

原子核的有限体积效应对高离化态离子能级 和波函数的影响^{*}

郑曙东^{1,2)} 李博文¹⁾ 李冀光¹⁾ 董晨钟^{1)†} 袁文渊¹⁾

1) 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) 青海大学基础部, 西宁 810016)

(2008 年 4 月 16 日收到, 2008 年 6 月 22 日收到修改稿)

在相对论理论框架下, 分别在点电荷和两参数 Fermi 核模型近似下计算了高离化态类氢离子($Z = 80-112$) $n = 1-3$ 壳层的波函数和能级. 分析了核有限体积效应对它们的影响. 在此基础上, 给出了核有限体积效应对原子能级的修正公式. 同时, 还进一步讨论了相对论效应和核有限体积效应之间的相互影响, 发现对高 Z 元素相对论效应与核有限体积效应之间有很强的耦合.

关键词: 原子核有限体积效应, 高离化态离子, 相对论效应

PACC: 3130, 3110

1. 引言

电子在原子核形成的势场中的运动规律是原子结构研究的主要问题之一. 早期的理论研究中, 为了使问题简化, 通常把原子核当作点电荷处理. 实际上, 原子核并不是点电荷, 而是由质子和中子组成的有一定尺寸的复杂量子体系^[1]. 在这种情况下, 原子核产生的库仑势与点电荷模型下的库仑势是不同的, 从而导致核外电子的运动规律有所差别^[2], 这被称为原子核的有限体积效应.

原子核结构的研究也是核物理中的一个重要问题. 使用不同的原子核结构模型计算的原子核的电荷分布将会有所差异. 这直接影响到原子中的电子感受到的势场, 因此在不同的核电荷分布下计算出的原子的能级结构会有一些差别, 尤其是涉及到内壳层电子时差别更加明显. 这使得通过精确的原子结构的测量与理论计算结果比较成为一种检验核理论的有效方法^[3,4]. 此外, 由于各种元素的同位素的核电荷分布也是有差别的, 这种方法还可以用来辨认元素的不同同位素^[3-5]. 由于原子中电子的波

函数受到原子核有限体积的影响, 这还会间接的影响到电子与原子核的一些相互作用, 如量子电动力学(QED)效应^[6,7]、超精细相互作用^[8,9]、弱相互作用^[10,11]等. 因此, 对原子核有限体积效应的详细研究对于更精确地检验这些理论也是必不可少的.

高离化态类氢离子是研究核有限体积效应的理想对象. 因为类氢离子中只有一个电子, 一般复杂原子结构计算中最主要的误差来源——电子关联效应并不存在, 这样就可以更准确地反映出原子核有限体积的影响. 本文在相对论理论框架下, 计算了高离化态类氢离子($Z = 80-112$) $n = 1-3$ 壳层的电子波函数和轨道能, 分析了核有限体积效应对它们的影响, 并进一步提出了核有限体积效应对原子结构影响的一些规律. 为了能将核有限体积效应推广到一些不能从头计算的原子核, 我们还给出了核有限体积效应对类氢离子能级的修正公式. 此外, 我们还讨论了核有限体积效应与相对论效应之间的相互影响.

2. 理论方法

在相对论理论框架下, 类氢离子的哈密顿量可

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10876028, 10774122), 高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20070736001), 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心基金及西北师范大学科技创新工程项目(批准号: NWNK-KJCXGC-03-21)资助的课题.

[†] E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

以表示为(这里及以后均采用原子单位)

$$H = \alpha \cdot P + \beta c^2 + V(r), \quad (1)$$

其中 α 和 β 是 Dirac 矩阵, P 是电子的动量算符, c 为光速, $V(r)$ 是电子感受到的原子核产生的库仑势, 它的具体形式依赖于原子核的核电荷分布. 本文采用常用的两种核电荷分布模型——点电荷和两参数 Fermi 核模型计算原子核的库仑势.

