分。事实上，式（6）中小参数 RZ/a的幂次为正，从小 $Z\alpha$ 时的 2 到Z=137时的 1.46。不过，这种朴素估算仅适用于类氢单电子原子。

在多电子原子中，原子实极化修正和其他关联修正包含超精细相互作用算符的大非对角矩阵元，例如 $\langle s_{1/2}|Q|d_{3/2}\rangle$、$\langle s_{1/2}|Q|d_{5/2}\rangle$ 和 $\langle p_{1/2}|Q|p_{3/2}\rangle$。这些大的非对角矩阵元可能会显著增强组态混合对 B的影响。它们还会导致电四极超精细相互作用诱发的跃迁振幅——例如参见文献 [15], ，其中计算了E3跃迁和M2跃迁原子钟跃迁的跃迁概率，这些跃迁在超精细相互作用算符的作用下转化为E1跃迁。对于点状原子核，电子波函数$s_{1/2}$ 和 $p_{1/2}$ 趋于无穷大，这显著提高了对原子核尺寸的敏感性:

$$\frac{\delta B}{B} \sim \left(\frac{RZ}{a}\right)^{\gamma_{1/2}+\gamma_{3/2}-2} \quad (7)$$

小参数 RZ/a 的幂对 $Z > 132$变为负值（这意味着对于 $R = 0$，$\delta B/B$ 为“无穷大”）。然而，对于$Z > 80$，比值 $\delta B/B$ 可能已经超过 1%。因此，我们应在原子核内部使用更精确的电四极超精细算符（2）。下方

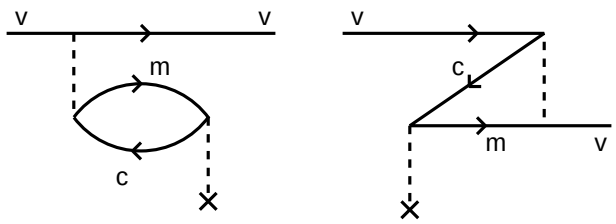

图 1：一阶原子实极化修正。叉号表示电四极算符，v 为价态，c 为原子实中的一个态，m 为原子实上方的虚态。

我们通过精确的数值计算来补充粗略估算。

IV. 类氢系统

我们从类氢系统开始研究。我们使用电荷在核体积上的费米分布，其中 $R = 1.2A^{1/3}$，这里 A 是原子核中的核子数。在（2）中使用相同的核半径。我们计算算符 $\hat{}Q$ 对于 $3s$、$3p_{1/2}$、$3p_{3/2}$、$3d_{3/2}$ 和 $3d_{5/2}$ 态的允许对角和非对角矩阵元。注意，具有相同对称性的所有单电子态在短距离上彼此成比例，因此，研究中可以使用具有任意主量子数 n 的态。我们选择 $n = 3$ 只是为了方便。计算针对一组不同的核电荷 $\hat{} Z$ 值以及算符 Q的两种形式（1）和（2）进行。结果在表 I 中进行比较。结果表示为两种算符形式之间的百分比差异。可以看到，对角矩阵元的差异很小。对于 $Z = 120$，差异达到 $\sim 10^{-3}$。还要注意，对于具有 $j > 3/2$的态，该效应实际上为零。然而，对于涉及$s_{1/2}$ 或 $p_{1/2}$ 态的非对角矩阵元，该效应要大得多。这是因为这些态会穿透到原子核内部。对于$Z = 83$（铋原子），该效应达到 $\sim$ 1%，而对于更高的 Z，效应甚至更大（见表 I）。

V. 多电子原子

接下来，我们研究将电四极矩算符 Q 从（1）改为（2）对多电子原子中对角矩阵元（即电四极矩常数 B）的影响。作为示例，我们考察电子结构相对简单、闭壳层之上有一个电子的重原子或离子。在含有多个价电子的原子中，由于较大的组态混合涉及算符 $\hat{} Q$ 的 $s_{1/2} - d_{3/2}$、$d_{5/2}$ 和$p_{1/2} - p_{3/2}$ 矩阵元，这种影响可能会更大。计算在 V^{N-1}近似下进行，这意味着初始相对论

