

ДИСКРЕТНАЯ КОНВЕРСИЯ ГАММА-ЛУЧЕЙ В ^{229}Th И В ВЫСОКОИОНИЗИРОВАННЫХ ИОНАХ $^{125}\text{Te}^Q$

И. М. Банд*

Петербургский институт ядерной физики Российской академии наук
188300, Гатчина, Ленинградская обл., Россия

Поступила в редакцию 19 июня 2001 г.

Рассмотрен комплекс проблем, связанных с дискретной конверсией гамма-лучей. В случае дискретной конверсии определен аналог коэффициентов внутренней конверсии и проведены конкретные расчеты. Вычисленные периоды полураспада ядерного уровня $E_\gamma = 35.492$ кэВ в ионах $^{125}\text{Te}^Q$ ($Q = 45-48$) хорошо согласуются с измеренными величинами. Расчеты спектра оптических фотонов, сопровождающих девозбуждение ядерного уровня $E_\gamma = 3.5 \pm 1$ эВ в ^{229}Th , выполненные в рамках многофигурационного метода Дирака–Фока, показывают, что наиболее интенсивные линии спектра находятся в области 2.3–2.4 эВ, что согласуется с данными экспериментов.

PACS: 23.20.Nx, 27.60.+j, 27.90.+b, 32.30.Jc

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время вызывает интерес изучение явления дискретной (подпороговой, резонансной) внутренней конверсии γ -лучей. Это те случаи, когда энергия ядерного перехода E_γ меньше энергии связи электрона ε_b , но близка к ней. Для нейтральных атомов это явление в природе практически не наблюдается. Исключение, возможно, представляет собой случай девозбуждения уникального изомерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 3.5 \pm 1$ эВ в ^{229}Th [1, 2].

Работа [3] подтверждает, что имеет место дискретная конверсия. Это эксперимент по измерению периодов полураспада $T_{1/2}$ первого возбужденного ядерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 35.492$ кэВ в высокоионизированных ионах $^{125}\text{Te}^Q$, $Q = 45-48$. Конфигурация таких ионов имеет вид: $1s^2 2s^2 2p^q$ ($q = 3-0$). Девозбуждение этого уровня происходит путем $M1$ -перехода на основное состояние ядра $I_{gr} = 1/2^+$.

Как известно, период полураспада ядерного уровня связан с коэффициентом внутренней конверсии (КВК) соотношением

$$T_{1/2} = \frac{T_{1/2}^{nucl}}{1 + \alpha_{tot}}, \quad (1)$$

где α_{tot} — полный КВК. Для нейтрального теллура $\alpha_{tot} = 13.6$, $T_{1/2} = 1.49$ нс [4], откуда следует, что для ионов $^{125}\text{Te}^Q$

$$T_{1/2}^Q = \frac{21.8}{1 + (\alpha_{tot})^Q} \text{ нс}. \quad (2)$$

Для ионов Te^Q при $Q = 45-48$ энергия связи K -электронов больше энергии ядерного перехода, поэтому «нормальная» конверсия (при которой энергия ядерного перехода больше энергии связи электрона атома) на K -оболочке невозможна. КВК в этих ионах определяются конверсией на L -подоболочках атома. Вычислив КВК $\alpha_L(E_\gamma)$, можно по формуле (2) определить период полураспада ядерного уровня в предположении, что реализуется лишь «нормальная» конверсия. В табл. 1 приведены периоды полураспада $T_{1/2}^Q$, вычисленные по формуле (2) в предположении, что имеет место только «нормальная» α_L^{M1} конверсия, и измеренные в [3] периоды полураспада. Из табл. 1 видно, что данные экспериментов [3] можно объяснить, только предположив, что при девозбуждении ядерного уровня в ионах $^{125}\text{Te}^Q$ ($Q = 45 - 48$) имеет место дискретная конверсия на K -оболочке, что приводит к значительному увеличению α_{tot}^{M1} по сравнению с «нормальным» КВК α_L^{M1} .

Именно этот случай девозбуждения ядерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 35.492$ кэВ в $^{125}\text{Te}^Q$ следует

*E-mail: band@thd.npfi.spb.ru

Таблица 1. Вычисленные в предположении, что может произойти только «нормальная» конверсия, и измеренные в [3] периоды полураспада $T_{1/2}^Q$ при девозбуждении ядерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 35.492$ кэВ в ионах $^{125}\text{Te}^Q$

Q	$E_\gamma - \varepsilon_b$, эВ	α_K^{M1}	α_L^{M1}	α_{tot}^{M1}	$T_{1/2}^Q$, нс	
					расчет	эксп. [3]
0	+3549	11.6	1.55	13.6		1.49 [4]
45	-206	—	1.63	1.63	8.25	< 2
46	-521	—	1.65	1.65	8.20	< 2
47	-870	—	1.60	1.60	8.33	6 ± 1
48	-1205	—	1.56	1.56	8.48	11 ± 2

использовать, сверяя теорию с экспериментом. В работах [5, 6] полагалось, что полученные в них экспериментальные результаты доказывают проявление дискретной конверсии в ^{229}Th . Однако это вызывает критику как со стороны экспериментаторов [7, 8], так и со стороны теоретиков [9, 10].

Рассмотрению явления дискретной конверсии посвящен ряд работ [11–16]. В работах [11–13] вводится в рассмотрение фактор дискретной конверсии (ФДК), который является аналогом КВК в случае дискретной конверсии:

$$\mathcal{R}_{i \rightarrow f}^{\tau L}(E_\gamma) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_f}{(E_\gamma - \omega_f)^2 + (\Gamma_f/2)^2} \tilde{\alpha}_{i \rightarrow f}^{\tau L}. \quad (3)$$

Здесь E_γ — энергия ядерного перехода, ω_f — энергия электронного перехода, ближайшая по величине к E_γ . Авторы [11–13] предлагают величину $\tilde{\alpha}_{i \rightarrow f}^{\tau L}$ вычислять по тем же формулам, по которым вычисляются «нормальные» КВК [17, 18], и поэтому предлагают за величиной $\tilde{\alpha}_{i \rightarrow f}^{\tau L}$ сохранить название дискретного КВК. Но, вследствие того что волновые функции связанных и свободных электронов нормируются по-разному, дискретный КВК $\tilde{\alpha}_{i \rightarrow f}^{\tau L}$ имеет размерность энергии. Напомним, что волновые функции дискретного спектра нормируются так, что

$$\int_0^\infty (g^2 + f^2)r^2 dr = 1, \quad (4)$$

а волновые функции свободных электронов нормируются на единичный интервал энергии так, что

$$r^2 \left(g^2 + \frac{E+m}{E-m} f^2 \right)_{r \rightarrow \infty} = \frac{E+m}{\pi(E^2 - m^2)^{1/2}}. \quad (5)$$