在点电荷模型下, 核电荷密度分布为^[12]

$$\rho(r) = Z\delta(r), \quad (2)$$

其中 Z 为原子核的核电荷数. 相应的库仑势 $V(r)$ 为

$$V(r) = \frac{Z}{r}. \quad (3)$$

原子核的两参数 Fermi 核电荷分布模型^[12]可以表示为

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{\frac{r-c}{a}}}, \quad (4)$$

上式中 ρ_0 为常数, c 被称为半密度半径, 当 $r = c$ 时, $\rho(c) = \frac{\rho_0}{2}$; a 是表示核边界弥散程度的参量, 目前实验发现, 不同原子核边界的弥散程度基本一致, 一般为 0.5234 fm. 参数 c 和 a 与 Fermi 核半径 R_{mcl} 存在如下关系^[12]:

$$R_{\text{mcl}}^2 \approx \frac{3}{5}c^2 + \frac{7}{5}\pi^2 a^2, \quad (5)$$

而原子核半径 R_{mcl} 可由以下拟合公式确定^[12]:

$$R_{\text{mcl}}^{1/2} = 0.836A^{1/3} + 0.570, \quad A \geq 6, \quad (6)$$

上式中 A 为核子数.

如果假设原子核的核电荷 $\rho(r)$ 分布是球对称的, 在两参数 Fermi 核电荷分布模型下, 原子核产生

的库仑势可以通过下式计算^[12, 13]:

$$-rV(r) = 4\pi \int_0^r \rho(s)s^2 ds + r \int_r^\infty \rho(s)s ds. \quad (7)$$

本文的相关计算是基于全相对论的原子结构计算程序包 GRASP92^[14]进行的.

3. 结果和讨论

3.1. 核有限体积效应对电子波函数的影响

为了比较原子核的有限体积效应对处于不同状态下的电子的影响, 我们首先计算了 Fermi 核模型和点电荷核模型下类氢 Uul ($Z = 112$) 离子的 $1s$, $2s$, $2p_{1/2, 3/2}$ 壳层的波函数及核势能函数, 如图 1 所示. 图中竖线表示原子核边界.

从势能曲线可看出在点电荷模型下电子感受到的原子核的库仑势在近核处急剧减小, 而 Fermi 核模型下核势能在近核处近似为一常数. 由于两种模型下原子核势能分布的这种差异性, 导致在近核区电子的波函数存在较大的差别. 同时从图中电子波函数分布的情况可以看出, $1s$ 壳层电子在近核区的概率相对最大, $2s$, $2p_{1/2}$ 壳层次之, 而 $2p_{3/2}$ 壳层的电子则几乎不能到达近核区. 因此 $1s$ 轨道波函数受到的原子核有限体积效应影响最大, $2s$, $2p_{1/2}$ 壳层依次减小. 对 $2p_{3/2}$ 壳层核的有限体积效应影响几乎为零. 这表明对 $2p_{3/2}$ 壳层而言, 将原子核作为点电荷处理在一般情况下是相当可靠的, 特别对 $n > 3$ 的壳层, 核有限体积效应的影响已经相当小. 这时将原子核作为点电荷处理完全能达到很高的精度要求.

