

КОЛЕКТИВНІ СТАНИ І ПЕРЕХОДИ В ЯДРАХ З ОКТУПОЛЬНОЇ ДЕФОРМАЦІЄЮ.

ПОЛЯРИЗОВАНІСТЬ ОСЕ-СИМЕТРИЧНИХ МЕТАЛЕВИХ КЛАСТЕРІВ

В. Ю. Денисов

Інститут ядерних досліджень НАН України

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Вступ

1. Енергія обертальних рівнів парних ядер з квадрупольними і октупольними деформаціями
2. Енергії обертальних рівнів непарних ядер з квадрупольними і октупольними деформаціями
3. Електричні дипольні переходи в ядрах з октупольною деформацією і поляризованим електричним дипольним моментом
4. Електричні дипольні, квадрупольні та октупольні переходи з урахуванням динамічної деформації ядра при обертанні
5. Поляризованість осе-симетричних метричних металевих кластерів
6. Висновки

Вступ

Ядро з квадрупольними і октупольними деформаціями

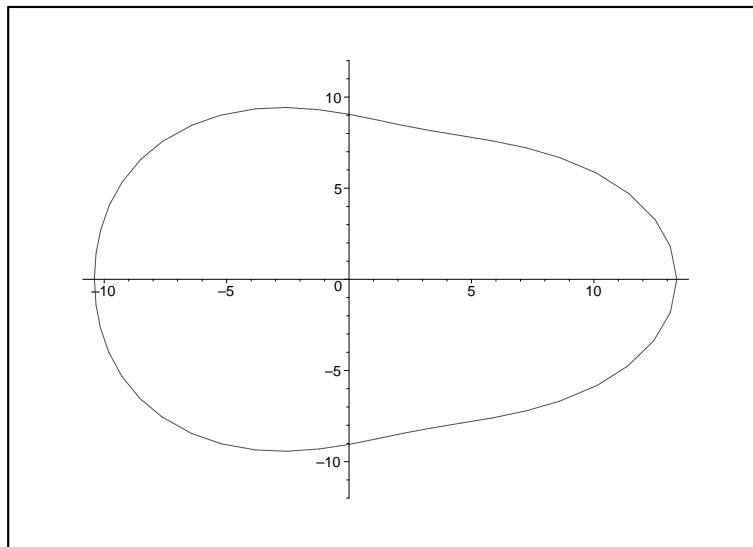
$$R(\theta) = R_0[1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_3 Y_{30}(\theta)]$$

де

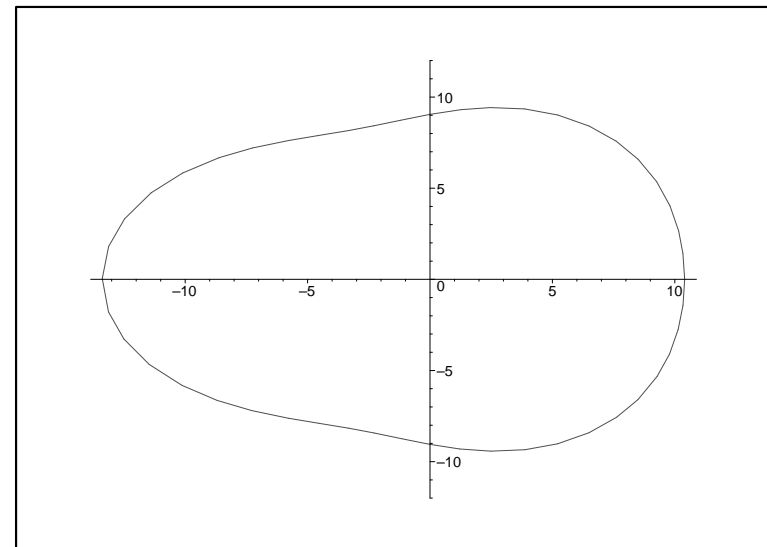
$$Y_{20}(\theta) = (5/(16\pi))^{1/2}[3 \cos(\theta)^2 - 1]$$

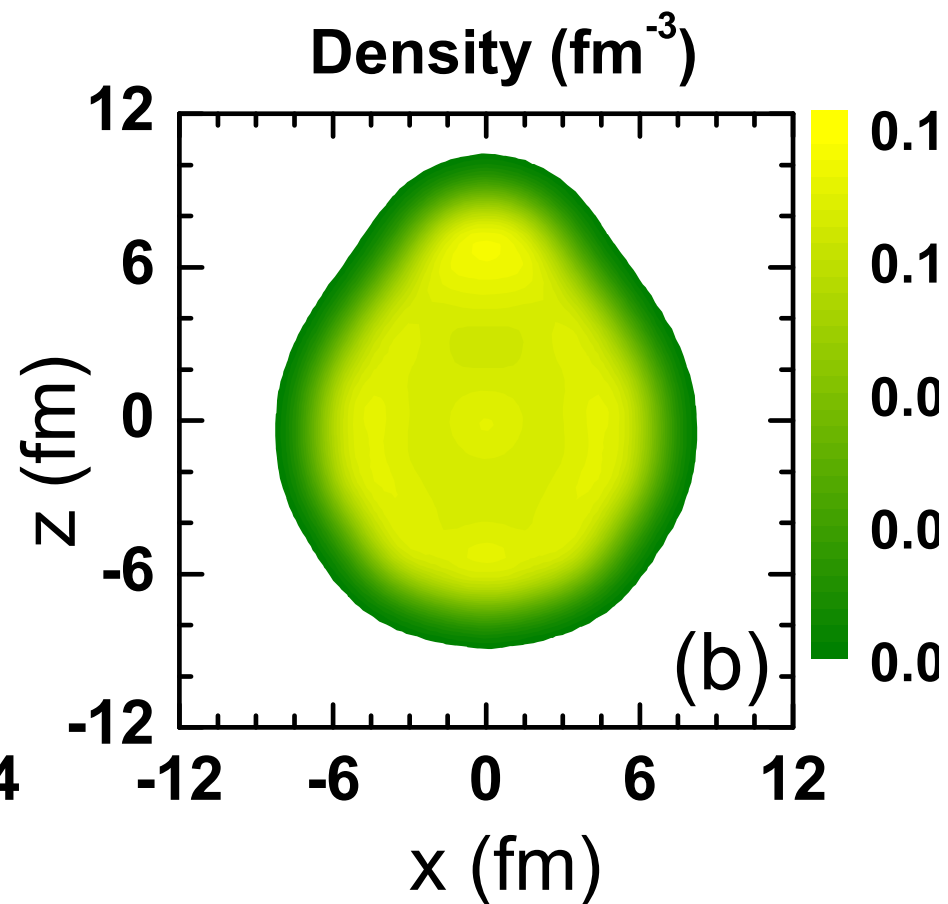
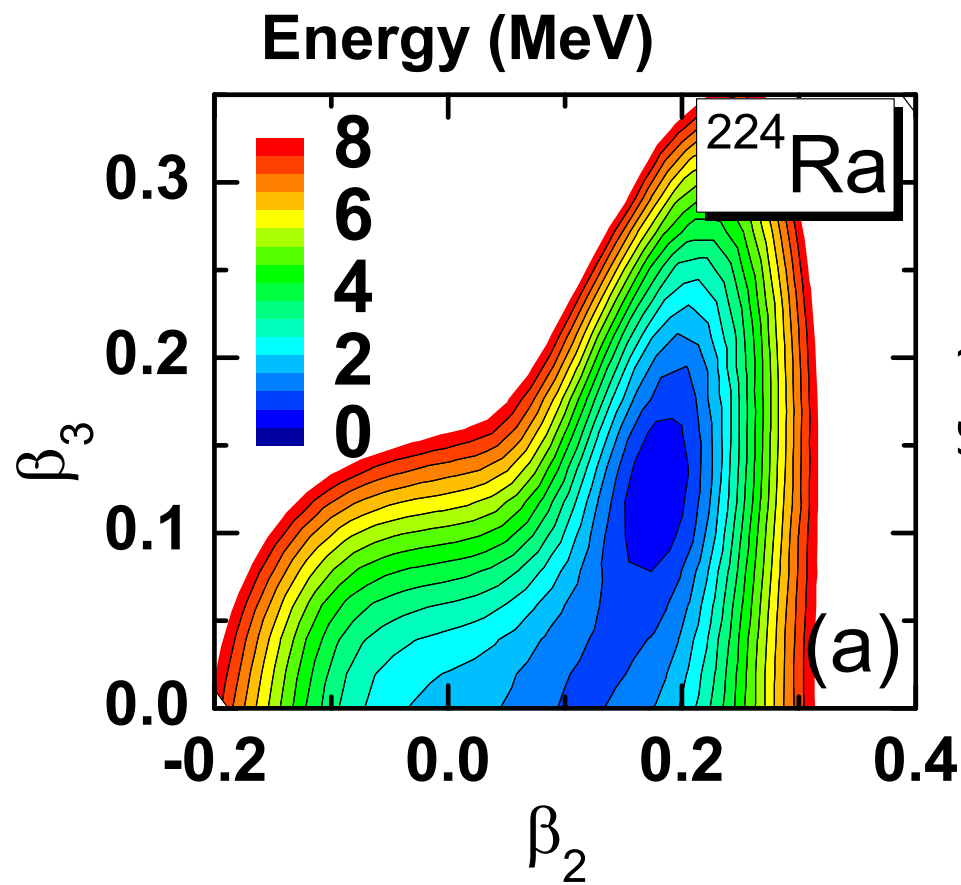
$$Y_{30}(\theta) = (7/(16\pi))^{1/2}[5 \cos(\theta)^2 - 3] \cos(\theta)$$