表 I：对于类氢单电子波函数的矩阵元，改变电四极算符所产生的影响（百分比）。最后五列中的数值为 100($m_0/m_1 - 1$)，其中 m_0 是用教科书公式 (1) 计算的矩阵元， m_1 是用修正后的公式 (2) 计算的矩阵元， R 是核半径，单位为 fm。

Z	A	R	$s_{1/2} - d_{3/2}$	$s_{1/2} - d_{5/2}$	$p_{1/2} - p_{3/2}$	$p_{3/2} - p_{3/2}$	$d_{3/2} - d_{3/2}$
10	21	3.31071	0.0103	0.0647	0.0001	0.0000	0.0000
20	43	4.20408	0.0340	0.1118	0.0005	0.0001	0.0000
30	67	4.87386	0.0699	0.1664	0.0022	0.0004	0.0000
40	91	5.39753	0.1220	0.2341	0.0066	0.0009	0.0000
50	119	5.90242	0.1985	0.3296	0.0167	0.0020	0.0000
60	145	6.30431	0.3067	0.4538	0.0371	0.0037	0.0001
70	171	6.66060	0.4644	0.6306	0.0772	0.0067	0.0003
80	199	7.00593	0.6936	0.8877	0.1537	0.0118	0.0007
83	239	7.44699	0.8075	1.0685	0.1953	0.0150	0.0010
92	235	7.40521	1.1079	1.3601	0.3354	0.0223	0.0018
100	245	7.50879	1.4816	1.7606	0.5419	0.0326	0.0032
120	295	7.98832	3.0962	3.6355	1.7239	0.0879	0.0128

表 II：对于多电子原子和离子的价单电子波函数的对角矩阵元，改变电四极算符所产生的影响（百分比）。最后五列中的数值为 100($m_0/m_1 - 1$)，其中 $m_0 = \langle v|\hat{Q}|v\rangle$ 是用教科书公式 (1) 计算的矩阵元， m_1 是用正确公式 (2) 计算的矩阵元。Fr、U、镄和锘对应 $n = 7$ ，E120 对应 $n = 8$ 。

Z	Atom	$v = np_{3/2}$	$v = (n-1)d_{3/2}$	$v = (n-1)d_{5/2}$	$v = (n-2)f_{5/2}$	$v = (n-2)f_{7/2}$
87	Fr I	0.059	0.037	0.216	0.162	0.165
92	U VI	0.041	-0.020	0.070	0.073	0.088
100	Fm I				0.069	0.072
102	锘 II	0.108	-0.090	0.392		
120	E120 II	0.433	-1.373	1.664	1.315	1.526

对闭壳层原子实进行哈特里－福克（RHF）计算，外层电子的态则在冻结原子实的场中计算。为计算 Q 算符的矩阵元，我们采用含时哈特里－福克方法，该方法等价于众所周知的随机相位近似（RPA）——参见例如 [2]。RPA方程可写为（参见例如 [16]）

$$(\hat{H}_0 - \epsilon_c)\delta\psi_c = -(\hat{Q} + \delta V)\psi_c. \tag{8}$$

这里， H_0 是RHF算符，指标 c 表示原子实中的态， ψ_c 是原子实中特定态的单电子波函数， $\delta\psi_c$ 是外场 Q 引起的 ψ_c 修正， δV是由所有原子实波函数变化引起的自洽RHF势修正。对原子实中的所有态自洽求解RPA方程（8），以求得 δV。随后计算价电子态 v 的矩阵元，即$\langle v|Q + \delta V|v\rangle$。

计算结果列于表 II 中。我们纳入了 Fr 和 U，它们是备受实验关注的重原子。我们还纳入了镄和锘，它们是目前正在进行原子光谱测量的最重原子 [17–22]。我们纳入 E120，以展示在极高 Z 下这一效应可能有多大。由表可见，多电子原子中的 B 效应显著大于类氢系统中的效应（见表 I）。这是由于.....的贡献。

