только отличием, что $n_i\hat{J}_i=\Omega$, а не нулю) и приводит к выражению вида (75,2) с

$$Q = Q_0 \frac{3\Omega^2 - J(J+1)}{(2J+3)(J+1)}.$$

Для основного состояния ядра с $\Omega = J$ получим

$$Q = Q_0 \frac{(2J-1)J}{(2J+3)(J+1)}.$$

При возрастании J отношение Q/Q_0 стремится к 1, но довольно медленно.

2. Определить магнитный момент в основном состоянии ядра с $\Omega = 1/2$.

Решение. В этом случае оператор магнитного момента может быть записан с помощью введенного в тексте оператора $\hat{\sigma}$ в виде

$$\hat{\mu} = 2\mu'\hat{\sigma} + g_r\hat{\mathbf{K}}, \qquad \hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{J}} - \hat{\sigma}.$$

Дальнейшее вычисление аналогично произведенному в тексте. Если основному уровню ядра отвечает значение $J = 1/2$ (при этом число $K = J - 1/2 = 0$), то получается $\mu = \mu'$. Если же в основном состоянии $J = 3/2$ (при этом $K = J + 1/2 = 2$), то $\mu = \frac{9}{5}g_r - \frac{3}{5}\mu'$.

3. Определить энергии нескольких первых уровней вращательной структуры основного состояния четно-четного ядра, имеющего симметрию трехосного эллипсоида.

Решение. Основному состоянию четно-четного ядра соответствует наиболее симметричная волновая функция «неподвижного» ядра, т. е. функция с симметрией, отвечающей представлению A группы D_2. Имеется поэтому всего $J/2 + 1$ (при четном J) или $(J-1)/2$ (при нечетном J) различных уровней при заданном значении J. Для $J = 2$ они даются полученной в задачах к § 103 формулой (7), а для $J = 3$ — формулой (8).

§ 120. Изотопическое смещение

Специфические свойства ядра (конечная масса, размеры, спин), отличающие его от неподвижного точечного центра кулонова поля, оказывают определенное влияние на электронные уровни энергии атома.

Одним из таких эффектов является так называемое *изотопическое смещение* уровней — изменение энергии уровня при переходе от одного изотопа данного элемента к другому. Фактически, конечно, представляет интерес не изменение энергии одного уровня, а изменение разности двух уровней, наблюдаемой в виде спектральной линии. По этой причине фактически надо рассматривать не энергию всей электронной оболочки атома в целом, а лишь ту ее часть, которая связана с электроном, участвующим в данном спектральном переходе.

В легких атомах основным источником изотопического смещения является эффект конечности массы ядра. Учет движения ядра приводит к появлению в гамильтониане атома члена

$$\frac{1}{2M}\left(\sum_i \hat{\mathbf{p}}_i\right)^2,$$

где M — масса ядра, а $\mathbf{p}_i$ — импульсы электронов[1]). Поэтому связанное с данным эффектом изотопическое смещение находится как среднее значение

$$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{M_1}-\frac{1}{M_2}\right)\overline{\left(\sum_i \mathbf{p}_i\right)^2}, \tag{120,1}$$

вычисленное по волновой функции данного состояния атома (M_1, M_2 — массы ядер изотопов).

В тяжелых атомах основной вклад в изотопическое смещение связан с протяженностью ядра. Этот эффект фактически заметен лишь для уровней внешнего электрона, находящегося в s-состоянии, поскольку волновая функция s-состояния (в противоположность волновым функциям состояний с $l \neq 0$) не обращается в нуль при $r \to 0$ и потому вероятность нахождения электрона в «объеме ядра» сравнительно велика. Вычислим изотопическое смещение для этого случая[2]).