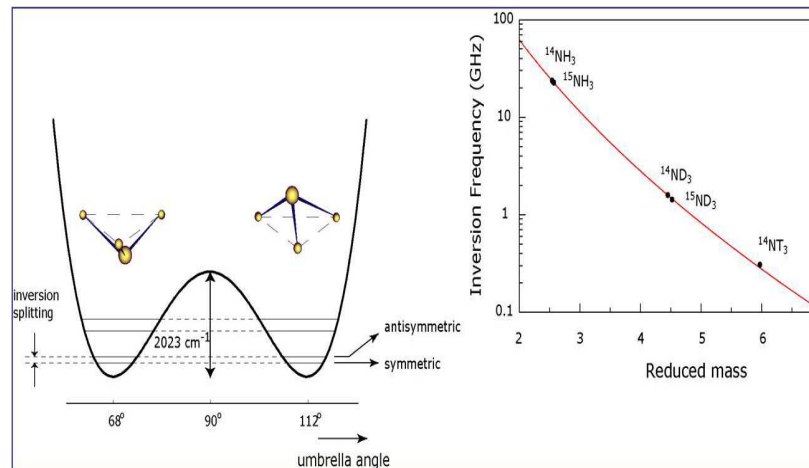
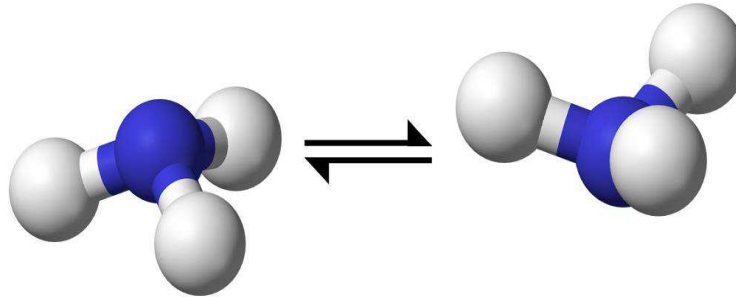
$$R_0 = 10, \beta_2 = 0.3, \beta_3 = 0.2,$$



$$R_0 = 10, \beta_2 = 0.3, \beta_3 = -0.2$$







Амміачний мазер

(Microwave amplification by stimulated emission of radiation MASER

Мікрохвильове посилення стимульованим випромінюванням випромінювання)

1. Енергія обертальних рівнів парних-парних ядер з квадрупольними і октупольними деформаціями

1. Відстань від центру деформованого ядра до його поверхні в напрямку полярного кута θ, ϕ у лабораторній системі координат x, y, z визначається виразом

$$R(\theta, \phi) = R_0 \left(1 + \sum_{\ell\nu} \alpha_{\ell\nu} Y_{\ell\nu}(\theta, \phi) \right),$$

де R_0 є радіус та $\alpha_{\ell\nu}$ це параметри деформації ядра. Введемо власну систему координат, починаючи з центру мас ядра і осей ξ, η, ζ спрямовані вздовж головних осей інерції ядра, орієнтація якого щодо осей x, y, z визначається кутами $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$.

Далі ми припускаємо, що ядра тверді до неосьових деформацій поверхні ядра. Тобто ми розглядаємо тільки осе-симетричні деформації поверхні. В цьому випадку

$$\alpha_{\ell\nu} = \beta_\ell D_{0\nu}^\ell(\theta),$$

де β_ℓ є параметр деформації у власній системі, які мають значення у $-\infty < \beta_\ell < \infty$ для непарних ℓ и $0 \leq \beta_\ell < \infty$ для парних ℓ , $D_{0\nu}^\ell(\theta)$ є функція Вігнера.