表 III：E120 II 价电子态矩阵元的原子实极化修正相对值，以及其在不同原子实通道上的分解（所有数值均为百分比）。原子实极化修正 $\langle v|\delta V|v\rangle$ 与总矩阵元 $\langle v|\hat{Q} + \delta V|v\rangle$ 有关。一个通道是对给定类型的所有原子实态（$s_{1/2}$、$p_{1/2}$ 等）以及原子实极化表达式中所有可能的激发态求和（见图 1 中的示意图）。

	$v = 8p_{3/2}$	$v = 7d_{3/2}$	$v = 7d_{5/2}$	$v = 6f_{5/2}$	$v = 6f_{7/2}$
	CP相对修正（百分比）				
	36	20	60	91	93
通道	按通道分解（百分比）				
$s_{1/2}$	20	304	82	59	52
$p_{1/2}$	-158	-1505	-579	-349	-361
$p_{3/2}$	255	1487	652	439	450
$d_{3/2}$	-32	-373	-117	-79	-73
$d_{5/2}$	15	186	63	29	31
$f_{5/2}$	-3	-31	-10	-5	-5
$f_{7/2}$	3	32	9	6	6
总计	100	100	100	100	100

$s_{1/2} - d_{3/2}$、 $d_{5/2}$ 和$p_{1/2} - p_{3/2}$ 对角线外矩阵元对原子实极化修正的贡献（见图 1）。

为了更好地理解非对角矩阵元在原子实极化修正中的作用，我们在表 III 中给出了修正量的分解：

在原子实的不同通道中，E120+不同态之间矩阵元的修正。一个通道是对具有特定对称性的所有原子实态 c，以及原子实外所有可能态 m 求和。例如，$\hat{}s$通道包含 $\langle 1s|Q+\delta V|nd_{3/2}\rangle$,$\langle 1s|\hat{}Q+\delta V|nd_{5/2}\rangle$, $\langle 2s|\hat{}Q+\delta V|nd_{3/2}\rangle$ 等项。$s_{1/2}$和 $p_{1/2}$ 通道仅因非对角矩阵元而产生非零贡献。非对角矩阵元也会对其他通道产生贡献。例如，$\hat{}\ \langle 2p_{3/2}|Q+\delta V|np_{1/2}\rangle$ 矩阵元会对$p_{3/2}$ 通道产生贡献。

从表 III 可以看出，非对角矩阵元的贡献非常大（主要集中在通道$s_{1/2}$ 和 $p_{1/2}$中）。由于这些较大贡献之间存在部分抵消，某些非对角矩阵元的贡献甚至超过最终结果的许多倍。

较大的非对角矩阵元对算符 Q 的形式更为敏感，见表 I。这两点使得该效应在许多电子原子中显著增强。

计算超精细相互作用诱导的钟跃迁概率时（例如参见参考文献 [15]），考虑电四极算符 Q的正确形式 $\hat{}$ 也会有所助益。这些跃迁作为电偶极跃迁是禁戒的，但磁偶极相互作用或电四极相互作用 [15]会使电子角动量不同的态发生非对角混合，从而使这些跃迁得以发生。