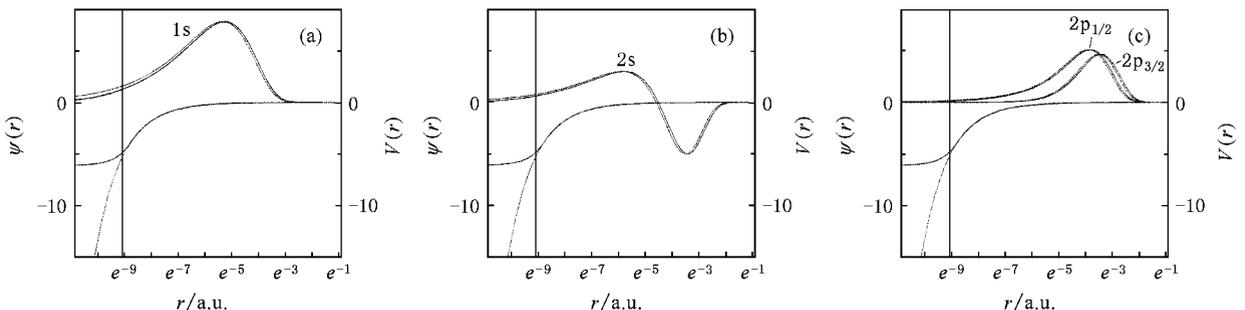


图 1 Fermi 核模型(—)和点电荷模型(·····)下计算的类氢 Uul ($Z = 112$) 离子的 $1s$, $2s$ 和 $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ 壳层的波函数和势能函数图 ($V = V/2 \times 10^5$)

3.2. 核有限体积效应对平均轨道半径和轨道能的影响

通过上面的分析,我们已经看到核有限体积效应对电子波函数的影响,这种影响也会反映在电子的平均轨道半径和轨道能上.这里,我们进一步计算了不同核模型下高离化态类氢离子($Z = 80-112$)的 $n = 1-3$ 壳层的平均轨道半径和轨道能.

图 2 展示了 Fermi 核模型和点电荷核模型下计算的平均轨道半径差 Δr 随原子序数 Z 变化的关系.从图中可以看出,各壳层的 Δr 均随着 Z 单调递增.这是由于原子核电荷的空间分布密度随着原子序数的增加而增加,导致核势能在近核处差异性的增大,以及内壳层电子随着原子序数的增加离核愈来愈近造成的.

由图 2 还可看出对所有壳层而言, $3s$ 和 $2s$ 壳层在两种核模型下的平均轨道半径的差异最明显,而 $2p_{3/2}$ 和 $3p_{3/2}$ 壳层的差异最小.这可以定性地从半经典的角度给予解释.由于不同壳层的电子轨道的形状不同, n 愈大, l 愈小,电子轨道愈扁,近核点离原子核愈近,而近核区的库仑势在两种核模型下是不同的,且离核愈近差别愈大.但远核区的库仑势在两种模型下基本一致,所以原子核的有限体积效应对大 n 小 l 的壳层的 r 影响较大,即对大 n 的 s 壳层的 r 影响较大,而对 $2p_{1/2}$ 壳层的 r 影响次之.由 3.1 的分析可知, $2p_{3/2}$ 壳层的电子不能到达近核区,故原子核的有限体积效应对 $2p_{3/2}$ 壳层的 r 几乎没有影响,因此它的平均轨道半径几乎没有变化.

图 3 给出了 Fermi 核模型和点电荷核模型下计算的高离化态类氢离子 $Z = 80-112$ 的主量子数 $n = 1-3$ 壳层的能级差 ΔE 随核电荷数的变化.图 2 与图 3 的曲线变化趋势基本一致,与平均轨道半径明显不同的是,原子核有限体积效应对 $1s, 2s$ 壳层的能量影响最明显.这是因为 $\Delta E \approx \frac{Z}{r^2} \Delta r$, 因此,在两种核式模型下电子的轨道能级差 ΔE 除与 Δr 成正比外,还与 r^2 成反比,而类氢离子的 r 与 n^2 成正比,所以核的有限体积效应对 $1s$ 壳层轨道能 E 的影响最大,对 $2s, 3s, 2p_{1/2}$ 壳层轨道能 E 的影响次之.而对于 $2p_{3/2}$ 壳层的轨道能的影响几乎可以不予考虑.