Зауважимо, що в розглянутих ядрах дипольна деформація β_1 забезпечує нерухомість центру ваги ядра при зміні деформацій більшої багатоплярності і збігу центрів ваги ядер з протилежними значеннями октупольної деформації $-\beta_3$ і β_3 . В ядрах с квадрупольною і октупольною деформаціями величина дипольної деформації повинна бути дорівнює

$$\beta_1 = -\frac{9}{2} \left(\frac{3}{35\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \beta_2 \beta_3.$$

Величина дипольної деформації має менше значення, ніж квадрупольна і октупольна. Величина деформацій вищої багатоплярності ($\beta_\ell, \ell \geq 4$), Як правило, менше величини квадрупольних і октупольних деформацій. Тому нижче ми припускаємо, що властивості ядра визначаються тільки поверхнями квадрупольних і октупольних деформацій, а дипольні деформації, пов'язані з β_2 і β_3 , і деформації високої багатоплярності ($\beta_\ell, \ell \geq 4$) не впливають на властивості ядра

У випадку осьово-симетричного ядра, момент інерції ядра в обертання навколо осі симетрії ядра ζ дорівнює нулю, а рівні з $K \neq 0$ лежать нескінченно високо (K - проекція спіна на вісь ζ). Так Ми обмежимося розглядом коливально-обертальних стану ядра з $K = 0$. textcolor red Гамільтоніан, що визначає ці стани і враховуючи всі наші припущення, має вигляд

$$\hat{H} = - \sum_{\ell=2,3} \frac{\hbar^2}{2B_\ell} \beta_\ell^{-3} \frac{d}{d\beta_\ell} \beta_\ell^3 \frac{d}{d\beta_\ell} + \frac{\hbar^2 \hat{I}^2}{6(B_2 \beta_2^2 + 2B_3 \beta_3^2)} + V_0(\beta_2, \beta_3)$$

де B_ℓ - параметри маси, \hat{I} - оператор спіна ядра в одиниць \hbar , $V_0(\beta_2, \beta_3)$ - потенційна енергія. Цей Гамільтоніан - це природне узагальнення досліджуваних гамільтоніанів Давидова і Давидова-Чабана, які враховують лише один ступінь свободи: або β_2 або β_3 .

Розв'язання рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\Phi_I(\beta_\ell, \theta) = E_I\Phi_I(\beta_\ell, \theta)$$

є

$$\Phi_I(\beta_\ell, \theta) = (\beta_2\beta_3)^{-\frac{1}{2}}\Psi_I^\pm(\beta_2, \beta_3)|IM0, \pm \rangle .$$

де функція $|IM0, \pm \rangle$ описує обертання осьово-симетричної ядра з проекцією M спина на вісь z та $K = 0$.

У загальному випадку $K = 0, 2, 4, \dots$ ці функції є

$$|IMK, \pm \rangle = \left(\frac{2I+1}{16\pi^2(1+\delta_{K0})} \right)^{1/2} (D_{KM}^I(\theta) \pm (-1)^I D_{-KM}^I(\theta)).$$

Бачимо, що $|IM0, + \rangle \neq 0$ при $I = 0, 2, 4, \dots$ and $|IM0, - \rangle \neq 0$ при $I = 1, 3, 5, \dots$.

Підмінюючи $\Phi_I(\beta_\ell, \theta) = (\beta_2\beta_3)^{-\frac{1}{2}}\Psi_I^\pm(\beta_2, \beta_3)|IM0, \pm \rangle$ отримуємо $\Psi_I^\pm(\beta_2, \beta_3)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2B_2} \frac{d^2}{d\beta_2^2} - \frac{\hbar^2}{2B_3} \frac{d^2}{d\beta_3^2} + \frac{\hbar^2 I(I+1)}{6(B_2\beta_2^2 + 2B_3\beta_3^2)} + V(\beta_2, \beta_3) - E_I \right] \Psi_I^\pm(\beta_2, \beta_3) = 0,$$

де

$$V(\beta_2, \beta_3) = V_0(\beta_2, \beta_3) + \frac{3\hbar^2}{8} \left(\frac{1}{B_2\beta_2^2} + \frac{1}{B_3\beta_3^2} \right).$$

Зручно переходити до полярних координат σ і ε та вводити позначення

$$\beta_2 = \sigma \left(\frac{B}{B_2} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \varepsilon, \quad \beta_3 = \sigma \left(\frac{B}{B_3} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \varepsilon, \quad B = \frac{1}{2}(B_2 + B_3).$$

Полярні координати визначаються в діапазоні $0 \leq \sigma < \infty$, $-\pi/2 \leq \varepsilon \leq \pi/2$. Гамільтоніан

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2B} \left(\frac{d^2}{d\sigma^2} + \sigma^{-1} \frac{d}{d\sigma} - \sigma^{-2} \frac{d^2}{d\varepsilon^2} \right) + \frac{\hbar^2 I(I+1)}{6B\mathcal{F}(\varepsilon)\sigma^2} + V(\sigma, \varepsilon) - E_I^\pm \right] \Psi_I^\pm(\sigma, \varepsilon) = 0, \quad (1)$$

де $\mathcal{F}(\varepsilon) = 1 + (\sin \varepsilon)^2$. Як зазначалося раніше, в ядрах є два мінімуми з октупольною деформацією потенційна енергія, що відповідає двом дзеркально-симетричним октупольні форми. Ці мінімуми потенційної енергії визначаються координати (β_2^0, β_3^0) и $(\beta_2^0, -\beta_3^0)$ or $(\sigma_0, \varepsilon_0)$ и $(\sigma_0, -\varepsilon_0)$. Загалом випадок, потенційне розкладання енергії в степенях зміщення з одного з ці положення рівноваги можуть містити члени $(\sigma - \sigma_0)(\varepsilon \pm \varepsilon_0)$. Для простоти навколо мінімуму $\sigma_0, \pm\varepsilon$ we take

$$V(\sigma, \varepsilon) = V_1(\sigma) + \frac{C_\varepsilon}{2\sigma^2} (\tau_\varepsilon^\pm)^2.$$

де $\tau_\varepsilon^\pm = \varepsilon \mp \varepsilon_0$. Потім змінні відокремлюються і $\Psi_I^\pm(\sigma, \varepsilon)$ поділяються на фактори:

$$\Psi_I^\pm(\sigma, \varepsilon) = (2\sigma)^{-\frac{1}{2}} \psi_I^\pm(\sigma) (\chi_\nu(\tau_\varepsilon^+) \pm \chi_\nu(\tau_\varepsilon^-)),$$

де $\chi_\nu(\tau)$ є коливальна функція, що задовольняє рівняння

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2B} \frac{d^2}{d\varepsilon^2} + \frac{C_\varepsilon}{2} (\varepsilon \mp \varepsilon_0)^2 \right] \chi_\nu(\tau_\varepsilon^\pm) = \hbar\omega_\varepsilon \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \chi_\nu(\tau_\varepsilon^\pm)$$

з частотою $\omega_\varepsilon = (C_\varepsilon/B)^{1/2}$ и $\nu = 0, 1, 2, \dots$. Зверніть увагу, що тунелювання викликає розщеплення коливальні рівні.