Пусть $\varphi(r)$ — истинный электростатический потенциал поля ядра, в отличие от потенциала Ze/r кулонова поля точечного заряда Ze. Тогда изменение энергии электрона, по сравнению с ее значением в чисто кулоновом поле Ze/r, дается интегралом

$$\Delta E = -e\int\left(\varphi-\frac{Ze}{r}\right)\psi^2(r)\,dV, \tag{120,2}$$

где $\psi(r)$ — волновая функция электрона (в s-состоянии эта функция сферически-симметрична и вещественна). Хотя интегрирование здесь формально распространено по всему пространству, но фактически стоящая в подынтегральном выражении разность $\varphi - Ze/r$ отлична от нуля лишь внутри объема ядра. С другой стороны, волновая функция s-состояния стремится при $r \to 0$ к постоянному пределу (см. § 32), причем это постоянное значение практически достигается уже вне ядра. Поэтому можно вынести ψ^2 из-под знака интеграла, заменив $\psi(r)$ ее значением при $r = 0$, вычисленным для кулонова поля точечного заряда.

---

[1]) В системе центра инерции атома сумма импульсов ядра и электронов равна нулю: $\mathbf{p}_{\text{яд}} + \sum \mathbf{p}_i = 0$. Поэтому их полная кинетическая энергия

$$\frac{\mathbf{p}_{\text{яд}}^2}{2M}+\frac{1}{2m}\sum_i \mathbf{p}_i^2 = \frac{1}{2M}\left(\sum_i \mathbf{p}_i\right)^2+\frac{1}{2m}\sum \mathbf{p}_i^2.$$

[2]) Излагаемый ниже расчет, не учитывающий релятивистских эффектов в движении электрона вблизи ядра, справедлив при выполнении условия $Ze^2/\hbar c \ll 1$.

Для дальнейшего преобразования интеграла воспользуемся тождеством $\Delta r^2 = 6$ и перепишем (120,2) в виде

$$\Delta E = -\frac{1}{6} e\psi^2(0) \int \left(\varphi - \frac{Ze}{r}\right) \Delta r^2 \cdot dV = \\ = -\frac{1}{6} e\psi^2(0) \int r^2 \Delta \left(\varphi - \frac{Ze}{r}\right) dV$$

(при преобразовании объемного интеграла учтено, что возникающий при этом интеграл по бесконечно удаленной поверхности равен нулю). Но $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$, а $r^2\delta(\mathbf{r}) = 0$ при всех r. Согласно же электростатическому уравнению Пуассона $\Delta\varphi = -4\pi\rho$, где в данном случае ρ — плотность распределения электрического заряда в ядре. В результате получим окончательно

$$\Delta E = \frac{2\pi}{3} \psi^2(0) Ze^2\overline{r^2}, \qquad (120,3)$$

где

$$\overline{r^2} = \frac{1}{Ze} \int \rho r^2 \, dV$$

есть протонный средний квадратичный радиус ядра (при однородном распределении протонов в ядре было бы $\overline{r^2} = 3R^2/5$, где R — геометрический радиус ядра). Изотопическое смещение уровня определяется разностью выражений (120,3) для двух изотопов.

В § 71 была произведена оценка величины $\psi(0)$ и выяснено, что она зависит от (предполагаемого большим) атомного номера как $\sqrt{Z}$. Поэтому величина расщепления (120,3) оказывается пропорциональной R^2Z^2.

§ 121. Сверхтонкая структура атомных уровней

Другим атомным эффектом, связанным со специфическими свойствами ядра, является расщепление атомных уровней энергии в результате взаимодействия электронов со спином ядра — так называемая *сверхтонкая структура* уровней. Ввиду слабости указанного взаимодействия интервалы этой структуры очень малы, в том числе по сравнению с интервалами тонкой структуры. Поэтому сверхтонкая структура должна рассматриваться для каждой из компонент тонкой структуры в отдельности.

Спин ядра будем обозначать в этом параграфе (в соответствии с тем, как это принято в атомной спектроскопии) посредством i, сохранив обозначение J для полного момента электронной оболочки атома. Полный момент атома (вместе с ядром) обозначим как $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{i}$. Каждая компонента сверхтонкой структуры характеризуется определенным значением величины этого момента.