3.3. Fermi 模型中参数 a 和 c 对原子结构的影响

在两参数 Fermi 核模型中,决定核电荷分布的

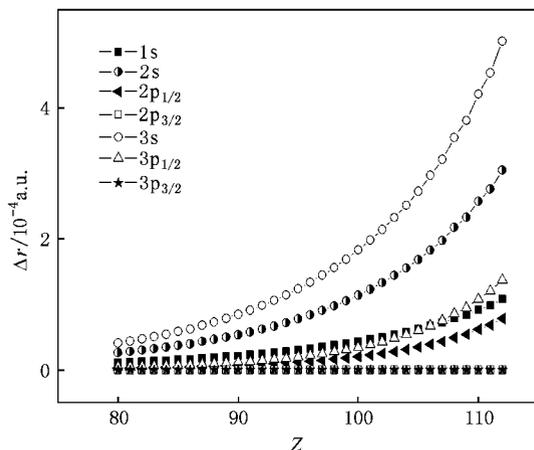


图 2 Fermi 与点电荷核模型下不同壳层的平均轨道半径差 Δr

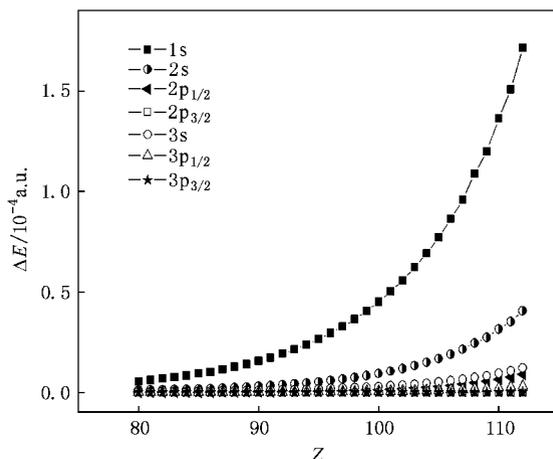


图 3 Fermi 与点电荷核模型下不同壳层轨道能级差 ΔE

是参数 a 与 c , 这两个参数对于研究原子核的结构和性质具有重要意义.在不同参数的核电荷分布下,原子核产生的库仑势是有差别的,这可以直接从原子的轨道能的变化反映出来.因此它能够提供研究原子核结构的另一条途径.这里我们以类氢 Uub ($Z = 112$) 离子为例,进一步给出了原子的轨道能和这两个参数的定量关系.

由(4)式可知,参数 a 是一个与核边界弥散程度相关的量.我们首先比较了不同 a 值对电子波函数及能级差的影响.图 4 给出了 $1s$ 电子波函数和原子核势能分布随不同的参数 a 的变化.可以看出,电子波函数随不同的参数 a 变化很小,由此可知,参数 a 对原子能级的影响很小.

Fermi 核模型中的另一个参数是 c , 它可以近似反映原子核的大小,一般由(5)和(6)式计算得到.

我们比较了不同 c 值对 $1s$ 电子波函数及能级差的影响,如图 5 所示.从该图可以看出电子波函数在近核区略有差异,虽然这种差异也很小,但是参数 c 的影响要比参数 a 的影响大得多.

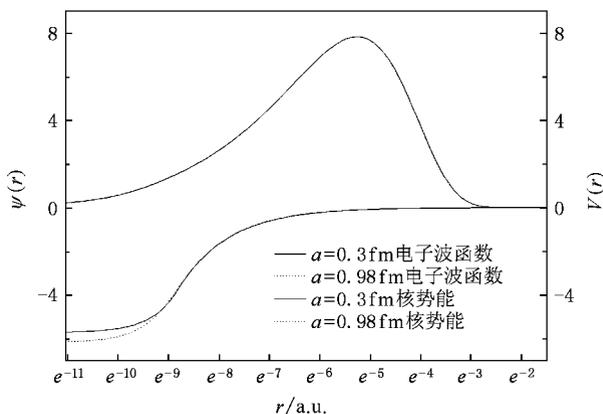


图 4 Fermi 模型下 c 为 4.6282 fm 时不同参数 a 计算的类氢离子 ($Z = 112$) 的 $1s$ 壳层的波函数和势能分布图 ($V = V/2 \times 10^5$)

