

關於鐳 La_{57} 的超精細結構^{*†}

余友文 張宗燁

(中國科學院)

摘 要

實驗上定出的 La_{57} 的超精細結構常數 $\frac{a(^2D_{5/2})}{a(^2D_{3/2})}$ 之比比由單組態的理論計算出的結果約大三倍。要想解釋這個差別，一個比較常用的方法就是加入一些組態混合。我們首先考慮到在基態 $(6s)^2(5d)$ 之外再加上一些 $(6s)(7s)(5d)$ 的混合，並作了詳細的計算，得到的結果只能對單組態的理論稍加修正，而距實驗值仍相差甚遠。其次又考慮到混合一些 $(5d)^2(6s)$ 的態，因為這種組態能量比較低，所以混合的比例可能比較大，於是所產生的修正也比較大。經過一些簡單的分析和估計，得出：要能解釋實驗，則所需混入 $(5d)^2(6s)$ 的比例太大（約為 0.36），因此我們認為雖然混入 $(5d)^2(6s)$ 是可能對理論值有較大的修正，但要與實驗符合還是相當困難的。

一、引 言

在原子核物理中，精確地測定出原子核的磁矩與電四極矩是十分重要的。而超精細結構譜與原子核的性質是密切聯系着的，通過將實驗值與超精細結構的理論進行比較，可以較精確地定出原子核磁矩與四極矩來，因此，從理論上給出正確計算超精細結構常數的方法，在原子核物理中是很有意義的。由於計算超精細結構常數主要是一個尋找正確的電子波函數的問題，所以通過這方面的計算對更深一步地了解原子結構也是有所幫助的。

去年丁淦^[1]提出他曾用微波的方法從實驗上定出了鐳 La_{57} 的超精細結構能譜，但是與過去理論上計算的結果很不符合，所得超精細結構常數的實驗值約比理論值大三倍。這樣大的差別在其他原子的情況下都沒有發現過。因此，我們感到有從理論上作進一步探討的必要。

我們根據以往對其他原子的超精細結構常數修正的考慮，可以看出很多都是利用加入一些組態混合而得到了較好的結果的。例如 Koster^[2] 對鎵 Ga 原子的計算。我們企圖用類似的方法對 La_{57} 原子作一個計算，以此來探討理論與實驗分歧的原因。所得結果說明：加入組態混合只能對超精細結構的理論值有一些小的修正，而要想解釋三倍之差是很困難的。

下面我們首先簡單介紹一下超精細結構的一般理論，其次將我們在計算中的一些考慮介紹一下，並給出主要的公式。然後給出計算的結果，並與實驗進行比較。最後進行分析和總結。

* 1958 年 8 月 5 日收到。

† 為向中國共產黨卅七周年生日獻禮而作。

二、超精細結構一般原理的簡單介紹^[3]

我們知道，超精細結構的來源就是指原子核對電子的非中心場的作用所引起的能級分裂現象。因此，我們只要將原子核對電子的非中心作用按多極矩展開，並將它看作微擾能量，然後對它取平均，就可以得到常見的超精細結構的能量改變公式：

$$(E/h)_F = \frac{ac}{2} + b \left\{ \frac{\frac{3}{4} c(c+1) - I(I+1)J(J+1)}{2IJ(2I-1)(2J-1)} \right\} + \dots, \quad (1)$$

式中第一項是由電子所產生的磁場與核磁偶極矩的相互作用所引起的，第二項是由電子所產生的電場與核電四極矩之相互作用引起的，其他高次項在此略去了。

式中的符號介紹如下：

$$a = -\frac{\mu}{IJ} \int \Phi^*(JJ) \sum_i H_{iz} \Phi(JJ) d\tau, \quad (2)$$

其中 μ 是原子核磁矩， $\Phi(JM)$ 是電子的總的波函數。在相對論情況下，第 i 個電子在核處所產生的磁場為

$$\mathbf{H}_i = \frac{e(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}_i)}{r_i^3}, \quad (3)$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}$ 為熟知的 Dirac 矩陣。在非相對論的近似下， \mathbf{H}_i 可以表為

$$\mathbf{H}_i = -\frac{2\mu_0}{r_i^3} \left\{ \mathbf{L}_i - \mathbf{S}_i + \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_i)}{r_i^2} \mathbf{r}_i \right\}, \quad (4)$$