В формулах (4), (5) g и f — большая и малая компоненты релятивистской радиальной волновой функ-

ции электрона, m — масса покоя, E — полная энергия электрона. Формула (3) получена в [11] из условия, что образующееся в процессе конверсии атомное состояние f распадается с конечной шириной Γ_f . В [11] Γ_f определена как полная ширина возбужденного уровня атома, для которого ω_f наиболее близка к E_γ . В этой работе полагается, что в качестве Γ_f можно использовать радиационную ширину возбужденного уровня атома $\Gamma_f = \Gamma_f^{rad}$. В [13] Γ_f определена для ионов Te^Q как радиационная дырочная ширина, определяемая переходом $2p \rightarrow 1s$ в возбужденном ионе с конфигурацией $1s2s^22p^q ns$. Отметим, что дырочные ширины Γ_{ns}^{hole} для всех уровней возбужденного иона Te^Q практически постоянны, не зависят от ns .

Напомним, что при $M1$ -переходах на s -оболочках атома почти 100% вклада в КВК дают переходы в состояния с релятивистским квантовым числом $\kappa = -1$ ($\kappa = (\ell - j)(2j + 1)$). Поэтому при рассмотрении дискретной конверсии при ядерных переходах $M1$ на s -оболочках атома мы ограничимся рассмотрением электронных переходов на возбужденные уровни атома, включающие ns -электроны.

В табл. 2 приведены периоды полураспада $T_{1/2}^Q$ ядерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 35.492$ кэВ в $^{125}\text{Te}^Q$, вычисленные по формуле (2), в которой полагалось

$$\alpha_{tot}^{M1} = \mathcal{R}_{1s \rightarrow ns}^{M1} + \alpha_L^{M1}.$$

ФДК $\mathcal{R}_{1s \rightarrow ns}^{M1}$ вычислялись по формуле (3) в двух случаях: когда в качестве Γ_f использовались, как предлагается в [11], радиационные ширины Γ_{ns}^{rad} , вычисленные для уровней ns , энергии которых наиболее близки к E_γ , и когда, как предлагается в [13], в качестве Γ_f использовались ширины дырочных уровней Γ_{ns}^{hole} . Расчеты, приведенные в табл. 2, вы-

Таблица 2. Периоды полураспада $T_{1/2}^Q$ ядерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 35.492$ кэВ в ионах $^{125}\text{Te}^Q$, вычисленные в рамках метода ДФ

Q	45	46	47
конфигур.	$1s2s^22p^3ns$	$1s2s^22p^2ns$	$1s2s^22pns$
$T_{1/2}^Q$ (эксп.), нс	< 2	< 2	6 ± 1
ns	$12s$	$8s$	$6s$
$E_\gamma - \omega_{ns}$, эВ	-1.4	-35	$+44$
Расчет: метод, предложенный в [11]			
Γ_{ns}^{rad} , эВ	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$3.8 \cdot 10^{-3}$	$7.5 \cdot 10^{-3}$
$T_{1/2}^Q$, нс	4.7	8.2	8.3
Расчет: метод, предложенный в [13]			
Γ_{ns}^{hole} , эВ	4.02	2.78	1.41
$T_{1/2}^Q$, нс	0.47	6.7	8.3

Примечание. n — главное квантовое число, s — орбитальное квантовое число электрона, ω_{ns} — энергия возбужденного уровня с конфигурацией $1s2s^22p^a ns$, ближайшая по величине к E_γ ; $T_{1/2}^Q$ (эксп.) — измеренный в [3] период полураспада

полнены в рамках метода Дирака–Фока (ДФ). Как видно из табл. 2, расчеты ФДК по формуле (3) с использованием в качестве Γ_f как радиационной ширины ns уровня, так и дырочной ширины, никак не согласуются с данными эксперимента [3].

Отметим, что все расчеты, приведенные в настоящей работе, были проведены на основе методов и программ, разработанных нами. Это относится к расчетам электронных структур в рамках метода ДФ [19, 20], в рамках многоконфигурационного метода Дирака–Фока (МКДФ) [15, 16, 21, 22]; к расчетам КВК и вероятностей электронных переходов в рамках методов ДФ [23, 24] и МКДФ [15, 16]. В [15, 16] приведены формулы для расчета КВК и вероятностей электронных переходов в рамках метода МКДФ.

2. ФАКТОРЫ ДИСКРЕТНОЙ КОНВЕРСИИ ВБЛИЗИ ТОЧЕК РЕЗОНАНСА

В настоящей работе мы предлагаем использовать особенности КВК [25, 26], чтобы получить соотношение между дискретными и «нормальными» КВК вблизи точек резонанса.

В рамках метода ДФ радиальные составляющие электронных волновых функций при малых r про-

порциональны расстоянию r от центра атома:

$$rg \approx \begin{cases} N_b (\sqrt{m^2 - E^2} r)^\gamma, \\ N_c (\sqrt{E^2 - m^2} r)^\gamma. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - (\alpha Z)^2}$, α — постоянная тонкой структуры. N_c и N_b — нормирующие множители волновых функций соответственно свободных и связанных электронов. Для свободного электрона

$$E = m + E_k, \quad (7)$$

для связанного электрона

$$E = m - \varepsilon_b, \quad (8)$$

где E_k — кинетическая энергия свободного электрона, ε_b — энергия связи электрона атома. При малых кинетических энергиях свободного электрона и малых энергиях связи

$$\begin{aligned} m^2 - E^2 &\approx 2m\varepsilon_b, \\ E^2 - m^2 &\approx 2m \cdot E_k. \end{aligned} \quad (9)$$

В случае, когда кинетическая энергия E_k свободного электрона равна энергии связи атомного электрона $\varepsilon_b(ns)$, волновые функции свободного и связанного электронов с одним и тем же релятивистским квантовым числом κ при малых r различаются лишь нормирующими множителями $N_b(\varepsilon_b(ns))$ и

$N_c(E_k = \varepsilon_b(ns))$. Известно, что величина КВК определяется во внутренней области атома [25, 26]. В [26] было показано, что область формирования КВК для $M1$ -переходов на s -оболочках атома определяется средним значением радиуса K -оболочки. При достаточно малых энергиях поведение волновых функций в пределах области формирования определяется соотношениями (6).

