

после чего по первому из уравнений (73,2) вычисляем Z . Числовой расчет дает

$$Z = 0,155 (2l + 1)^8.$$

Эта формула определяет значения Z , при которых в атоме впервые появляются электроны с данным l (с погрешностью около 10 %).

Совсем точные значения получаются, если вместо коэффициента 0,155 выбрать 0,17:

$$Z = 0,17 (2l + 1)^8. \quad (73,3)$$

Для $l = 1, 2, 3$ эта формула дает, после округления до ближайших целых чисел, как раз правильные значения 5, 21, 58. Для $l = 4$ формула (73,3) дает $Z = 124$; это значит, что g -электроны должны были бы впервые появиться лишь в 124-м элементе.

§ 74. Рентгеновские термы

Энергия связи внутренних электронов в атоме настолько велика, что если такой электрон переходит во внешнюю незаполненную оболочку (или вообще удаляется из атома), то возбужденный атом (или ион) оказывается механически неустойчивым по отношению к ионизации, сопровождающейся перестройкой электронной оболочки и образованием устойчивого иона. Однако, ввиду сравнительной слабости электронных взаимодействий в атоме, вероятность такого перехода все же сравнительно мала, так что продолжительность жизни τ возбужденного состояния велика. Поэтому «ширина» уровня \hbar/τ (см. § 44) оказывается достаточно малой для того, чтобы имело смысл рассматривать энергии атома с возбужденным внутренним электроном как дискретные уровни энергии «квазистационарных» состояний атома. Эти уровни называются *рентгеновскими термами*¹⁾.

Рентгеновские термы классифицируются прежде всего указанием оболочки, из которой удален электрон, или, как говорят, в которой образовалась дырка. Куда именно при этом попал электрон — почти не отражается на энергии атома и поэтому несущественно.

Полный момент совокупности электронов, заполняющих некоторую оболочку, равен нулю. После удаления из нее одного электрона оболочка приобретет некоторый момент j . Для оболочки (n, l) момент j может принимать значения $l \pm 1/2$. Таким образом, мы получим уровни, которые можно было бы обозначать посредством $1s_{1/2}, 2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}, \dots$, где значение j при-

¹⁾ Название связано с тем, что переходы между этими уровнями приводят к испусканию атомом рентгеновых лучей.

писывается в виде индекса к символу, указывающему местонахождение дырки. Общеприняты, однако, специальные символы со следующим соответствием:

$$1s_{1/2}, 2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}, 3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}, 3d_{3/2}, 3d_{5/2}, \dots$$

$$K \quad L_I \quad L_{II} \quad L_{III} \quad M_I \quad M_{II} \quad M_{III} \quad M_{IV} \quad M_V \quad \dots$$

Уровни с $n = 4, 5, 6$ обозначаются аналогичным образом буквами N, O, P .

Уровни с одинаковыми n (обозначаемые одинаковой большой буквой) расположены близко друг от друга и далеко от уровней с другими n . Причина этого заключается в том, что, благодаря относительной близости внутренних электронов к ядру, поле, в котором они находятся, является почти не экранированным полем ядра. В связи с этим их состояния водородоподобны и их энергия, в первом приближении, равна $-Z^2/2n^2$ (в атомных единицах), т. е. зависит только от n .

Учет релятивистских эффектов приводит к отделению друг от друга термов с различными j (ср. сказанное в § 72 о тонкой структуре водородных уровней), как, например, L_I и L_{II} от L_{III} ; M_I и M_{II} от M_{III} и M_{IV} . Такие пары уровней называют *релятивистскими дублетами*.