其中 μ_0 為電子的 Bohr 磁子， L_i 及 S_i 分別為電子的角動量及自旋¹⁾。

$$b = -e^2 Q \int \Phi^*(JJ) \sum_i \frac{3\cos^2\theta_i - 1}{r_i^3} \Phi(JJ) d\tau, \quad (5)$$

Q 為原子核電四極矩。

此外， I = 核自旋； J = 電子的總角動量； $C = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$ ； F = 原子核與電子整個系統的總角動量。

並且，應注意到，在以上各式中取和的意義都是指對原子實外面的電子取和。

因此，在超精細結構的計算中，主要是要求得 a 及 b 。通過將理論上的 a 及 b 值與實驗的結果比較，就可以定出原子核磁矩 μ 及四極矩 Q 來。但是要計算 a 及 b ，首先要知道電子的波函數 $\Phi(JJ)$ ，選不同的 $\Phi(JJ)$ 對計算的結果是有影響的。在下面我們將仔細地分析這個問題。

三、單組態理論的結果以及我們的考慮

1. 單組態理論的結果

我們具體來考慮 La_{57} 的情形。它有 57 個電子，因此它的最低的組態應該是

$$(6s)^2(5d)^1.$$

相應的基態為

$$D_{3/2} \text{ 及 } D_{5/2}.$$

1) 對於 S 電子的情況，需要用相對論的波函數及相對論下的 H_{iz} ，否則得不到有限的結果；而對其他電子則可用非相對論的近似。

單組態的理論即只考慮了這一組態的存在。將這種單組態下的波函數代入計算 a 及 b 的公式中, 我們發現 b 是與實驗相符合的, 而 a 却與實驗值相差十分懸殊。結果為

$$\left(\frac{a(D_{5/2})}{a(D_{3/2})} \right)_{\text{單組態理論值}} = \frac{3}{7}, \quad (6)$$

$$\left(\frac{a(D_{5/2})}{a(D_{3/2})} \right)_{\text{實驗值}} \cong \frac{9}{7}. \quad (7)$$

這裏需要指出, 單組態理論值的結果是純幾何的結果, 即與具體的電子徑向波函數的形式無關, 而只與角動量的耦合有關。因此, 如果實驗值是準確無疑的, 就必須要修改理論, 而且最可能有效的辦法是從加入組態混合着手來進行修正, 因為只有加入組態混合, 才能改變其幾何結構。

2. 我們的考慮

既然根據上面的分析看出單組態理論是有缺陷的, 那麼就應當加入組態混合, 但加入那種組態混合最為合理呢? 丁渝^[1]曾作過分析, 他指出混合一些

$$(6s)^1(7s)^1(5d)^1$$

是比較合理的。的確如此, 我們認為混合這種組態有以下四點理由:

- (i) 這種組態的能量是高 s 組態中最低的一個;
- (ii) 與組態 $(6s)^2(5d)^1$ 有相同的字稱和總角動量;
- (iii) 加入這種組態混合以後對計算 b 值沒有影響。因此可以保證 b 值仍然與實驗符合;
- (iv) 對 a 值的修正具有

$$\delta a_{3/2} = -\delta a_{5/2} \quad (8)$$

的性質。其中 $\delta a_{3/2}$ 為對 $a(D_{3/2})$ 的修正, $\delta a_{5/2}$ 為對 $a(D_{5/2})$ 的修正。利用這個性質, 將實驗值與單組態的理論值比較時可以得到合理的極磁矩值^[1]。