Будем использовать обозначение $E_k(ns)$ для $E_k = \varepsilon_b(ns)$. Сравним дискретный КВК $\tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}$ при конверсионном переходе n_0s электрона на более высокую орбиту ns возбужденного атома и «нормальный» КВК $\alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns))$ в случае, когда кинетическая энергия свободного электрона равна энергии связи ns -электрона. Поведение волновых функций электронов в конечном состоянии системы при малых r , входящих в выражение как для «нормальной», так и для дискретной конверсии, имеет одинаковый характер, а различаются они лишь постоянным множителем, равным отношению нормирующих множителей $N_c(E_k(ns))/N_b(\varepsilon_b(ns))$. Обозначим этот постоянный (размерный) множитель через $2/\pi G_{ns}$. При достаточно близких энергиях перехода из формул, определяющих КВК [17, 18], следует

$$\alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns)) \approx \frac{2}{\pi G_{ns}} \tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}, \quad (10)$$

причем,

$$\frac{2}{\pi G_{ns}} = \frac{N_c(E_k(ns))}{N_b(\varepsilon_b(ns))}.$$

Можно показать [27], что в случае кулоновского поля для электронов с достаточно большими главными квантовыми числами n справедливо соотношение

$$\frac{N_c(E_k(ns))}{N_b(\varepsilon_b(ns))} \approx \frac{2}{\pi \Delta_{ns}},$$

где

$$\Delta_{ns} = \varepsilon_b(ns) - \varepsilon_b((n+1)s) = E_{tot}((n+1)s) - E_{tot}(ns). \quad (11)$$

Из (10) следует, что

$$G_{ns} = \frac{2}{\pi} \frac{\tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}}{\alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns))}. \quad (12)$$

В табл. 3 приведены вычисленные по формуле (12) коэффициенты G_{ns} и величины разностей между энергиями соседних уровней возбужденных атомов Δ_{ns} . Как видно из таблицы, величины G_{ns} при достаточно больших n близки к Δ_{ns} , причем, тем бли-

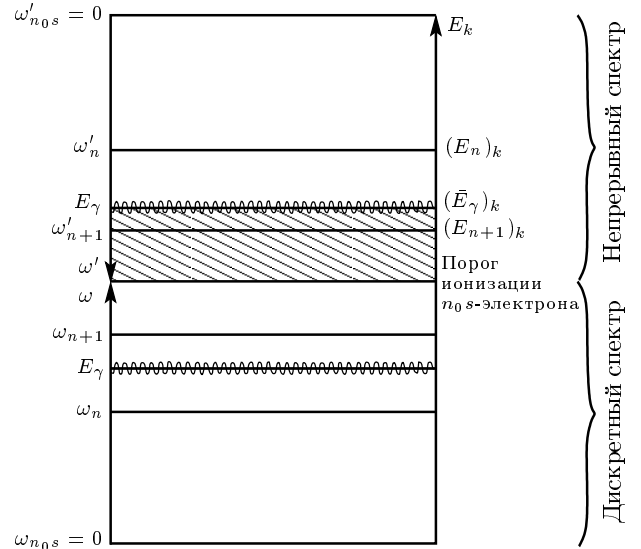


Рис. 1. Иллюстрация к модели вычисления ФДК на n_0s оболочке атома; ω_n — энергия электронного перехода, E_γ — энергия ядерного перехода. В верхней части плоскости по оси E_k нанесены кинетические энергии конверсионных электронов при «нормальной» конверсии; $(E_n)_k$ — кинетическая энергия электрона при «нормальной» конверсии; точка $(E_n)_k = \varepsilon_b(ns)$ является зеркальным отражением точки ω_n относительно порога ионизации n_0s -электрона; $(\bar{E}_\gamma)_k$ — зеркальное отражение точки E_γ , $(\bar{E}_\gamma)_k = \varepsilon_b(n_0s) - E_\gamma$. Ось ω' — зеркальное отражение оси ω . Заштрихована область, где энергетически возможна «нормальная» конверсия

же, чем больше n . Таким образом, формула (10) приобретает вид:

$$\alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns)) \approx \frac{2}{\pi \Delta_{ns}} \tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}. \quad (13)$$

Ситуацию, описываемую формулой (13), иллюстрирует рис. 1. Энергии $E_k(ns)$, при которых вычисляются «нормальные» КВК в левой части формулы (13), являются зеркальными отражениями точек $\varepsilon_b(ns)$ относительно порога ионизации n_0s -электрона.

Обратим внимание на следующее обстоятельство. Из формулы (3) следует, что в точках резонанса ФДК равен

$$\mathcal{R}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}(E_\gamma = \omega_{ns}) = \frac{2}{\pi \Gamma_{ns}} \tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}.$$

Проведенное нами рассмотрение показывает, что вероятность дискретной конверсии вблизи резонанса при достаточно больших значениях главного квантового числа n (см. формулу (13)) определяется, глав-

Таблица 3. Коэффициенты $G_{n,s}$, вычисленные по формуле (12), и разности полных энергий соседних уровней возбужденных ионов (атомов) $\Delta_{n,s}$ (11)

Te ^Q						229Th		
Переходы 1s → ns						Переходы 7s → ns		
Q = 45			Q = 46					
ns	G _{ns} , эВ	Δ _{ns} , эВ	ns	G _{ns} , эВ	Δ _{ns} , эВ	ns	G _{ns} , эВ	Δ _{ns} , эВ
11s	39	38	7s	141	139	8s	0.851	0.941
12s	30	30	8s	103	95	9s	0.347	0.381
13s	25	24	9s	73	68	10s	0.177	0.197
14s	19	19	10s	54	51	11s	0.103	0.112

ным образом, не шириной отдельного уровня возбужденного атома, а плотностью $1/\Delta_{ns}$ уровней в атоме.