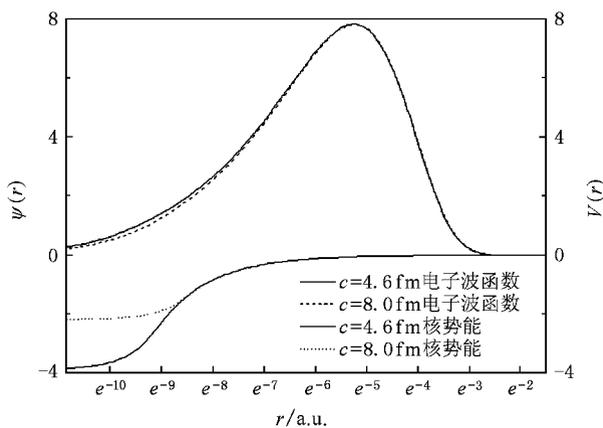


图 5 Fermi 模型下 a 为 0.5234 fm 时不同参数 c 计算的类氢离子 ($Z = 112$) 的 $1s$ 壳层的波函数和势能分布图 ($V = V/2 \times 10^5$)

由此我们可以看出,核有限体积效应主要是由于原子核的大小引起的,原子核边界弥散程度的作用很小.

在两参数 Fermi 核模型中,若参数 $a \rightarrow 0$,则 Fermi 核模型退化为钢球模型.对于钢球模型,电子感受到的库仑势为^[15]

$$V(r) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{R_{\text{nucl}}} \left(-\frac{3}{2} + \frac{r^2}{2R_{\text{nucl}}^2} \right), & 0 \leq r \leq R_{\text{nucl}} \\ -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}, & r > R_{\text{nucl}} \end{cases}$$

由 Hellmann-Feynman 定理 $\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left(\Psi_n \left(\frac{\partial H}{\partial \lambda} \right) \Psi_n \right)$

$\equiv \frac{\partial H}{\partial \lambda} \Big|_n$ (n 为一组量子数),把原子核半径 R_{nucl} 看作参数 λ ,有

$$\frac{\partial H}{\partial R_{\text{nucl}}} = \begin{cases} Z \left(\frac{3}{2R_{\text{nucl}}^2} - \frac{r^2}{6R_{\text{nucl}}^4} \right), & 0 \leq r \leq R_{\text{nucl}} \\ 0, & r > R_{\text{nucl}} \end{cases}$$

进一步可以得到

$$\frac{\partial E_n}{\partial R_{\text{nucl}}} = \int_0^{R_{\text{nucl}}} \Psi^* Z \left(\frac{3}{2R^2} - \frac{r^2}{6R^4} \right) \Psi d\tau + \int_{R_{\text{nucl}}}^{\infty} \Psi^* 0 \Psi d\tau.$$

由于原子核半径非常小,电子波函数 Ψ 在核内可以近似认为是一常数,由此可以得到

$$\frac{\partial E_n}{\partial R_{\text{nucl}}} = \frac{28\pi Z R_{\text{nucl}}}{15} |\Psi(0)|^2,$$

即

$$E_n = \frac{14\pi Z R_{\text{nucl}}^2}{15} |\Psi(0)|^2 + C. \quad (8)$$

如果原子核半径趋于 0,上式应与点电荷的轨道能公式一致,因此常数 C 等于原子核用点电荷模型时相应的轨道能.