Функції $\psi_I^\pm(\sigma)$ задовольняють рівнянню

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2B} \frac{d^2}{d\sigma^2} + W_{I\nu}^\pm(\sigma) - E_I^\pm \right] \psi_I^\pm(\sigma) = 0.$$

де потенційна енергія є

$$\begin{aligned} W_{I\nu}^{\pm}(\sigma) &= \frac{\hbar^2 I(I+1)}{6B\mathcal{F}_0\sigma^2} + \frac{\mathcal{E}_\nu \mp \delta_\nu}{\sigma^2} - \frac{\hbar^2}{8B\sigma^2} + V_1(\sigma) \\ &= \frac{\hbar^2 I(I+1)}{6B\mathcal{F}_0\sigma^2} + \frac{\hbar\omega_\varepsilon\nu \mp \delta_\nu}{\sigma^2} + W_{00}^{\pm}(\sigma) \end{aligned} \quad (2)$$

Величина $2\delta_\nu$ є розщеплення подвійно виродженого ν -го рівня, ає результатом тунельного переходу між ядерними формами з протилежними значеннями октупольної деформації або, як наслідок цього між ε_0 и $-\varepsilon_0$.

Ми пропонуємо

$$W_{00}^{\pm}(\sigma) = \frac{C_\sigma}{2} \left(\frac{\sigma_0^2}{\sigma} - \sigma \right)^2.$$

Такий вибір потенційної енергії з малими відхиленнями від рівноважних значень задається звичайним осциляторним потенціалом і є достатнім реалістичним наближенням для великих відхилень від рівноважного значення. За допомогою цього вибору рівняння потенційної енергії вирішується аналітично.

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{\sigma}{\sigma_{00}}, \quad \sigma_{00}^2 = \frac{\hbar}{(BC_\sigma)^{\frac{1}{2}}}, \quad \mu = \frac{\sigma_{00}}{\sigma_0}, \\ \omega_\sigma &= \left(\frac{C_\sigma}{B} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad E_I^{\pm} = \hbar\omega_\sigma(\mathcal{K}_{I\nu}^{\pm} - \mu^{-2}) \end{aligned}$$

ми зводимо рівняння для $\psi_I^{\pm}(\rho)$ до виду

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{A_{I\nu}^{\pm}}{\rho^2} + \rho^2 - 2\mathcal{K}_{I\nu}^{\pm} \right] \psi_I^{\pm}(\rho) = 0,$$

де

$$A_{I\nu}^{\pm} = \Delta_{\nu}^{\pm} + \frac{I(I+1)}{3}.$$

Тут параметр

$$\Delta_{\nu}^{\pm} = \mu^{-4} + 2(\hbar\omega_{\varepsilon\nu} \mp \delta_{\nu})(\sigma_0^2 \mu^2 \hbar\omega_{\sigma})^{-1},$$

які для різних рівнів паритету матимуть різне значення. Це призведе до того, що відстань між рівнями однакового паритету буде змінюватися відповідно до іншого закону на парних і непарних смугах. Зауважте, що $\Delta_{\nu}^{+} + \Delta_{\nu}^{-} > 0$.

Функції $\psi^{\pm}(\rho)$, яка задовольняє умову нормалізації

$$\int_0^{\infty} [\psi^{\pm}(\rho)]^2 d\rho = 1$$

і граничним умовам $\psi^{\pm}(0) = 0$ и $\psi^{\pm}(\infty) = 0$, take the form

$$\psi^{\pm}(\rho)_{nI\nu} = \left(\frac{2n!}{\sigma_{00}\Gamma(n + s_{I\nu}^{\pm} + \frac{1}{2})} \right)^{\frac{1}{2}} \rho^{s_{I\nu}^{\pm}} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2}\right) L_n^{s_{I\nu}^{\pm} - \frac{1}{2}}(\rho^2).$$

Де $\Gamma(x)$ - гамма функція, $L_n^{\alpha}(z)$ - є поліноми Легера, $n = 0, 1, 2, \dots$

$$s_{I\nu}^{\pm} = \frac{1}{2}(1 + (1 + 4A_{I\nu}^{\pm}))^{\frac{1}{2}}$$

Якщо ми встановимо енергію основного стану ядра на нуль, тоді енергія збуджених рівнів визначається

виразом

$$E_{nI\nu}^{\pm*} = E_{nI\nu}^{\pm} - E_{000}^+ = \hbar\omega_{\sigma} \left\{ 2n + \frac{1}{2} \left[1 + 4\left(\Delta_{\nu}^{\pm} + \frac{I(I+1)}{3}\right) \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left[1 + 4\Delta_0^+ \right]^{\frac{1}{2}} \right\}.$$

Де параметр

$$\Delta_{\nu}^{\pm} = \mu^{-4} + 2(\hbar\omega_{\varepsilon}\nu \mp \delta_{\nu})(\sigma_0^2\mu^2\hbar\omega_{\sigma})^{-1},$$

для ν залежить від м'якості ядра μ , і від величини розщеплення коливальних рівнів $2\delta_{\nu}$, спричиненими тунельними переходами між дзеркально-симетричними формами ядра. Параметр μ визначає м'якість ядра щодо деформаційних вібрації. Значення $\mu = 0$ відповідає жорсткому ротатору. Якщо $\mu \geq 0,3$, тоді це означає, що ядро м'яке і при обертанні воно помітно розтягується під дією відцентрових сил і збільшення моменту інерції ядра призводить до зменшення енергії в порівнянні з енергіями жорсткого ротатора.

Для опису збуджених рівнів основної смуги обертання $n = \nu = 0$. Тоді вираз для енергія збуджених рівнів є спрощений:

$$E_{0I0}^{\pm*} = \hbar\tilde{\omega} \left(\sqrt{d^{\pm} + I(I + 1)} - \sqrt{d^+} \right) \quad (3)$$

а рівні енергії парних і непарних смуг визначаються 3 параметрами $\hbar\tilde{\omega}$, d^+ и d^- , які зв'язані з $\hbar\omega_{\sigma}$ and Δ_0^{\pm} by $\hbar\tilde{\omega} = \hbar\omega_{\sigma}/\sqrt{3\mathcal{F}_0}$ и $d^{\pm} = 3\mathcal{F}_0(1 + 4\Delta_0^{\pm})/4$. Параметри $\hbar\tilde{\omega}$, d^+ и d^- можна легко знайти, див. таблицю.

Параметри $\hbar\tilde{\omega}$ и d^\pm для парно-парных ядер [?].