В табл. 2 для ионов $^{125}\text{Te}^Q$ приведены радиационные ширины Γ_{ns}^{rad} и Γ_{ns}^{hole} уровней, энергии которых наиболее близки к энергии ядерного перехода $E_\gamma = 35.492$ кэВ. Для ^{229}Th в возбужденном состоянии $7s8s6d_{3/2}^2$ ширина уровня, энергия которого $\omega_{8s} = 3.45$ эВ ближе всего к энергии ядерного перехода $E_\gamma = 3.5$ эВ, равна $\Gamma_{8s}^{rad} = 2.08 \cdot 10^{-8}$ эВ. В табл. 3 приведены энергетические разности Δ_{ns} между соседними уровнями атомов. Из данных, приведенных в табл. 2, 3, можно определить величины Δ_{ns}/Γ_{ns} для уровней ns , энергии которых наиболее близки к энергиям ядерных переходов в $^{125}\text{Te}^Q$ и в ^{229}Th , т. е. оценить, насколько в точках резонанса ФДК, определенные по формуле (3), превышают величины

$$\frac{2}{\pi \Delta_{ns}} \tilde{\alpha}_{n_0 s \rightarrow ns}^{M1}$$

вычисленные по формуле (13) в точках резонанса. Для ионов $^{125}\text{Te}^Q$ при $Q = 45-47$ отношение Δ_{ns}/Γ_{ns} заключено в пределах:

$$2.5 \cdot 10^4 \lesssim \frac{\Delta_{ns}}{\Gamma_{ns}^{rad}} \lesssim 3.2 \cdot 10^4,$$

$$7.5 \lesssim \frac{\Delta_{ns}}{\Gamma_{ns}^{hole}} \lesssim 1.7 \cdot 10^2,$$

для ^{229}Th отношение

$$\Delta_{8s}/\Gamma_{8s}^{rad} \approx 4.5 \cdot 10^7.$$

Приведенные оценки, как и результаты вычислений, представленные в табл. 2, показывают, что конверсионная ширина процесса значительно отличается от ширины отдельного уровня возбужденного атома.

Соотношение (13) представляет модель для описания процесса дискретной конверсии. В этой модели аналог (фактор) дискретной конверсии в точке резонанса $E_\gamma = \omega_{ns}$ определен нами как «нормальный» КВК, вычисляемый при значении кинетической энергии свободного электрона, равной энергии связи $\epsilon_b(ns)$ ns -электрона в атоме. Все расчеты, приведенные ниже, выполнены в рамках этой модели.

3. ФАКТОРЫ ДИСКРЕТНОЙ КОНВЕРСИИ ВНЕ ТОЧЕК РЕЗОНАНСА

Обратимся к определению и свойствам δ -функции. Рассмотрим представление δ -функции в виде

$$\delta(x, \Delta)_{\Delta \rightarrow 0} = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{x^2 + (\Delta/2)^2}. \quad (14)$$

В качестве параметра Δ возьмем переменную величину Δ_{ns} (11), $\Delta_{ns} \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Воспользуемся известным свойством δ -функции

$$f(\xi) = \int_0^\infty f(x) \delta(x - \xi) dx \quad (15)$$

и аппроксимируем интеграл (15) суммой по известным значениям функции $f(x_n)$ в точках x_n :

$$f(\xi) \approx \sum_n \delta(x_n - \xi) f(x_n) dx_n. \quad (16)$$

Подставляя в (16) выражение для δ -функции (14) и значения модельных ФДК (13), т. е. «нормальные» КВК, $\alpha_{n_0 s}^{M1}(E_k(ns))$, получаем «полный» ФДК в виде

$$[\mathcal{F}_{n_0 s}^{M1}(E_\gamma)]^{tot} = \frac{1}{N} \sum_n \frac{\Delta_{ns}^2 \alpha_{n_0 s}^{M1}(E_k(ns))}{(E_k(ns) - (\bar{E}_\gamma)_k)^2 + (\Delta_{ns}/2)^2}, \quad (17)$$

$$N = \sum_n \frac{\Delta_{ns}^2}{E_k^2(ns) + (\Delta_{ns}/2)^2}. \quad (18)$$

Через $(\bar{E}_\gamma)_k$ в (17) мы обозначили кинетическую энергию, соответствующую энергии E_γ в зеркально отраженной плоскости (см. рис. 1). Мы определили «полный» ФДК, имея в виду, что в формуле (17) проводится суммирование по всем уровням возбужденного атома. Энергетически «нормальная» конверсия возможна при $E_k(ns) \leq (\bar{E}_\gamma)_k$ или $\varepsilon_b(ns) \leq \bar{E}_\gamma$. В противном случае КВК $\alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns)) = 0$. Поэтому ФДК равен

$$\mathcal{F}_{n_0s}^{M1}(E_\gamma) = \frac{1}{N} \times \sum_{\varepsilon_b(ns) \leq \bar{E}_\gamma} \frac{\Delta_{ns}^2 \alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns))}{(E_k(ns) - (\bar{E}_\gamma)_k)^2 + (\Delta_{ns}/2)^2}. \quad (19)$$

И, наконец, преобразуем формулы (17)–(19), записав их через ω_{ns} , E_γ и $\varepsilon_b(ns)$. Заметим, что

$$\begin{aligned} E_k(ns) &= \varepsilon_b(n_0s) - \omega_{ns} = \varepsilon_b(ns), \\ (\bar{E}_\gamma)_k &= \varepsilon_b(n_0s) - E_\gamma, \\ E_k(ns) - (\bar{E}_\gamma)_k &= E_\gamma - \omega_{ns}. \end{aligned} \quad (20)$$

Из (20) следует, что формулы (17)–(19) приобретают вид:

$$\begin{aligned} [\mathcal{F}_{n_0s}^{M1}(E_\gamma)]^{tot} &= \\ &= \frac{1}{N} \sum_{ns} \frac{\Delta_{ns}^2 \alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns))}{(E_\gamma - \omega_{ns})^2 + (\Delta_{ns}/2)^2}, \end{aligned} \quad (21)$$

$$N = \sum_{ns} \frac{\Delta_{ns}^2}{\varepsilon_b^2(ns) + (\Delta_{ns}/2)^2}, \quad (22)$$

$$\mathcal{F}_{n_0s}^{M1}(E_\gamma) = \frac{1}{N} \sum_{\varepsilon_b(ns) \leq \bar{E}_\gamma} \frac{\Delta_{ns}^2 \alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns))}{(E_\gamma - \omega_{ns})^2 + (\Delta_{ns}/2)^2}. \quad (23)$$

Выражение (23) допускает следующую интерпретацию процесса дискретной конверсии. Девозбуждение ядерного уровня вызывает возбуждение атома, которое сопровождается «нормальной» конверсией на тех уровнях возбужденного атома, для которых энергия связи электрона $\varepsilon_b(ns) \leq \bar{E}_\gamma$.