根據這幾點理由, 我們認為加入組態

$$(6s)^1(7s)^1(5d)^1$$

是較合理的, 因此, 我們就對混合了這種組態的情況進行了計算。關於計算的方法在下一節中介紹。但這裏需要指出混合這種組態並不是唯一的, 還可能混入其他的組態, 關於這方面的討論我們將在最後一節中給出。

3. 計算方法的簡單介紹

計算的方法大致與 Koster 文章中的方法是相同的。只不過對於 La_{57} 的情形電子數目增多, 在計算中更複雜一些而已。

在計算中有兩個主要的問題, 一個是如何求到單個電子的波函數, 另一個是如何定出組態之間的比例。

關於求單個電子的波函數的問題, 我們採用的是 Hartree 自洽場的方法。但是由於計算自洽場十分複雜, 我們取了一些近似。對於原子實內的電子波函數沒有直接去求, 而是利用插入法求得的, 即通過附近已知其他原子的波函數, 用內插法可以得到在原子實內 La_{57} 的各 (nl) 的波函數。關於這個方法可參看 [4]。在那篇文章中的公式是對 Φ_{ok} 方程情形下推導出來的, 與之相似, 我們完全可以得到在 Hartree 情形下的公式。

我們可以引進一個特徵長度 R 。 R 的定義是多樣的，它可以選用如平均半徑 $\bar{r} = \int_0^\infty r p^2(\text{nl}; r) dr$ ，平方平均半徑 $\sqrt{\bar{r}^2} = \left[\int_0^\infty r^2 P^2(\text{nl}; r) dr \right]^{\frac{1}{2}}$ 等，我們這兒選用的是滿足：

$$\int_0^R p^2(\text{nl}; r) dr = \frac{1}{2}$$

的 R 。其次再令 $S = \frac{r}{R}$ ，並定義函數

$$P^*(\text{nl}; S) = R^{\frac{1}{2}} P(\text{nl}; r). \quad (9)$$

可以證明，對於所有的元素下式成立：

$$P^*(\text{nl}; S) = P_H^*(\text{nl}; S) + \frac{R}{R_H} P_1(\text{nl}; S) + O\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (10)$$

在(10)中 P_H^* , R_H 分別是氫原子的 P^* 及 R , R_H 根據定義可以求出來, $P_1(\text{nl}; S)$ 僅是一個與 S 相關的函數。(10)式的意思就是說只要略去了 $O\left(\frac{1}{N^2}\right)$ 以後，不論那個元素只要具有相同的 nl ，相同 S 時， $P^*(\text{nl}; S)$ 與 R 的關係是線性的。

已知波函數的原子，其各 nl 的 R 及 $P^*(\text{nl}; S)$ 都可求出。因此只要知道了 La 的 R 就可求出 La_{57} 的 $P^*(\text{nl}; S)$ 。因此現在的問題是如何求 La_{57} 的 R 。為此引入屏蔽常數 σ ：

$$R = \frac{R_H}{N - \sigma}. \quad (11)$$

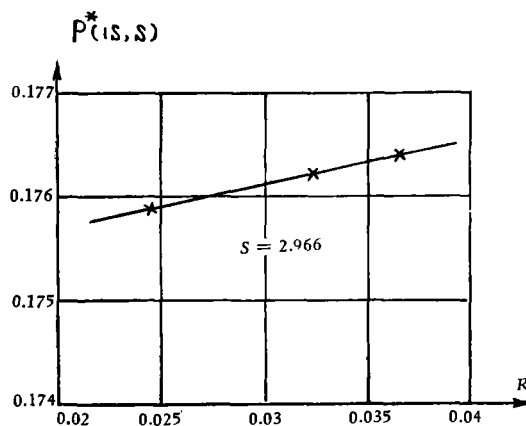
由於相同 (nl) 的 σ 隨 N 的變化較慢，因此可以利用插入法求得 La_{57} 各不同 nl 的 σ 。然後利用(11)，(10)，(9)就可求得 La_{57} 的 $P(\text{nl}; r)$ 。這個方法雖然不够嚴格，但還是可用的，尤其在 (nl) 較低時符合得更好，例如對 $(1s)$ 的情形，其數據見下表：