由 (8) 式可以看出,使用钢球模型计算的原子轨道能与原子核半径的平方有关,而钢球模型是对 Fermi 模型的一种近似,并且由上面的分析我们知道,对于 Fermi 核模型,核有限体积效应主要是由于原子核的大小引起的,而原子核边界弥散程度的作用很小,据此我们可以推断,对于 Fermi 模型原子轨道能与原子核半径即参数 c 的平方有关.而对于另一参数 a ,计算发现点电荷模型和 Fermi 模型下的能级差也与其平方有关,但是相应的系数非常小.对于不同元素,点电荷模型和 Fermi 模型下的能级差与两参数均满足这种关系,只有拟合系数存在差异.我们假设拟合系数是原子序数 Z 的函数.基于以上分析,对于类氢元素 ($Z = 56-112$) 我们计算得到了点电荷和 Fermi 模型下的能级差拟合公式

$$\Delta E_n = b_1(a - b_2)^2 c^2 = k_1 c^2 + k_2 c^2 a + k_3 c^2 a^2, \quad (9)$$

式中 b_1, b_2 及 k_1, k_2, k_3 均为常数.对于不同元素,系数 k_1, k_2, k_3 均不同,它们随 Z 的变化关系如图 6 所示.由图 6 可以看出,系数 k_1, k_2, k_3 随 Z 的变化是单调的.

比较 (8)(9) 式可以发现,当 $a \rightarrow 0$,即 Fermi 模型退化为钢球模型时,两式是等价的,(9) 式中的 c 就对应于 (8) 式中的 R_{nucl} (9) 式中的系数 b_1 与 b_2 就对应于 (8) 式中的常数.

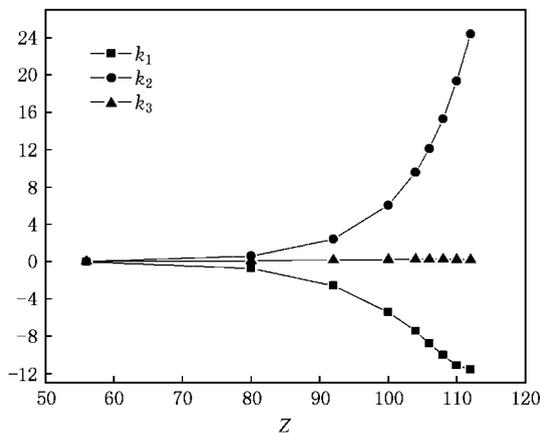


图 6 Fermi 和点电荷模型下能级差拟合公式中系数 k_1, k_2, k_3 随 Z 的变化关系

对类氢元素 Uul($Z = 112, A = 285$)的 $1s$ 壳层, 相应的拟合公式为

$$\Delta E_{1s} = -11.55c^2 + 24.41ac^2 + 0.1681a^2c^2.$$

拟合公式(9)在研究原子核的性质时是很有用的, 因为对于类氢离子, 采用点电荷模型可以得到波函数和能级的解析解, 实验与理论值比较, 我们就可以推测原子核的半径及边界厚度等相关的物理量, 从而进一步了解原子核的性质.

3.4. 相对论效应与原子核有限体积效应之间的相互影响

随着原子序数的增加, 原子中相对论效应越来越明显. 相对论效应会使电子径向波函数明显的收缩^[17], 因此相对于非相对论计算, 相对论情形下核的有限体积效应更加显著.

为了研究相对论与核有限体积效应之间的相互影响, 我们计算并比较了 Fermi 核模型和点电荷核模型在相对论与非相对论情形下核有限体积效应对 $1s$ 平均轨道半径差 Δr 和能级差 ΔE 的影响. 图 7 和图 8 分别给出了类氢离子 Uul($Z = 20-112$)相对论和非相对论 $1s$ 轨道在两种核模型下的平均半径差 Δr 和能级差 ΔE 随原子序数 Z 变化关系. 从两图中可以看出 Δr 和 ΔE 随原子序数 Z 变化规律基本一致. 对低 Z 元素($Z = 20-47$)相对论和非相对论的计算结果基本相同; 对中 Z 元素($Z = 47-92$)相对论下核的有限体积效应逐渐增大, 相对论情形下计算的 $1s$ 平均能级差与非相对论情形下的计算结果差异从 0.69 eV 增大到 178.31 eV; 而对重及超重元素($Z = 92-112$)相对论下核的有限体积效