Поскольку выражение (16) для $f(\xi)$ аппроксимирует интеграл (15) с определенной погрешностью, вычисленные по формулам (22), (23) ФДК $\mathcal{F}_{n_0s}^{M1}(E_\gamma = \omega_{ns})$ в точках резонанса лишь с определенной точностью согласуются с аналогом дискретной конверсии $\alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns))$, определенным формулой (13).

Для $^{125}\text{Te}^Q$ мы сопоставили величины $\mathcal{F}_{1s}^{M1}(E_\gamma = \omega_{ns})$ (23) в точках резонанса $E_\gamma = \omega_{ns}$ с величинами $\alpha_{1s}^{M1}(E_k(ns))$, т. е. вычислили величину погрешности, связанную с аппроксимацией интеграла (15) суммой (16). При этом получили

$$\frac{|\mathcal{F}_{1s}^{M1}(\omega_{ns}) - \alpha_{1s}^{M1}(E_k(ns))|}{\alpha_{1s}^{M1}(E_k(ns))} \leq (0.16 \cdot 100)\%. \quad (24)$$

В дальнейшем, указывая погрешность вычислений, мы будем иметь в виду именно эту погрешность в 16%.

В табл. 4 приведены ФДК (23) и вычисленные по формуле (2) при

$$\alpha_{tot}^{M1}(E_\gamma) = \mathcal{F}_{1s}^{M1}(E_\gamma) + \alpha_L^{M1}(E_\gamma)$$

периоды полураспада $T_{1/2}^Q$ в ионах $^{125}\text{Te}^Q$ при $Q = 45\text{--}48$. Эта таблица иллюстрирует хорошее совпадение вычисленных в настоящей работе и измеренных в [3] периодов полураспада $T_{1/2}^Q$. В табл. 4 приведены также «нормальные» КВК, вычисленные для ионов с зарядовым числом $Q = 0, 24, 34, 40, 44$ в $^{125}\text{Te}^Q$, и полные ФДК, вычисленные для ионов с $Q = 45\text{--}48$ по формуле (21). Заметим, что «нормальные» КВК (в тех случаях, когда «нормальная» конверсия возможна) и ФДК, вычисленные в случаях, когда «нормальная» конверсия энергетически запрещена, близки между собой. Это обстоятельство подтверждает тот факт, что процессы, происходящие в ядре, мало зависят от окружающей ядро электронной оболочки атома. Близость вычисленных полных ФДК $[\mathcal{F}_{1s}^{M1}(E_\gamma)]^{tot}$ и «нормальных» КВК $\alpha_{1s}^{M1}(E_\gamma)$ для всех ионов $Q = 0\text{--}48$ является дополнительным аргументом в пользу предложенного метода рассмотрения дискретной конверсии.

Расхождение между экспериментальным и вычисленным периодом полураспада при $Q = 48$ связано с тем обстоятельством, что в этом случае формула (16) практически неприменима, так как в соответствующем спектре возбужденного иона точки n расположены на большом расстоянии друг от друга.

4. ДИСКРЕТНАЯ КОНВЕРСИЯ ПРИ ДЕВОЗБУЖДЕНИИ УРОВНЯ $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 3.5 \pm 1$ эВ В ^{229}Th

Рассмотрим случай ^{229}Th . В экспериментальных работах [5, 6] было проведено измерение оптических эмиссионных спектров, связанных, как полагают авторы, с девозбуждением изомера $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 3.5 \pm 1$ эВ в ^{229}Th [1,2]. Девозбуждение этого уровня происходит путем $M1$ -перехода в основное

Таблица 4. «Нормальные» КВК $\alpha_{1s}^{M1}(E_\gamma)$, полные ФДК $[\mathcal{F}_{1s}^{M1}(E_\gamma)]^{tot}$ (21), ФДК $\mathcal{F}_{1s}^{M1}(E_\gamma)$ (23) и периоды полураспада $T_{1/2}^Q$, вычисленные по формуле (2) при $\alpha_{tot}^{M1} = \mathcal{F}_{1s}^{M1}(E_\gamma) + \alpha_L^{M1}(E_\gamma)$ для изомерного ядерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 35.492$ кэВ в $^{125}\text{Te}^Q$

Q	$E_\gamma - \varepsilon_b(1s)$, эВ	$\alpha_{1s}^{M1}(E_\gamma)$	$[\mathcal{F}_{1s}^{M1}(E_\gamma)]^{tot}$ (21)	$\mathcal{F}_{1s}^{M1}(E_\gamma)$ (23)	$T_{1/2}^Q$, нс	
					расчет	эксп. [3]
0	3494	11.7				1.49 [4]
24	2725	11.3				
34	1685	10.9				
40	94	10.4				
44	89	7.18		1.3 ± 0.2		
45	-125	—	13.8 ± 2.2	9.12 ± 1.50	1.84 ± 0.29	< 2
46	-454	—	11.4 ± 1.8	6.41 ± 1.00	2.41 ± 0.39	< 2
47	-797	—	11.6 ± 1.9	1.40 ± 0.20	5.44 ± 0.87	6 ± 1
48	-1201	—	8.91 ± 1.40	1.78 ± 0.30	5.12 ± 0.80	11 ± 2