Ядро	$\hbar\tilde{\omega}$ [кэВ]	d^+	d^-
^{144}Ba	275.7	17.58	36.67
^{146}Ba	240.4	9.516	28.63
^{146}Ce	259.3	4.955	17.33
^{146}Nd	322.2	1.339	6.640
^{148}Nd	263.1	3.165	13.87
^{150}Nd	312.5	65.76	110.3
^{150}Sm	319.0	12.13	26.23
^{220}Rn	118.8	0.053	26.41
^{222}Rn	113.0	0.562	32.02
^{218}Ra	203.9	0.889	5.561
^{220}Ra	198.1	20.84	22.63
^{222}Ra	94.01	2.854	15.20
^{224}Ra	182.8	46.70	56.08
^{226}Ra	210.3	101.1	115.3
^{228}Ra	133.4	29.71	78.25
^{220}Th	207.5	0.879	0.879
^{222}Th	241.0	42.50	50.05
^{224}Th	236.3	77.69	86.27
^{226}Th	249.6	129.3	141.4
^{228}Th	201.5	98.83	125.8

^{218}Ra

	МВВ	Эксп.	Эксп.	МВВ	
			21 <u>4260.0</u>		<u>4216.3</u>
			19 <u>3797.0</u>		<u>3811.1</u>
		<u>3286.0</u>	17 <u>3391.0</u>	<u>3379</u>	<u>3406.5</u>
16 <u>3175.7</u>			15 <u>2968.0</u>	<u>2948</u>	<u>3002.7</u>
14 <u>2768.5</u>	<u>2833</u>	<u>2826.0</u>	13 <u>2528.0</u>	<u>2529</u>	<u>2600.0</u>
12 <u>2361.5</u>	<u>2387</u>	<u>2391.0</u>	11 <u>2110.0</u>	<u>2125</u>	<u>2199.0</u>
10 <u>1954.7</u>	<u>1955</u>	<u>1963.0</u>	9 <u>1695.0</u>	<u>1734</u>	<u>1800.8</u>
8 <u>1548.4</u>	<u>1537</u>	<u>1548.0</u>	7 <u>1342.0</u>	<u>1357</u>	<u>1407.5</u>
6 <u>1143.0</u>	<u>1133</u>	<u>1123.0</u>	5 <u>1039.0</u>	<u>993</u>	<u>1023.6</u>
4 <u>739.6</u>	<u>741</u>	<u>742.0</u>	3 <u>793.0</u>		<u>662.2</u>
2 <u>342.9</u>	<u>364</u>	<u>389.1</u>			1 <u>368.4</u>
0 <u>G.S.</u>					

Експериментальні та розраховані в моделі взаємодіючих бозонів (IBM) і нашій моделі, обертальні
рівні ^{218}Ra .

		^{222}Th	
		Эксп.	Эксп.
26	<u>5004.2</u>	<u>5097.9</u>	25 <u>4882.8</u> <u>4804.9</u>
24	<u>4537.2</u>	<u>4577.9</u>	23 <u>4349.5</u> <u>4341.8</u>
22	<u>4072.7</u>	<u>4077.6</u>	21 <u>3835.5</u> <u>3882.0</u>
20	<u>3611.4</u>	<u>3596.0</u>	19 <u>3340.7</u> <u>3426.4</u>
18	<u>3154.3</u>	<u>3133.5</u>	17 <u>2873.0</u> <u>2976.1</u>
16	<u>2702.5</u>	<u>2687.8</u>	15 <u>2431.9</u> <u>2533.1</u>
14	<u>2258.2</u>	<u>2259.7</u>	13 <u>2015.5</u> <u>2099.9</u>
12	<u>1824.2</u>	<u>1850.7</u>	11 <u>1622.6</u> <u>1680.5</u>
10	<u>1404.9</u>	<u>1461.1</u>	9 <u>1255.3</u> <u>1280.9</u>
8	<u>1007.6</u>	<u>1093.5</u>	7 <u>923.5</u> <u>910.7</u>
6	<u>644.2</u>	<u>750.0</u>	5 <u>651.0</u> <u>585.1</u>
4	<u>334.1</u>	<u>439.8</u>	3 <u>467.0</u> <u>327.3</u>
0G.S. ²	<u>107.2</u>	<u>183.3</u>	1 <u>167.7</u>

Експериментальний та рівні, розраховані в нашій моделі ^{222}Th .

Table

Експериментальний та рівні, розраховані в нашій моделі .

(Значення у keV.)

Nucleus	^{220}Ra [3]				^{224}Ra [4]			
Spin	$I = 2n$		$I = 2n - 1$		$I = 2n$		$I = 2n - 1$	
n	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}
1	178	122	634	79	84	78	216	144
2	409	362	872	261	251	244	290	259
3	687	666	1162	533	479	473	433	446
4	1000	1004	1495	852	755	743	641	686
5	1341	1362	1862	1198	1067	1039	906	960
6	1710	1730	2260	1559	1413	1354	1221	1258
7	2103	2106	2687	1930		1680	1569	1572
8	2520	2486		2306		2015		1897
9	2959	2869		2687		2355		2230

Nucleus	^{226}Th [6]				^{228}Th [6]			
Spin	$I = 2n$		$I = 2n - 1$		$I = 2n$		$I = 2n - 1$	
n	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}
1	72	65	230	150	58	60	328	274
2	227	212	308	253	187	193	396	362
3	448	429	451	429	378	388	519	512
4	722	703	658	668	623	630	696	713
5	1040	1023	923	958	912	909	921	957
6	1395	1377	1238	1289	1239	1213	1190	1232
7	1781	1759	1596	1650	1600	1538	1497	1532
8	2196	2162	1989	2036		1877		1850
9	2635	2580	2413	2441		2227		2184

Обертальні енергетичні рівні непарних ядер с квадрупольні та октупольні деформації .

1. У випадку осьово-симетричного непарного ядра важливу роль відіграє взаємодія Коріюліса, що описує взаємодію неспареного нуклона з деформованим парно-парним ядром

$$\hat{H}_c = -\frac{\hbar^2(\hat{I}_+\hat{j}_- + \hat{I}_-\hat{j}_+)}{6(B_2\beta_2^2 + 2B_3\beta_3^2)},$$

де B_ℓ є масовий параметр, \hat{I} и \hat{j} є операторами спінів ядра та непарного нуклона в одиницях \hbar , відповідно,

$$\hat{I}_\pm = \hat{I}_\xi \pm \hat{I}_\eta, \quad \hat{j}_\pm = \hat{j}_\xi \pm \hat{j}_\eta.$$

Ми обмежуємося розглядом коливальних ядерних станів, що обертаються, які визначаються гамільтоніалом

$$\hat{H} = -\sum_{\ell=2,3} \frac{\hbar^2}{2B_\ell} \beta_\ell^{-3} \frac{d}{d\beta_\ell} \beta_\ell^3 \frac{d}{d\beta_\ell} + \frac{\hbar^2(\hat{I}^2 - \hat{I}_\zeta^2)}{6(B_2\beta_2^2 + 2B_3\beta_3^2)} + \hat{H}_c + V_0(\beta_2, \beta_3),$$

де $V_0(\beta_2, \beta_3)$ є потенційна енергія .