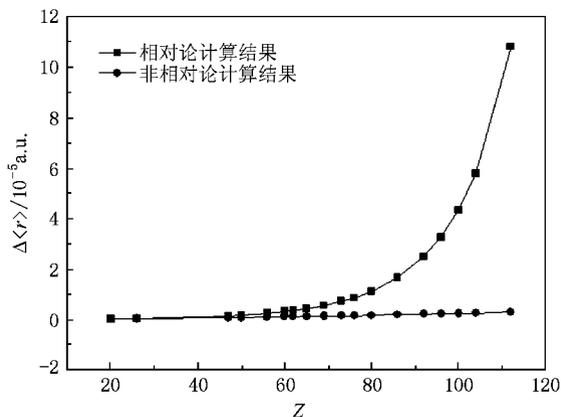


图 7 Fermi 与点电荷核模型下 $1s$ 壳层的平均半径差 Δr

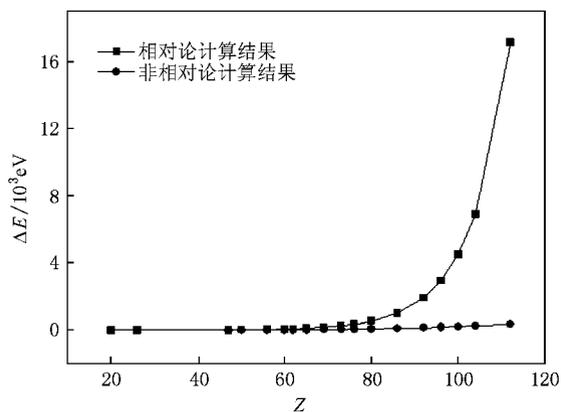


图 8 Fermi 与点电荷核模型下 $1s$ 壳层的能级差 ΔE

应急剧增大. 相对论情形下计算的 $1s$ 平均能级差与非相对论的计算结果差异从 178.31 eV 增大到 1678.35 eV. 由此可以看出相对论与原子核有限体积效应产生了很强的相互影响, 所以对于重元素特别是超重元素, 相对论和核有限体积效应必须同时考虑.

4. 结 论

本文首先在 Fermi 核模型和点电荷核模型下计算了高离化态类氢离子($Z = 80-112$) $n = 1-3$ 壳层的波函数和轨道能, 分析了核有限体积效应对它们的影响. 结果表明, 核有限体积效应对高离化态类氢离子内壳层电子近核区波函数和轨道能的影响是明显的, 且这种影响随着原子序数的增大而增强. 但这些影响对不同 n, l 电子有着较大的差异性, 对 $1s$ 电子的影响最大, 对 $2s, 2p_{1/2}$ 电子的影响次之, 对

$2p_{3/2}$ 电子的影响很小. 因此, 对于高离化态离子中角动量为 $1/2$ 的电子, 核有限体积效应不能忽略. 我们进一步拟合了核有限体积效应与 Fermi 核模型中参数 a 和 c 的关系. 这个公式对于进一步通过原子结构研究原子核的性质有十分重要的意义. 对于高离化态离子, 相对论效应往往非常重要, 因此文中进

一步分析了相对论效应与核有限体积效应之间的相互影响. 计算发现, 随着原子序数的增加, 相对论效应与核有限体积效应之间的相互影响逐渐增强. 尤其是对于重元素及超重元素的内壳层电子, 应该同时考虑这两种效应才能得到可靠的结果.