состояние ядра $I_{gr} = 5/2^+$. Напомним, что конфигурация основного состояния атома тория имеет вид $7s^2 6d_{3/2}^2$. При конверсионных переходах M1 на 7s-оболочке атома (именно на 7s-оболочке КВК максимален) основной вклад в величину КВК дают переходы 7s-электрона в возбужденные состояния атома с конфигурациями $7s ns 6d_{3/2}^2$. Спектр вторичных фотонов определяется E1-переходами в состоянии атома с конфигурациями $7s n'p 6d_{3/2}^2$. Как в экспериментах [5], так и в экспериментах [6], наиболее интенсивные линии спектра наблюдались в диапазоне энергий 2.3–2.4 эВ и около 3.5 эВ. Пики в области 3.5 эВ авторы [5] отнесли на счет γ -излучения, а в области 2.4 эВ — на счет излучения, связанного с возбуждением атома при дискретной M1-конверсии. Эксперименты [5] проводились с металлическими образцами, содержащими ^{233}U , эксперименты [6] — с жидкими образцами соединений, содержащих ^{233}U . В обоих случаях измерения проводились не в вакууме. В работах [7, 8] аналогичные измерения были проведены в вакууме, и никакого излучения не было зафиксировано. Авторы работ [7, 8] полагают, что пики в области 3.5 эВ, обнаруженные в [5, 6], связаны с люминесценцией воздуха под действием α -частиц света. В [7, 8] не объясняется появление пиков в области 2.3–2.4 эВ, обнаруженных в [5, 6]. В теоретической работе [9] автор объясняет ситуацию в экспериментах [7, 8], рассмотрев новый канал безрадиационного распада этого уровня в металлическом тории через электроны проводимости. Обсудим результаты работы [10]. В ней вычислены энергии спектральных

линий, связанных с E1-переходами с возбужденных уровней в тории вида $7s 8s 6d_{3/2}^2$ на уровни с конфигурациями $7s 7p_{1/2} 6d_{3/2}^2$ и $7s 7p_{3/2} 6d_{3/2}^2$. Расчеты проведены в рамках метода ДФ. Получены энергии этих переходов, равные соответственно 1.08 эВ и 1.8 эВ. На этом основании делается вывод, что наблюдаемые в [5, 6] пики в области 2.3–2.4 эВ не связаны с конверсией в ^{229}Th . Нами проведен расчет энергетического спектра при расщеплении конфигурации $7s 8s 6d_{3/2}^2(J)$ по моментам J и конфигурации $7s 7p 6d_{3/2}^2(J')$ по моментам J' в рамках метода МКДФ. При этом получено, что конфигурация $7s 8s 6d_{3/2}^2(J)$ расщепляется на 11 уровней с моментами $J = 0-3$. Поскольку основное состояние атома тория $7s^2 6d_{3/2}^2$ имеет момент $J_{base} = 2$, при конверсионных M1-переходах 7s-электрон может перейти на орбиты возбужденного атома с конфигурацией $7s 8s 6d_{3/2}^2(J)$, имеющей моменты $J = 1-3$. Переход на орбиту $7s 8s 6d_{3/2}^2(J = 0)$ с моментом $J = 0$ запрещен. Однако, как показывают наши расчеты по методу МКДФ, именно при E1-переходах с уровня $7s 8s 6d_{3/2}^2(J = 0)$ на уровни $7s 7p 6d_{3/2}^2(J' = 1)$ энергии переходов равны 1.08 и 1.8 эВ. При E1-переходах с уровней $7s 8s 6d_{3/2}^2(J = 1-3)$ на уровни $7s 7p 6d_{3/2}^2(J')$, как показывают расчеты в рамках метода МКДФ [15], наиболее интенсивные линии спектра относятся к энергиям 2.3–2.4 эВ. Таким образом, выводы в [10], основанные на расчетах в рамках усредненного метода ДФ [19, 20], в данном случае не подтвердились.

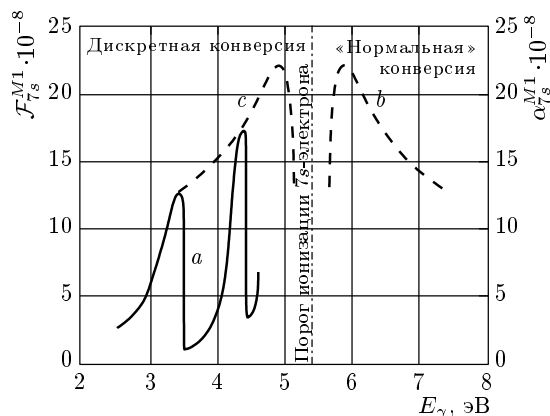


Рис. 2. Факторы дискретной конверсии (ФДК) и «нормальные» коэффициенты внутренней конверсии (КВК) $\alpha_{7s}^{M1}(E_\gamma)$ в ^{229}Th . $a - \mathcal{F}_{7s}^{M1}(E_\gamma)$, ФДК, вычисленные по формуле (23) при $E_\gamma < \varepsilon_b(7s)$; $b - \alpha_{7s}^{M1}(E_\gamma)$; «нормальные» КВК, $E_\gamma > \varepsilon_b(7s)$; $c -$ огибающая кривой $\mathcal{F}_{7s}^{M1}(E_\gamma)$

В настоящей работе мы провели вычисления ФДК при девозбуждении уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 3.5 \pm 1 \text{ эВ}$ в газообразном ^{229}Th , используя предложенную выше модель. В левой части рис. 2 представлены вычисленные по формуле (23) ФДК при энергиях E_γ , принимающих значения от 2.5 до 4.5 эВ. Кривые $\mathcal{F}_{7s}^{M1}(E_\gamma)$ имеют резонансный характер и значения фактора меняются в пределах $10^8 \lesssim \mathcal{F}_{7s}^{M1}(E_\gamma) \lesssim 2 \cdot 10^9$ при $2.5 \text{ эВ} \leq E_\gamma \leq 4.5 \text{ эВ}$. Пунктиром нанесена огибающая кривой $\mathcal{F}_{7s}^{M1}(E_\gamma)$, которая проходит по точкам $E_\gamma = \omega_{ns}$, где ω_{ns} — энергии уровней возбужденных атомов, имеющих конфигурации $7sns6d_{3/2}^2$ ($n \geq 8$). В правой части рисунка нанесена кривая $\alpha_{7s}^{M1}(E_\gamma)$, вычисленная при энергиях E_γ , больших порога ионизации $7s$ -электрона. Видно, что кривая $\alpha_{7s}^{M1}(E_\gamma)$ является зеркальным отражением относительно порога ионизации $7s$ -электрона огибающей кривой $\mathcal{F}_{7s}^{M1}(E_\gamma)$.