S	$P^*(1s; S)$		
	Cs R = 0.0245	Mo R = 0.0322	Rb R = 0.0366
2.966	0.1759	0.1762	0.1764
3.814	0.0740	0.0742	0.0749
5.085	0.0182	0.0187	0.0189
5.932	0.0069	0.0071	0.0072

以 $P^*(1s; S)$ 作為縱坐標，以 R 作為橫坐標，的確 $P(1s; S)$ 很好地在一直線上（見圖）。

這說明使用插入法求波函數還是相當好的。利用這個方法大大地減少了求解波函數的計算。但是對於原子實外的電子，由於 nl 值太大，在這樣大的 nl 下，其他原子的已知波函數過少，無法應用插入法，必須進行嚴格地求解 Hartree 方程。我們進行了這部分自洽場的計算^[6]，得到了原子實外的電子波函數，即 ψ_{5d} , ψ_{6s} , ψ_{7s} 及相應的本徵值 ϵ_{5d} , ϵ_{6s} 和 ϵ_{7s} 。

第二個問題解決的辦法是利用變分法，計算的方法與 Koster 考慮的完全相



似。我們知道對應於組態 $(6s)^1(7s)^1(5d)^1$ 還有兩個不同的態，一個是 $(6s)^1$ 與 $(7s)^1$ 電子自旋耦合成 1 的態，稱之為 $\Psi^1(^2D_J)$ 。另一個是 $(6s)$ 與 $(7s)$ 的自旋耦合為 0 的態，稱之為 $\Psi^2(^2D_J)$ 。當我們將對應於 $(6s)^2(5d)^1$ 組態的態稱為 $\Psi^0(^2D_J)$ 時，則可以將總的波函數表示成：

$$\Psi(^2D_J) = \alpha_0\Psi^0(^2D_J) + \alpha_1\Psi^1(^2D_J) + \alpha_2\Psi^2(^2D_J), \quad (12)$$

其中 α_0, α_1 及 α_2 就是待定的混合比例係數。

爲了確定 α_0, α_1 及 α_2 ，我們利用變分法，即使得

$$\int \Psi^*(^2D_J)(H - E)\Psi(^2D_J)d\tau_1 \cdots d\tau_{27}$$

取極小值。由此得到以下的聯立方程組：

$$\begin{aligned} (H_{00} - E)\alpha_0 + H_{01}\alpha_1 + H_{02}\alpha_2 &= 0, \\ H_{10}\alpha_0 + (H_{11} - E)\alpha_1 + H_{12}\alpha_2 &= 0, \\ H_{20}\alpha_0 + H_{21}\alpha_1 + (H_{22} - E)\alpha_2 &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

其中

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \int \Psi^i H \Psi^j d\tau_1 \cdots d\tau_{27} \quad i, j = 0, 1, 2, \\ H &= \sum_i \left(-\nabla_i^2 - \frac{2z}{r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{2}{r_{ij}}. \end{aligned} \quad (14)$$

因此，只要我們已知了電子的波函數 $\Psi^i(^2D_J)$ ，通過計算一些積分，就可以由(13)式中解出 α_1/α_0 及 α_2/α_0 來，再利用一下歸一化條件：

$$\alpha_0^2 + \alpha_1^2 + \alpha_2^2 = 1, \quad (15)$$

就可以定出 α_0, α_1 及 α_2 來。這樣就確定了組態混合的比例。

在求到了電子的波函數 $\Psi(^2D_J)$ 後，只要代入 a 及 b 的計算公式(2)及(5)，就可以得到 a 及 b 的值了。經過計算，我們得到以下的公式：