Розв'язання рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\Phi_I(\beta_\ell, \theta) = E_I\Phi_I(\beta_\ell, \theta)$$

є

$$\Phi_I(\beta_\ell, \theta) = (\beta_2\beta_3)^{-\frac{1}{2}}\Psi_I^\pm(\beta_2, \beta_3)|IM0, \pm \rangle .$$

де $\Psi_I^\pm(\beta_2, \beta_3) = \pm\Psi_I^\pm(\beta_2, -\beta_3)$ є функція, яка описує кор, M и K - проєкції спіна кора на вісь z і ζ відповідно,

$$|IMK, \pm \rangle = \left(\frac{2I+1}{16\pi^2(1+\delta_{K0})} \right)^{1/2} (D_{KM}^I(\theta)\chi_K \pm (-1)^{I+K} D_{-KM}^I(\theta)\chi_{-K}),$$

χ_K - хвильова функція неспареного нуклона з проєкцією загального кутового моменту K на вісь симетрії ядра ζ .

Форма хвильової функції обумовлена властивостями симетрії ядра. Форму кора ядра можна розглядати як парно-парне ядро з квадрупольною та октупольною деформацією, парність якого визначається симетрією щодо заміщення $\beta_3 \rightarrow -\beta_3$, таким чином функція Ψ^+ описує парний стан ядра, тоді як Ψ^- - непарний. Тоді парність станів цілого ядра дорівнює добутку парності ядра Ψ^+ або Ψ^- і парності стану χ_K непарного нуклона. Індекс \pm повної функції Φ^\pm означає лише симетрію функцій щодо перетворення $\beta_3 \rightarrow -\beta_3$, а не паритет π . Припускаємо, що зі збільшенням кутового моменту квантовий стан неспареного нуклона не змінюється.

Рівняння для $\Psi_I^\pm(\beta_2, \beta_3)$ має вигляд

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2B_2} \frac{d^2}{d\beta_2^2} - \frac{\hbar^2}{2B_3} \frac{d^2}{d\beta_3^2} + \frac{\hbar^2 f(I, K, \pm)}{6(B_2\beta_2^2 + 2B_3\beta_3^2)} + V(\beta_2, \beta_3) - E_I \right] \Psi_I^\pm(\beta_2, \beta_3) = 0,$$

де

$$V(\beta_2, \beta_3) = V_0(\beta_2, \beta_3) + \frac{3\hbar^2}{8} \left(\frac{1}{B_2\beta_2^2} + \frac{1}{B_3\beta_3^2} \right), f(I, K, \pm) = I(I+1) - K^2 \pm \delta_{K,1/2} a (-1)^{I+1/2},$$

$a = -\langle \chi_K | \hat{j}_+ | \chi_{-K} \rangle$ - параметр розв'язання, $\delta_{K,1/2} = 1$ for $K = \frac{1}{2}$ и $\delta_{K,1/2} = 0$ for $K \neq \frac{1}{2}$.

Зверніть увагу, що рівняння, що описує парні непарні ядра, відрізняється від відповідного рівняння, що описує парно-парні ядра, замінивши $I(I+1)$ на функцію $f(i, k, \pm)$. Потім, використовуючи результати для парно-парних ядер, отримуємо такий вираз для енергії збуджених станів ядра

$$E_{nI^{\pi}K\nu}^{\pm*} = E_{nI^{\pi^0}K\nu}^{\pm} - E_{0I_0^{\pi^0}K_00} = \hbar\omega_{\sigma} \left\{ 2n + \frac{1}{2} \left[1 + 4 \left(\Delta_{\nu}^{\pm} + \frac{f(I, K, \pm)}{3} \right) \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left[1 + 4 \left(\Delta_0^{\pi^0} + \frac{f(I_0, K, \pi^0)}{3} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

де π^0 є парність стану.

Використовуючи ті самі позначення, що і у випадку парно-парних ядер, ми спростуємо рівняння для основної смуги $n = \nu = 0$

$$E_{0I0}^{\pm*} = \hbar\tilde{\omega} \left(\sqrt{d^{\pm} + f(I, K, \pm)} - \sqrt{d^+ + f(I_0, K, +)} \right), \quad (4)$$

де

$$f(I, K, \pm) = I(I + 1) - K^2 \pm \delta_{K,1/2} a (-1)^{I+\frac{1}{2}}.$$

З цих рівнянь випливає, що для $K \neq \frac{1}{2}$ основні парні та непарні смуги визначаються трьома параметрами $\hbar\tilde{\omega}$, d^{\pm} і для $K = \frac{1}{2}$ - чотири параметри, тому для ядер зі спіном неспареного нуклона $\frac{1}{2}$ вам потрібно знати параметр розв'язання a .

Таблиця Експериментальні та теоретичні значення рівнів енергії.

Основні стани: $^{219}\text{Ac } \frac{9}{2}^-$, $^{223}\text{Th } \frac{5}{2}^+$. (Значення енергій в keV.)

Ядро	^{219}Ac				^{223}Th			
	<i>even</i>		<i>odd</i>		<i>even</i>		<i>odd</i>	
<i>I</i>	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}
5/2					0	0		38
7/2					51	57		95
9/2		107	0	0	119	130	180	168
11/2		197	341	274	212	218	243	255
13/2	577	474	355	367	320	321	324	357
15/2		569	658	652	429	437	412	472
17/2	867	854	714	748	569	566	548	601
19/2	965	950	1017	1037	706	707	657	742
21/2	1183	1239	1116	1134	858	860	838	894
23/2	1301	1336	1414	1425	1021	1024	1179	1057
25/2	1547	1628	1551	1527	1185	1198	1313	1230
27/2	1696	1725	1813	1816	1370	1381	1558	1412
29/2	1959	2019	2023	1914	1551	1573	1658	1603
31/2	2149	2117	2245	2209	1756	1772	1701	1802
33/2					1951	1979		

Таблиця Експериментальні та теоретичні значення рівнів енергії.

Основні стани: $^{225}\text{Th } \frac{3}{2}^+$ (Значення енергій в keV.)

Ядро	^{225}Th			
	<i>even</i>		<i>odd</i>	
I	E_I^{exp}	E_I^{theor}	E_I^{exp}	E_I^{theor}
3/2	0	0		8
5/2	31	35		43
7/2	68	83		91
9/2	135	144		152
11/2	187	219	254	227
13/2	303	307	326	315
15/2	370	408	433	416
17/2	530	521	520	529
19/2	615	647	668	655
21/2	807	784	769	792
23/2	911	933	957	941
25/2	1127	1093	1072	1101
27/2	1250	1264	1291	1272
29/2	1485	1445	1426	1452
31/2	1631	1637	1658	1644
33/2	1870	1838	1824	1845
35/2	2047	2048	2057	2056
37/2		2268	2259	2275
39/2	2494	2495		