Мы провели расчеты оптических спектров в рамках метода МКДФ [15]. В МКДФ расчетах возбужденных состояний атома вида $7sns6d^2$ рассматривалась суперпозиция орбиталей, включающих орбитали с $n = 8-11$, а для состояний вида $7sn'pd^2$ рассматривалась суперпозиция орбиталей, включающих $n' = 7-10$. Оптический спектр в диапазоне энергий $2 \text{ эВ} \leq \omega \leq 4 \text{ эВ}$, включающий переходы со всех атомных уровней с энергией возбуждения $\omega_{ns} \lesssim 4.5 \text{ эВ}$, представлен на рис. 3. Радиационные ширины $E1$ -переходов вычислялись в калибровке скорости [15]. На этом рисунке вид-

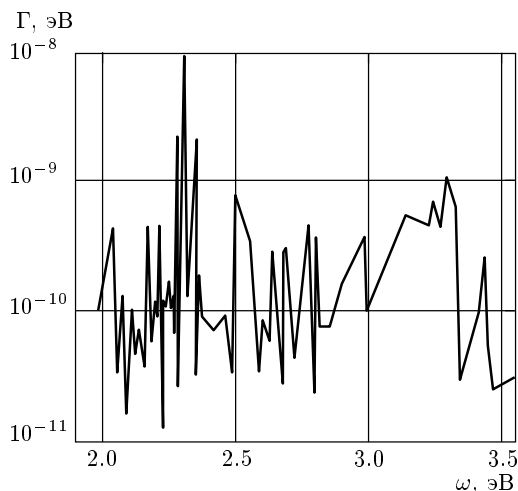


Рис. 3. Спектр вторичных оптических фотонов, связанный с распадом изомерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 3.5 \pm 1 \text{ эВ}$ в ^{229}Th . $\Gamma(\omega)$ — радиационные ширины уровней спектра, вычисленные в калибровке скорости. Расчет проведен в рамках метода МКДФ

но, что наибольшая интенсивность находится в области $\omega \approx 2.3-2.4 \text{ эВ}$. Радиационные ширины наиболее интенсивных уровней лежат в пределах $10^{-9} \text{ эВ} < \Gamma(\omega) < 10^{-8} \text{ эВ}$.

Мы не можем утверждать, что согласие наших расчетов спектра оптических фотонов при $E1$ -переходах вида $7sns6d_{3/2}^2(J) \rightarrow 7sn'pd^2(J')$ ($J \neq 0$) с экспериментами [5, 6] является убедительным доказательством того, что наблюдаемый спектр связан с дискретной конверсией в ^{229}Th . Однако, если нет других факторов, приводящих к возбуждению атома тория, то, как показывают наши расчеты, выполненные на основе метода МКДФ, спектр вторичных фотонов при дискретной конверсии должен иметь именно такой характер, какой наблюдается в экспериментах [5, 6].

5. ПОГРЕШНОСТИ В РАСЧЕТАХ, СВЯЗАННЫЕ С МОДЕЛЬНЫМ ПРЕДСТАВЛЕНИЕМ ФДК, ОПРЕДЕЛЯЕМЫМ ФОРМУЛОЙ (13)

Оценим для ионов $^{125}\text{Te}^Q$ и для ^{229}Th порядок погрешности, связанной с модельным представлением ФДК, основанной на использовании формулы (13). При кинетической энергии конверсионного электрона, равной $E_k(ns)$, энергия ядерного перехода для «нормальной» конверсии $\alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns))$

Таблица 5. Погрешности $\beta_{ns} = \frac{2\tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}(k_2)/\pi\Delta_{ns}}{\alpha_{n_0s}^{M1}(k_1)}$, связанные с использованием приближения (13)

ns	$^{125}\text{Te}^{45} (n_0s \equiv 1s); k_1 \text{ и } k_2 \text{ в кэВ}$				$^{229}\text{Th} (n_0s \equiv 7s); k_1 \text{ и } k_2 \text{ в эВ}$			
	12s	13s	14s	15s	8s	9s	10s	11s
k_1	35.917	35.886	35.861	35.842	7.53	6.61	6.23	6.04
k_2	35.493	35.524	35.548	35.567	3.45	4.37	4.75	4.94
$\tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}(k_2), \text{ эВ}$	3.99(2)	3.02(2)	2.40(2)	1.87(2)	1.73(10)	3.31(9)	1.27(9)	6.31(8)
$\Delta_{ns}, \text{ эВ}$	30.6	24.2	19.5	16.0	0.914	0.381	0.196	0.115
$\frac{2\tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}(k_2)}{\pi\Delta_{ns}}$	8.30	8.10	7.83	7.44	1.20(10)	8.69(9)	4.12(9)	3.49(9)
$\alpha_{n_0s}^{M1}(k_1)$	8.30	8.07	7.83	7.60	1.24(9)	1.75(9)	2.01(9)	2.14(9)
β_{ns}	0%	0.4%	0%	2%	9.68	4.96	2.05	1.63

должна быть равна $k_1 = \varepsilon_b(n_0s) + \varepsilon_b(ns)$. Дискретный КВК $\tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}$ должен быть вычислен при энергии ядерного перехода $k_2 = \varepsilon_b(n_0s) - \varepsilon_b(ns)$. Сравним левую и правую части формулы (13), вычислив $\alpha_{n_0s}^{M1}(E_k(ns))$ и $2\tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}/\pi\Delta_{ns}$ при энергиях перехода соответственно k_1 и k_2 . В табл. 5 приведены результаты соответствующих расчетов для $^{125}\text{Te}^Q$ и ^{229}Th и величины

$$\beta_{ns} = \frac{2\tilde{\alpha}_{n_0s \rightarrow ns}^{M1}(k_2)/\pi\Delta_{ns}}{\alpha_{n_0s}^{M1}(k_1)}$$

при конверсии на $1s$ -оболочке в $^{125}\text{Te}^Q$ и на $7s$ оболочке в ^{229}Th . Из этой таблицы видно, что в случае $^{125}\text{Te}^{45}$ различия β_{ns} составляют доли процента. Наш расчет в этом случае достаточно точно определяет истинную величину ФДК. Для ^{229}Th величины $\alpha_{7s}^{M1}(E_k(ns))$ и $2\tilde{\alpha}_{7s \rightarrow ns}^{M1}/\pi\Delta_{ns}$ могут различаться на порядок. Поэтому наш расчет определяет лишь порядок величины ФДК: ФДК заключен в пределах $10^8 - 10^{10}$ при $2.5 \text{ эВ} \leq E_\gamma \leq 4.5 \text{ эВ}$. Заметим, что ФДК $\mathcal{R}_{7s \rightarrow ns}^{M1}(E_\gamma)$ (3), вычисленные согласно методу, предложенному в [11], колеблются в пределах $10 \lesssim \mathcal{R}_{7s \rightarrow ns}^{M1}(E_\gamma) \lesssim 10^{18}$ при $2.5 \text{ эВ} \leq E_\gamma \leq 4.5 \text{ эВ}$.