致谢——本研究得到澳大利亚研究理事会资助，项目编号为锘 DP230101058 和 DP200100150。

[1] I. I. Sobelman，《原子光谱》，（Pergamon，）。[2] W. R. Johnson， *Atomic Structure Theory: Lectures on Atomic Physics*，（Springer Verlag，柏林（ISBN 978-3-540-68010-9））。[3] Yu. Ts. Oganessian 和 V. K. Utyonkov，超重元素研究，2015年《物理报告》78，036301（2015年）。[4] H.H. Stroke、H.T. Duong 和 J. Pinard，Bohr-Weisskopf 效应：分布式核磁化对超精细结构的影响，《超精细相互作用》129，319（2000年）。[5] F. F. Karpeshin、M. B. Trzhaskovskaya，超精细结构中 Bohr-Weisskopf 效应的理论，《核物理A》941，66（2015年）。[6] J. Zhang、M. Tandecki、R. Collister、S. Aubin、J.A. Behr、E. Gomez、G. Gwinner、L. A. Orozco、M. R. Pearson 和 G. D. Sprouse（FrPNC合作组），Fr中的超精细反常：球形单粒子模型的边界，《物理评论快报》115，042501（2015年）。[7] L. V. Skripnikov，分子中的核磁化分布效应：Ra+ 和 RaF 的超精细结构，《化学物理杂志》153，114114（2020年）。[8] S.G. Porsev、M.S. Safronova 和 M.G. Kozlov，用于提取 ^{229}Th核矩的超精细常数精密计算，《物理评论快报》127，253001（2021年）。[9] F. F. Karpeshin 和 M. B. Trzhaskovskaya，消除 ^{209}Bi重离子原子光谱中 Bohr-Weisskopf 效应的方法比较，《原子核物理》84，418（2021年）。[10] Yu. A. Demidov、E. A. Konovalova、R. T. Imanbaeva、M. G. Kozlov 和 A. E. Barzakh，金中超精细结构反常的原子计算，《物理评论A》103，032824（2021年）。[11] S. D. Prosnyak 和 L. V. Skripnikov，伍兹–萨克森模型下核磁化分布的影响：中性Tl中的超精细分裂，《物理评论C辑》103，034314（2021年）。[12] B. M. Roberts、P. G. Ranclaud 和 J. S. M. Gingles，Bohr-Weisskopf 效应：从类氢离子实验到超精细结构的重原子计算。《物理评论A》105，052802（2022年）。[13] I.B. Khriplovich， *Parity Nonconservation in Atomic Phenomena*，（Gordon and Breach Science Publishers，纽约，1991年）[14] V.V. Flambaum 和 J.S.M. Ginges，《原子中的核 Schiff 矩与时间反演不变性破坏》。《物理评论A》65，032113（2002）。[15] V. A. Dzuba 和 V. V. Flambaum，《超精细结构诱导的电偶极贡献对电八极矩和磁四极矩原子钟跃迁的影响》，《物理评论A》93，052517（2016）。[16] V. A. Dzuba、V. V. Flambaum、P. G. Silvestrov、O. P. Sushkov，《关联势方法：计算含一个未成对电子原子的能级、超精细结构和 E1跃迁 跃迁振幅》，J. Phys. B: *At. Mol. Phys.*，20，1399–1412（1987）。[17] H. Backe、A. Dretzke、S. Fritzsche、R. G. Haire、P. Kunz、W. Lauth、M. Sewtz、N. Trautmann，《超精细相互作用》162，3（2005）。[18] M. Sewtz、H. Backe、A. Dretzke、G. Kube、W. Lauth、P. Schwamb、K. Eberhardt、C. Gr¨uning、P. Th¨orle、N. Trautmann、P. Kunz、J. Lassen、G. Passler、C. Z. Dong、S. Fritzsche、R. G. Haire，《物理评论快报》90，163002（2003）。[19] P. Chhetri、D. Ackermann、H. Backe、M. Block、B. Cheal、C. Droese、Ch. E. D¨ullmann、J. Even， *et. al.*《锘第一电离能的精密测量》，《物理评论快报》120，263003（2018）。[20] T. K. Sato、M. Asai、A. Borschevsky、R. Beerwerth、Y. Kaneya、H. Makii、A. Mitsukai、Y. Nagame， *et al*《镄、钔、锘和铹的第一电离能：5f电子填充的验证及锕系的确认》，《美国化学会志》140，14609（2018）。[21] J. Warbinek、B. Andelic、M. Block， *et al*《推进辐射探测共振电离技术，以探测更重元素和更多奇异核素》。《原子》10，41（ 2022 10 3390 10020041 ），[22] https://doi.org/ . /atoms D. Munzberg、M. Block、A. Claessens、R. Ferrer、M. Laatiaoui、J. Lantis、S. Nothhelfer、S. Raeder、P. Van Duppen，《使用 ^{164}Dy对美因茨JetRIS进行的分辨率表征》。《原子》10，57（2022），https://doi.org/10.3390/atoms10020057