$$\begin{aligned} a(^2D_{3/2}) &= -\frac{2\mu_0\mu}{3I} \left\{ \alpha_0^2 \left[-\frac{24}{5} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \right] + \alpha_2^2 \left[-\frac{24}{5} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \right] + \right. \\ &\quad + \alpha_1^2 \left[\frac{16}{15} \pi (\sigma^2(0) + S^2(0)) - \frac{112}{35} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \right] + \\ &\quad + 2\alpha_1\alpha_2 \left[\frac{3}{5} \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{8\pi}{3} (\sigma^2(0) - S^2(0)) \right] + \\ &\quad \left. + 2\alpha_0\alpha_1 \left[-\frac{6}{5} \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{8\pi}{3} S(0)\sigma(0) \right] \right\}; \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} a(^2D_{5/2}) &= -\frac{2\mu_0\mu}{5I} \left\{ \alpha_0^2 \left[-\frac{24}{7} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \right] + \alpha_2^2 \left[-\frac{24}{7} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \right] + \right. \\ &\quad + \alpha_1^2 \left[-\frac{88}{21} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle - \frac{16\pi}{9} (S^2(0) + \sigma^2(0)) \right] + \\ &\quad + 2\alpha_1\alpha_2 \left[\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{8\pi}{3} (S^2(0) - \sigma^2(0)) \right] + \\ &\quad \left. + 2\alpha_0\alpha_1 \left[\sqrt{\frac{1}{6}} \frac{16\pi}{3} \sigma(0)S(0) \right] \right\} \end{aligned} \quad (17)$$

以及

$$b(^2D_{3/2}) = e^2 Q \frac{14}{35} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle, \quad (18)$$

$$b(^2D_{5/2}) = e^2 Q \frac{4}{7} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle. \quad (19)$$

其中

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int \frac{P_{5d}^2(r)}{r^3} dr. \quad (20)$$

$\frac{P_{5d}}{r}$ 是 ψ_{5d} 的徑向部分； $S(0)$ 是 ψ_{6s} 在 $\mathbf{r} = 0$ 處的值； $\sigma(0)$ 是 ψ_{7s} 在 $\mathbf{r} = 0$ 處的值。

將 $S(0)$, $\sigma(0)$, $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$ 及 $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ 的值代入就能求得 a 及 b 的值。

四、計算的結果以及與實驗的比較

1. 計算的結果

(i) 關於 $S(0)$, $\sigma(0)$ 及 $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$ 等等的值：

由 Hartree 自洽場計算的結果，得到

$$S(0) = 1.834, \quad \sigma(0) = 0.879, \quad (21)$$

$$\epsilon_{6s} = 0.285, \quad \epsilon_{7s} = 0.118, \quad (22)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = 1.722. \quad (23)$$

(ii) 關於 α_0, α_1 及 α_2 的結果：

經過數值積分，我們可以將方程組(13)中的矩陣元都求到。令

$$-E' = H_{00} - E, \quad (24)$$

那麼

$$H_{11} - E = H_{11} - H_{00} - E', \quad H_{22} - E = H_{22} - H_{00} - E'.$$

只要給出了 H_{10}, H_{20}, H_{21} 以及 $H_{22} - H_{00}, H_{11} - H_{00}$ ，就可以由行列式中解出 E' 來，代回到方程組中，就求得了 α_0, α_1 及 α_2 。

計算結果如下：

$$\begin{cases} H_{11} - H_{00} = 0.2419, & H_{22} - H_{00} = 0.2457, \\ H_{10} = H_{01} = 0.00980, & H_{20} = H_{02} = 0.0539, & H_{12} = H_{21} = 0.0169. \end{cases} \quad (25)$$

由此定出的

$$E' = -0.01147, \quad (26)$$

$$\alpha_0 = 0.979, \quad (27)$$

$$\alpha_1 = -0.0242, \quad (28)$$

$$\alpha_2 = -0.2039. \quad (29)$$

可見混合 $\Psi(^2D_J)$ 這種態的比例還是不太小的。

在此附帶分析一下計算的準確程度，我們由以下兩方面作了一下驗算：

(1) 可以利用 6s 電子的游離能的實驗值來驗證一下 H_{00}, H_{11} 以及 H_{22} 的正確性。

從物理上,我們知道 $H_{11} - H_{\infty}$ 是 6s 的游離能減去 7s 的游離能的二倍. 由此計算出 6s 的游離能為 0.195 個原子單位, 而實驗值為 0.202 個原子單位, 這說明我們的計算還是相當可靠的.