6. ВЫВОДЫ

1. Для ядерных $M1$ -переходов, реализуемых путем конверсии на n_0s оболочках атома, предложена модель, которая позволяет следующим образом интерпретировать процесс дискретной конверсии. Девозбуждение ядерного уровня вызывает возбуждение атома, которое сопровождается «нормальной» конверсией на тех уровнях возбужденного атома, для которых энергия связи электрона $\varepsilon_b(ns) \leq \bar{E}_\gamma$.

В рамках этой модели получены формулы для вычисления ФДК и проведены конкретные расчеты.

2. Расчеты периодов полураспада $T_{1/2}^Q$ ядерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 35.492 \text{ кэВ}$ в ионах $^{125}\text{Te}^Q$ при $Q = 45-48$, проведенные по предлагаемой в статье методике, хорошо согласуются с данными эксперимента [3], что оправдывает использование предложенной модели при рассмотрении явлений, связанных с дискретной конверсией гамма-лучей.

3. Вычисленные по предлагаемой нами методике ФДК $\mathcal{F}_{7s}^{M1}(E_\gamma)$ в газообразном ^{229}Th при девозбуждении ядерного уровня $I = 3/2^+$, $E_\gamma = 3.5 \pm 1 \text{ эВ}$ имеют резонансный характер и лежат в пределах $10^8 \lesssim \mathcal{F}_{7s}^{M1}(E_\gamma) \lesssim 1.7 \cdot 10^9$. Наиболее интенсивные линии спектра электронных $E1$ -переходов

$$7sns6d_{3/2}^2(J = 1-3) \rightarrow 7sn'p6d_{3/2}^2(J'),$$

$$n \geq 8, \quad n' \geq 7,$$

вычисленные в рамках многоконфигурационного метода Дирака-Фока в калибровке скорости, лежат в пределах $2.3-2.4 \text{ эВ}$, что совпадает с данными экспериментов [5, 6]. Радиационная ширина наиболее интенсивных линий спектра находится в пределах $10^{-9} \text{ эВ} \lesssim \Gamma(\omega) \lesssim 10^{-8} \text{ эВ}$.

4. Показано, что вероятности электронных $E1$ -переходов в атоме существенно зависят от моментов уровней атома, между которыми происходит переход.

Автор искренне благодарен М. Г. Козлову, Л. Н. Лабзовскому и В. С. Поликанову за плодотворное обсуждение работы и ценные замечания, которые были учтены при написании статьи.

Работа поддержана РФФИ (проект № 99-03-32640).

ЛИТЕРАТУРА

1. C. W. Reich and R. G. Helmer, Phys. Rev. Lett. **64**, 271 (1990).
2. R. G. Helmer and C. W. Reich, Phys. Rev. C **49**, 1845 (1994).
3. F. Attalah, M. Aiche, J. F. Chemin et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 1715 (1995).
4. Э. Е. Берлович, В. В. Лукашевич, А. В. Попов, В. М. Романов, ЯФ **12**, 217 (1970).
5. G. M. Irwin and K. H. Kim, Phys. Rev. Lett. **79**, 990 (1997).
6. D. S. Richardson, D. M. Benton, D. E. Evans et al., Phys. Rev. Lett. **80**, 3206 (1998).
7. S. B. Utter, P. Beiersdorfer, A. Barnes et al., Phys. Rev. Lett. **82**, 505 (1999).
8. R. W. Shaw, J. P. Young, S. P. Cooper, and O. F. Webb, Phys. Rev. Lett. **82**, 1109 (1999).
9. Е. В. Ткаля, Письма в ЖЭТФ **70**, 367 (1999).
10. F. F. Karpeshin, I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, and A. A. Pastor, Phys. Rev. Lett. **83**, 1072 (1999); Ф. Ф. Карпешин, И. М. Банд, М. Б. Тржасковская, А. А. Пастор, Изв. АН, сер. физ. **63**, 38 (1999).
11. Б. А. Зон, Ф. Ф. Карпешин, ЖЭТФ **97**, 401 (1990).
12. В. Ф. Стрижов, Е. В. Ткаля, ЖЭТФ **99**, 697 (1991).
13. F. F. Karpeshin, M. R. Harston, F. Attalah et al., Phys. Rev. C **53**, 1640 (1996).
14. Ф. Ф. Карпешин, И. М. Банд, М. Б. Тржасковская, ЖЭТФ **116**, 1565 (1999).
15. И. М. Банд, Изв. АН, сер. физ. **65**, 140 (2001).
16. И. М. Банд, Изв. АН, сер. физ. **65**, 624 (2001).
17. И. М. Банд, М. А. Листенгартен, А. П. Фересин, *Аномалии в коэффициентах внутренней конверсии гамма-лучей*, Наука, Ленинград (1976).
18. И. М. Банд, М. А. Листенгартен, М. Б. Тржасковская, В. И. Фомичев, Препринт ЛИЯФ-289, Ленинград (1976).
19. I. P. Grant, Adv. Phys. **19**, 747 (1970).
20. И. М. Банд, В. И. Фомичев, Препринт ЛИЯФ-498, Ленинград (1979).
21. I. P. Grant, B. Y. McKenzie, P. H. Norrington et al., Comput. Phys. Commun. **21**, 207 (1980).
22. I. P. Grant and N. C. Paper, J. Phys. B **9**, 761 (1976).
23. I. M. Band and M. B. Trzhaskovskaya, Atom Data, Nucl. Data Tables **55**, 43 (1993).
24. И. М. Банд, М. А. Листенгартен, М. Б. Тржасковская, Опт. и спектр. **71**, 225 (1991).
25. В. Б. Берестецкий, ЖЭТФ **18**, 1057 (1948).
26. I. M. Band, L. A. Sliv, and M. B. Trzhaskovskaya, Nucl. Phys. A **156**, 170 (1970).
27. А. И. Ахнезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Физматгиз, Москва (1959).