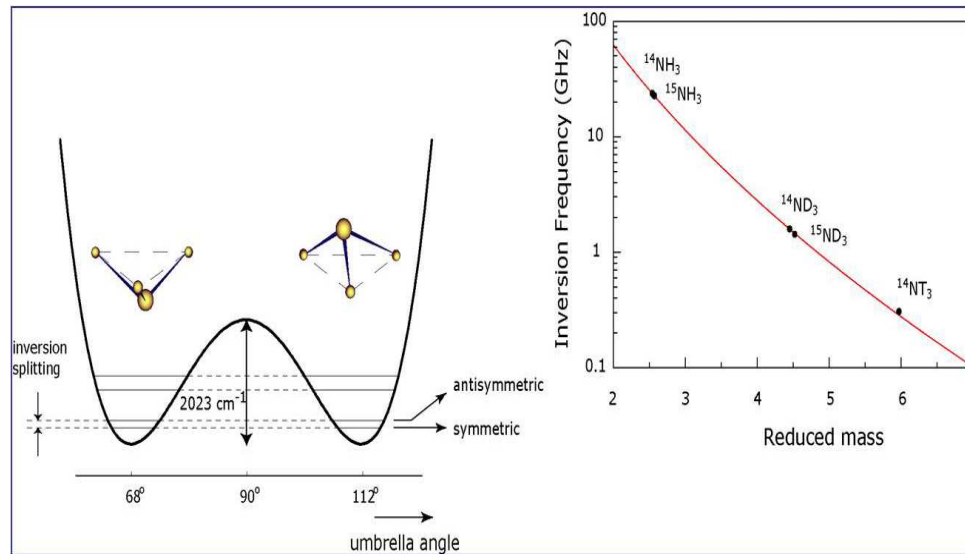
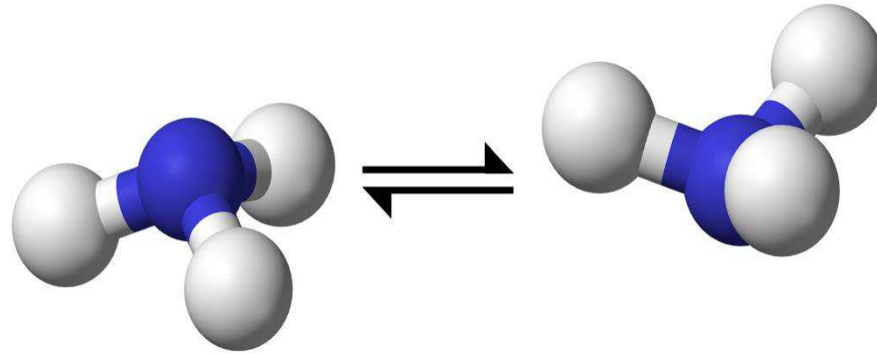
3. Електричні дипольні переходи в октупольних ядрах деформація і поляризаційний електричний дипольний момент

1. В ядрах з октупольної деформацією або з будь-якою іншою деформацією, описуваної непарним поліномом Лежандра, дзеркальна симетрія порушується щодо площини, перпендикулярної осі симетрії ядра. Проте дзеркальна симетрія відновлюється в результаті квантово-механічних тунельних переходів між формами сердечників з протилежними значеннями октупольної деформації. Через тунельний перехід між формами ядра з протилежними значеннями октупольної деформації хвильова функція ядра повинна бути записана у вигляді $\varphi(\beta_3)$ і $\varphi(-\beta_3)$, де відповідні форми S і S' , з протилежними значеннями октупольної деформації. З дзеркальної симетрії форм s і S' є

$$|\pm \rangle = 2^{-1/2} [\varphi(\beta_3) \pm \varphi(-\beta_3)].$$

Основний стан парно-парного ядра і парної обертальної смуги будується на хвильовій функції $|+\rangle$, а перший збуджений непарний стан і непарна смуга будуються на хвильовій функції $|-\rangle$. Електричні дипольні переходи, що спостерігаються в експерименті, відбуваються між обертальними рівнями, побудованими на станах $|+\rangle$ і $|-\rangle$. Ці дипольні переходи пов'язані з ПЕДМ

$$\begin{aligned} D &= \sqrt{\frac{4}{3\pi}} \left| \langle + | \frac{1}{2}(1 - \tau_z) r Y_{10}(\theta, \phi) | - \rangle \right| = \\ &= \sqrt{\frac{4}{3\pi}} \left| \langle - | \frac{1}{2}(1 - \tau_z) r Y_{10}(\theta, \phi) | + \rangle \right|, \end{aligned}$$



ПЕДМ можна розрахувати в ядрі з формою s або S'

$$\begin{aligned} D &= \sqrt{\frac{4}{3\pi}} \left| \langle \varphi(\beta_3) \left| \frac{1}{2}(1 - \tau_z) r Y_{10}(\theta\phi) \right| \varphi(-\beta_3) \rangle \right| = \sqrt{\frac{4}{3\pi}} \int_S dV \rho_P r Y_{10}(\theta\phi) \\ &= \sqrt{\frac{4}{3\pi}} \left| \langle \varphi(\beta_3) \left| \frac{1}{2}(1 - \tau_z) r Y_{10}(\theta\phi) \right| \varphi(-\beta_3) \rangle \right| = \sqrt{\frac{4}{3\pi}} \int_{S'} dV \rho_P r Y_{10}(\theta\phi). \end{aligned}$$

Тут $\tau_z = 1$ для протонів і $\tau_z = -1$ для нейтронів, ρ_P - густина протонів в ядрі.

Представлення ПЕДМ у формі інтеграла за обсягом ядра з формою S або S' дозволить нам використовувати макроскопічну модель, так як густина протонів можна замінити макроскопічною величиною. Замінімо мікроскопічну густина на макроскопічну величину і для визначеності виконаємо розрахунок ПЕДМ на ядрі з формою s , тоді

$$D_{macro} = e \int dV r \cos(\theta) \rho_P = \sqrt{\frac{4}{3\pi}} \int_S dV \rho_P r Y_{10}(\theta, \phi).$$

Інтеграл з точністю до коефіцієнта визначає положення центру ваги протонів R_P .

Вираз для ПЕДМ можна представити у вигляді явно залежного від положення центру ваги ядра R_A з формою S

$$D_{macro} = Z e R_P = Z e (R_P - R_A + R_A),$$

де Z - число протонів в ядрі, e - заряд протона. Це співвідношення явно демонструє залежність ПЕДМ від положення центру ваги ядра з формою s , тому що перший член не залежить від положення центру ваги, а другий член-внесок, пов'язаний з Положенням центру мас в ПЕДМ.

Вимагаємо виконання додаткової умови на збіг положення центрів мас дзеркально-симетричних форм S (з β_3) і S' (з $-\beta_3$) з площиною дзеркальної симетрії форм S і S' , тобто

$$R_A^S = R_A^{S'} = R_A = 0.$$

Ця умова має квантово-механічну природу. Вона виникає з вимоги нерухомості центру ваги при тунельному переході між дзеркально-симетричними формами S і S' . Завдяки цьому квантово-механічному тунельному переходу в ядрах з октупольною деформацією відновлюється дзеркальна симетрія, порушення якої призвело до порушення парності в цих ядрах. Також за тунельного переходу розрізняються Δ_ν^+ і Δ_ν^- і парна і непарна ротаційні смуги мають різну поведінку, що узгоджується з експериментом.