Разделение же термов с различными l при одинаковом j (например, L_I от L_{II} , M_I от M_{II}) связано с отклонением поля, в котором находятся внутренние электроны, от кулонова поля ядра, т. е. с учетом взаимодействия электрона с другими электронами. Такие дублеты называют *экранировочными*. Главный поправочный член к «водородоподобной» энергии электрона возникает от потенциала, создаваемого остальными электронами в области вблизи ядра; он пропорционален ($Z^{4/3}$ (см. (70,8)). Однако поскольку эта поправка не зависит ни от n , ни от l , она не отражается на интервалах между уровнями. Поэтому главные поправочные члены в разностях уровней связаны с взаимодействием одного электрона с ближайшими к нему электронами. Поскольку расстояния между внутренними электронами $r \sim 1/Z$ (боровский радиус в поле заряда Z), энергия указанного взаимодействия $\sim 1/r \sim Z$. С учетом этой поправки энергии рентгеновского терма можно написать, с той же точностью, в виде $-(Z - \delta)^2/2n^2$, где $\delta = \delta(n, l)$ — малая (по сравнению с Z) величина, которую можно рассматривать как меру экранировки заряда ядра.

Наряду с рентгеновскими термами с одной дыркой в электронных оболочках могут существовать также и термы с двумя и тремя дырками. Поскольку у внутренних электронов взаимодействие спин—орбита является сильным, то связь дырок друг с другом осуществляется по типу jj -связи.

Ширина рентгеновского терма определяется суммарной вероятностью всех возможных процессов перестройки электронной обо-

лочки атома с заполнением данной дырки. В тяжелых атомах основную роль играют при этом переходы дырки из данной оболочки в более высокую (т. е. обратные переходы электронов), сопровождающиеся испусканием рентгеновского кванта. Вероятности этих «радиационных» переходов, а с ними и соответствующая часть ширины уровня, очень быстро — как Z^4 — растут с увеличением атомного номера, но падают (при заданном Z) в последовательности от более к менее глубоким уровням.

Для более легких атомов (и для более высоких уровней) существенную, или даже преобладающую, роль играют безызлучательные переходы, в которых энергия, освобождающаяся при заполнении дырки более высоким электроном, используется для вырывания из атома другого внутреннего электрона (так называемый эффект Оже); в результате такого процесса атом остается в состоянии с двумя дырками. Вероятности этих процессов и соответствующий им вклад в ширину уровня, в первом приближении (по $1/Z$), не зависят от атомного номера (см. задачу ¹).

Задача

Найти предельный закон зависимости оже-ширины рентгеновских термов от атомного номера при достаточно больших значениях последнего.

Решение. Вероятность оже-перехода пропорциональна квадрату матричного элемента вида

$$M = \iint \psi_1' \psi_2' V \psi_1 \psi_2 dV_1 dV_2,$$

где ψ_1, ψ_2 и ψ_1', ψ_2' — начальные и конечные волновые функции двух участвующих в переходе электронов, а $V = e^2/r_{12}$ — энергия их взаимодействия. При достаточно больших Z можно считать волновые функции внутренних электронов водородоподобными и пренебречь экранировкой поля ядра другими электронами (водородоподобной является также и волновая функция ионизационного электрона в существенной для интеграла M области в глубине атома). Если производить вычисления, выражая все величины в кулоновых единицах (с постоянной $\alpha = Ze^2$; см. § 36), то единственной зависящей от Z величиной в интеграле M будет $V = 1/Zr_{12}$, так что $M \sim 1/Z$. Вероятность перехода, а с нею и оже-ширина уровня ΔE будет пропорциональна Z^{-2} . Возвращаясь к обычным единицам (кулонова единица энергии есть $Z^2 mc^4/\hbar^2$), найдем, что ΔE не зависит от Z .

§ 75. Мультипольные моменты

В классической теории электрические свойства системы характеризуются ее мультипольными моментами различных порядков, выражающимися через заряды и координаты частиц. В квантовой теории определения этих величин сохраняют тот же вид, но должны рассматриваться как операторные.

¹) Для примера укажем, что оже-ширина K -уровня составляет около 1 эВ, а для более высоких уровней достигает значений ~ 10 эВ.