(2) 可以利用精細結構常數以及有效電荷定出 $\langle \frac{1}{r^3} \rangle$ 的值來^[1]. 由此定出的結果為 1.812, 與我們計算出的 1.722 也是差不多一致的.

根據這些驗證, 我們相信計算是準確的.

$$(iii) \frac{a(^2D_{5/2})}{a(^2D_{3/2})}:$$

將上述結果代入到公式(16)及(17)中, 則有

$$\frac{a(^2D_{5/2})}{a(^2D_{3/2})} = \frac{3.3}{7}. \quad (30)$$

2. 與實驗的比較

顯然由(30)式可以看出, 加入了一些高 s 的組態混合以後, 對理論是有一些修正的, 約修正了 1/10, 但距離實驗值仍相差很大. 我們從計算的公式(16)及(17)中也可以看出, 主要是 α_0^2 項的貢獻, 也就是單組態理論的結果. 修正的各項中以 $\alpha_0\alpha_1$ 項較大, 但比較起來它還是較小的, 因此修正不可能很大, 以至消除三倍之差.

五、分析與總結

根據上面計算的結果可以看出, 加入一些高 s 的組態混合進去是不可能解釋實驗與理論的分歧的.

進一步我們需要分析一下是否由於加入其他組態混合可以解釋實驗. 在 La_{57} 的情況下, 最可能的另一個組態是 $(5d)^2(6s)^1$. 首先我們來看一下, 由這種組態混合所產生的修正是否具有

$$\delta a_{3/2} = -\delta a_{5/2} \quad (8)$$

的性質, 至少是近似地滿足這個條件, 因為如果它不具有這種性質, 則不可能得到合理的核磁矩. 經過計算, 得到

$$\frac{a(^2D_{5/2})}{a(^2D_{3/2})} \cong \frac{\alpha_0^2 a(^2D_{5/2})_{\text{單}} + 2\beta^2(\delta a_{5/2})_{5d} + \beta^2(\delta a_{5/2})_{6s}}{\alpha_0^2 a(^2D_{3/2})_{\text{單}} + 2\beta^2(\delta a_{3/2})_{5d} + \beta^2(\delta a_{3/2})_{6s}}, \quad (31)$$

其中 $a(^2D_J)_{\text{單}}$ 代表單組態下的 $a(^2D_J)$ 值; $(\delta a_J)_{5d}$ 代表包含 5d 電子矩陣元的修正項; $(\delta a_J)_{6s}$ 代表包含 6s 電子矩陣元的修正項; β 代表混合 $(5d)^2(6s)$ 的係數.

根據我們的初步估計:

$$(\delta a_{5/2})_{6s} \cong \frac{2\mu_0\mu}{5I} \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{8\pi}{3} S^2(0), \quad (32)$$

$$(\delta a_{3/2})_{6s} \cong \frac{-2\mu_0\mu}{3I} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{5} \cdot \frac{8\pi}{3} S^2(0), \quad (33)$$

$$(\delta a_{5/2})_{5d} \cong \frac{2\mu_0\mu}{5I} \sqrt{\frac{2}{15}} \cdot \frac{20}{7} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle, \quad (34)$$

$$(\delta a_{3/2})_{5d} \cong \frac{2\mu_0\mu}{3I} \sqrt{\frac{3}{10}} \cdot \frac{3}{5} \cdot \frac{20}{5} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle. \quad (35)$$