- [1] Yang F J , Wang Y S , Lu F Q 2002 *The nuclear physics* (Shanghai : Fudan university Press)(in Chinese)[杨福家、王炎森、陆福全 2002 原子核物理(上海: 复旦大学出版社)]
- [2] Cohen-Tannoudji C , Diu B , Franck L 1977 *Quantum Mechanics* (New York · London · Sydney · Toronto : A Wiley-interscience Publication)
- [3] Wang L B , Mueller P , Bailey K , Drake G W F , Greene J P , Henderson D , Holt R J , Janssens R V F , Jiang C L , Lu Z T , O'Connor T P , Pardo R C , Rehm K E , Schiffer J P , Tang X D 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 142501
- [4] Sánchez R , Nörtenshäuser W , Ewald G , Albers D , Behr J , Bricault P , Bushaw B A , Dax A , Dilling J , Dombbsky M D , Drake G W F , Götte S , Kirchner R , Kluge H J , Kühl T H , Lassen J , Levy C D P , Pearson M R , Prime E J , Ryjkov V , Wojtaszek A , Yan Z C , Zimmermann C 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 033002
- [5] Tomaselli M , Liu L C , Fritzsche S , Kühl T , Ursescu D , Neumayer P , Wojtaszek A 2004 *Nuclear. Phys. A* **746** 587
- [6] Beier T , Mohr P J , Persson H , Soff G 1998 *Phys. Rev. A* **58** 954
- [7] Milstein A I , Sushkov O P , Terekhov I S 2003 *Phys. Rev. A* **67** 062111
- [8] Rosenberg H J , Stroke H H 1972 *Phys. Rev. A* **5** 1992
- [9] Volotka A V , Shabaev V M , Plunien G , , Plunien G , Soff G 2003 *Eur. Phys. J. D* **23** 51
- [10] Fortson E N , Pang Y , Wilets L 1990 *Phys. Rev. Lett.* **23** 2857
- [11] Pollock S J , Fortson E N , Wilets L 1992 *Phys. Rev. C* **46** 2587
- [12] Parpia F A , Mohanty A K 1992 *Phys. Rev. A* **46** 3735
- [13] Shabaev V M 1993 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **26** 1103
- [14] Parpia F A , Fischer C F , Grant I P 1996 *Computer Physics Communications* **94** 249
- [15] Yang F J 2000 *The atomic physics* (Beijing : Higher education Press) (in Chinese)[杨福家 2000 原子物理学(北京: 高等教育出版社)]
- [16] Zeng J Y 2000 *The quantum theory* (Beijing : Science Press)(in Chinese). [曾谨言 2000 量子力学(北京: 科学出版社)]
- [17] Fricke B 1984 *Physica Scripta.* **T8** 129

The influences of the finite nuclear size effects on the energy levels and wavefunctions of hydrogen-like ions^{*}

Zheng Shu-Dong^{1,2)} Li Bo-Wen¹⁾ Li Ji-Guang¹⁾ Dong Chen-Zhong^{1)†} Yuan Wen-Yuan¹⁾

1) (*College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China*)

2) (*The department of Basic Science, Qinghai University, Xining 810016, China*)

(Received 16 April 2008 ; revised manuscript received 22 June 2008)

Abstract

Based on the relativistic theory, the wavefunctions and low-lying levels of highly charged states of hydrogen-like ions for the shells $n = 1-3$ were calculated using different nuclear models—point-like nuclear and Fermi nuclear models with two parameters, respectively. The influence of the finite nuclear size on wavefunctions and level energies were analysed. Furthermore, a fitting formula related to nuclear parameter a and c in Fermi nuclear model for finite nuclear effects on the atomic level energy is deduced. The mutual influence between the relativistic effect and the finite nuclear size effects were discussed. It is found that there is a strong coupling between relativistic effect and finite nuclear size effects for high- Z elements.

Keywords : finite nuclear size effects, highly charged ions, relativistic effect

PACC : 3130, 3110

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10876028, 10774122), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20070736001), the Foundation of Center of Theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, and the Foundation of Northwest Normal University (Grant No. NWNNU-KJCXGC-03-21).

[†] E-mail : dongcz@nwnu.edu.cn