由於 s 波的徑向部分在 r 小的地方比 d 波要大很多，因此由 $(6s)$ 所產生的修正是主要的。從前面的數據也可以看出： $4\pi S^2(0) \sim 24 \langle \frac{1}{r^3} \rangle$ ；並且一部分 $(\delta a_J)_{5d}$ 應與 a_0^2 項合在一起，使得 $a(^2D_J)_{\text{單}}$ 的係數為 1。剩下的一部分與 $(\delta a_J)_{6s}$ 才是真正對單組態理論的修正。這樣，我們就得到

$$\frac{\delta a_{5/2}}{\delta a_{3/2}} = \frac{\beta^2(2(\delta a_{5/2})_{5d} - a(^2D_{5/2})_{\text{單}} + \delta(a_{5/2})_{6s})}{\beta^2(2(\delta a_{3/2})_{5d} - a(^2D_{3/2})_{\text{單}} + \delta(a_{3/2})_{6s})} \cong -0.6. \quad (36)$$

這說明組態 $(5d)^2(6s)^1$ 對 a 值的修正是近似地滿足條件 (8) 的。因此加入這種組態混合是有可能解釋實驗的。第二步我們就來看一下 β 應為多少大才能解釋實驗。計算的結果指出，當

$$\beta = 0.6 \quad (37)$$

時，才能得到 $\frac{a(^2D_{5/2})}{a(^2D_{3/2})} \cong \frac{9}{7}$ 的結果，這顯然是太大了一些。從理論上看，要混合這樣多的 $(5d)^2(6s)$ 是不太可能的。固然我們知道 $(5d)^2(6s)$ 組態的能量比較低，因此 β 可能比 α_1 及 α_2 都要大一些，於是由這種組態產生的修正也比較大，但是要解釋實驗還是相當困難的。

根據上面的計算及分析，我們可以得到以下的結論：對於 La_{87} 的情形，加入組態混合對超精細結構理論是有所修正的，並且 $(5d)^2(6s)$ 對修正的貢獻可能更大一些，但是總的看起來，理論上的修正還是比較小，要解釋實驗還是有困難的。

最後，我們謹向領導我們進行這項工作的鄧稼先同志及于敏同志表示衷心的感謝，並向本單位計算組及高中昌同志致謝，他們幫助我們進行了許多重積分的數字計算。

參 考 文 獻

- [1] 丁渝, *Phys. Rev.* **108** (1957), 295.
- [2] G. F., Koster, *Phys. Rev.* **86** (1952), 148.
- [3] Schwartz, C., *Phys. Rev.* **97** (1955), 380.
- [4] Hartree, D. R., *Proc. of the Camb. Philos. Soc.* **51** (1955), 684.
- [5] Hartree, D. R., *Proc. of the Camb. Philos. Soc.* **51** (1955), 693.
- [6] Hartree, D. R., *Reports on Progress in Phys.* **XI** (1946—47), 113.

О СВЕРХТОННИХ СТРУКТУРАХ La_{57}

Юй Ю-вен Чжан Чжун-хуа

(Академия наук Китая)

Резюме

На опыте измеренное отношение коэффициентов сверхтонких структур $\frac{a(^2D_{5/2})}{a(^2D_{3/2})}$ в 3 раза больше теоретически вычисленных результатов, получающихся при учёте чистой конфигурации. Чтобы приблизить эти результаты к экспериментальным, обычно принято учитывать влияние смешанных конфигураций. Мы прежде всего кроме конфигурации $(6s)^2(5d)$ прибавили конфигурацию $(6s)(7s)(5d)$, причем провели подробное вычисление. Полученные результаты немного лучше чем при вычислении с учётом только чистой конфигурации, но с экспериментальными данными эти результаты далеко не совпадают. Потом рассматривали конфигурацию $(5d)^2(6s)$. Энергия этой конфигурации сравнительно небольшая, поэтому вклад этой конфигурации в процентах больше. После некоторого несложного анализа и оценки можно заключить, что для того, чтобы получить большее соответствие с экспериментальными данными, нужен больший вклад конфигурации $(5d)^2(6s)$ (примерно 0.36). Поэтому мы считаем, что учёт конфигурации $(5d)^2(6s)$ даст более хорошие теоретические результаты, однако до совпадения с экспериментальными данными ещё довольно далеко.