Умова $R_A = 0$ пов'язує величину дипольної деформації з деформаціями більш високої мультипольності

$$\beta_1 = -\frac{3}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sum_{\ell=2}^{\infty} \frac{(\ell+1)}{\sqrt{(2\ell+1)(2\ell+3)}} \beta_\ell \beta_{\ell+1}.$$

Раніше ми використовували тільки перший член від цієї суми.

Підкреслимо, що тільки при обліку додаткової умови ПЕДМ можна представити у вигляді

$$D_{macro} = Z e (R_P - R_A).$$

Ми припускаємо, що радіус протонної поверхні $R_{macro}^P(\theta)$ пропорційний радіусу нейтронної поверхні $R_{macro}^N(\theta)$ і радіусу ядра $r_{macro}(\theta)$, тобто

$$\frac{R_{macro}^P(\theta)}{R_{0macro}^P} = \frac{R_{macro}^N(\theta)}{R_{0macro}^N} = \frac{R_{macro}(\theta)}{R_{0macro}} = 1 + \sum_{\ell} \beta_\ell^0 Y_{\ell 0}(\theta).$$

Тут з індексом 0 позначені радіуси відповідної сферичної поверхні.

$$D = D_v + D_s,$$

де

$$D_v \approx e \int dV r \cos(\theta) [\rho_{0p} + \delta\rho_p] = e \int dV r \cos(\theta) \delta\rho_p = 2\pi e \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \cos(\theta) \int_0^{R_{0p}f(\theta)} dr r^3 \delta\rho_p,$$

$$D_s \approx e \int dS R_p(\theta) \cos(\theta) \rho_{0p} \delta R_p(\theta) = \frac{3Ze}{2} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \cos(\theta) \left[1 + \left(\frac{f'(\theta)}{f(\theta)} \right)^2 \right]^{1/2} f^3(\theta) \delta R_p(\theta).$$

Граничні умови

$$\delta R_p(\theta) = -\frac{N}{A} \frac{3eR_0}{8QA^{1/3}} \left[\phi(R_p(\theta)) - \frac{\int dS \phi(R_p(\theta))}{\int dS} \right] = -\frac{N}{A} \frac{3eR_0}{8QA^{1/3}} \left[\varphi(R_p(\theta)) - \frac{\int dS \varphi(R_p(\theta))}{\int dS} \right],$$

де $\phi = \varphi - \bar{\varphi}$, $\bar{\varphi} = \frac{\int dV \varphi}{\int dV}$.

Функціонал густини енергії

$$\mathcal{E} \approx -a_v \rho + J \frac{(\rho_n - \rho_p)^2}{\rho} + e\rho_p \varphi = -a_v \rho + J \frac{(\rho - 2\rho_p)^2}{\rho} + e\rho_p \varphi,$$

Варіації функціоналу по $\delta\rho_p$ з додатковою умовою збереження числа протонів

$$\delta E = \delta \int dV [\mathcal{E} - \lambda \rho_p] = \int dV [-4J(\rho - 2\rho_p)/\rho + e\varphi - (a_v + \lambda)] \delta\rho_p.$$

Варіаційне рівняння

$$8J\rho_p = -\rho(e\varphi - 4J - \lambda'),$$

де $\lambda' = a_v + \lambda$. Рішення рівняння

$$\rho_{0p} = \rho \left(\frac{1}{2} + \frac{\lambda'}{8J} - \frac{e\bar{\varphi}}{8J} \right) = (\rho_{0p} + \rho_{0n}) \left(\frac{1}{2} + \frac{\lambda'}{8J} - \frac{e\bar{\varphi}}{8J} \right),$$

$$\delta\rho_p = \frac{-e\rho(\varphi - \bar{\varphi})}{8J} = \frac{-e(\rho_{0p} + \rho_{0n})(\varphi - \bar{\varphi})}{8J} = \frac{-3eA(\varphi - \bar{\varphi})}{32\pi R_{0p}^3 J} = \frac{-3eA\phi}{32\pi R_{0p}^3 J}.$$

Використовуючи електростатичне рівняння Пуассона для протонів

$$\nabla^2\varphi = 4\pi e\rho_p.$$

і варіаційне рівняння можна виразити макроскопічний ПЕДМ у вигляді

$$D_v \approx \frac{-3e^2 A}{16JR_{0p}^3} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \cos(\theta) \int_0^{R_{0p}f(\theta)} dr r^3 \phi(\mathbf{r}) = \frac{-3e^2 A}{16JR_{0p}^3} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \cos(\theta) \int_0^{R_{0p}f(\theta)} dr r^3 \varphi(\mathbf{r}).$$

Використовуючи $\frac{NZ}{A} \approx \frac{A}{4}$

$$D_s \approx -\frac{9Ae^2 R_0}{64QA^{1/3}} \int_0^\pi d\theta g(\theta) \cos(\theta) f(\theta) \left[\varphi(R_p(\theta)) - \frac{\int_0^\pi d\theta' g(\theta') \varphi(R_p(\theta'))}{\int_0^\pi d\theta' g(\theta')} \right],$$

де $g(\theta) = \sin(\theta) f^2(\theta) \left[1 + (f'(\theta)/f(\theta))^2 \right]^{1/2}$.

Рішення для потенціалу і густини є

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi^0(\mathbf{r}) + \varphi^1(\mathbf{r}) + \varphi^2(\mathbf{r}) + \dots,$$

$$\delta\rho_p(\mathbf{r}) = \delta\rho_p^0(\mathbf{r}) + \delta\rho_p^1(\mathbf{r}) + \delta\rho_p^2(\mathbf{r}) + \dots,$$

$$\delta\rho_p^k(\mathbf{r}) = \frac{-e\rho\phi^k(\mathbf{r})}{8J} = \frac{-3eA\phi^k(\mathbf{r})}{32\pi R_{0p}^3 J}, \quad \text{for } k \geq 0,$$

$$\varphi^k(\mathbf{r}) = e \int dV \frac{\delta \rho_p^{k-1}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad \text{for } k \geq 1,$$

$$\begin{aligned} \varphi^0(\mathbf{r}) &= e \int dV \frac{\rho_{0p}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{eZ}{R_{0p}} \int dV \frac{3}{4\pi R_{0p}^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &= \frac{eZ}{R_{0p}} \sum_{\ell} \frac{6\pi Y_{\ell 0}(\theta)}{(2\ell + 1)} \int_0^{\pi} d\theta' \sin(\theta') Y_{\ell 0}^*(\theta') \left[\int_0^r dr' \frac{(r')^{\ell+2}}{r^{\ell+1} (R_{0p})^2} + \int_r^{R_{0p} f(\theta')} dr' \frac{(r')^{\ell}}{(r')^{\ell-1} (R_{0p})^2} \right], \end{aligned}$$

де $\phi^k(\mathbf{r}) = \varphi^k(\mathbf{r}) - \overline{\varphi^k(\mathbf{r})}$

Макроскопічний ПЕДМ

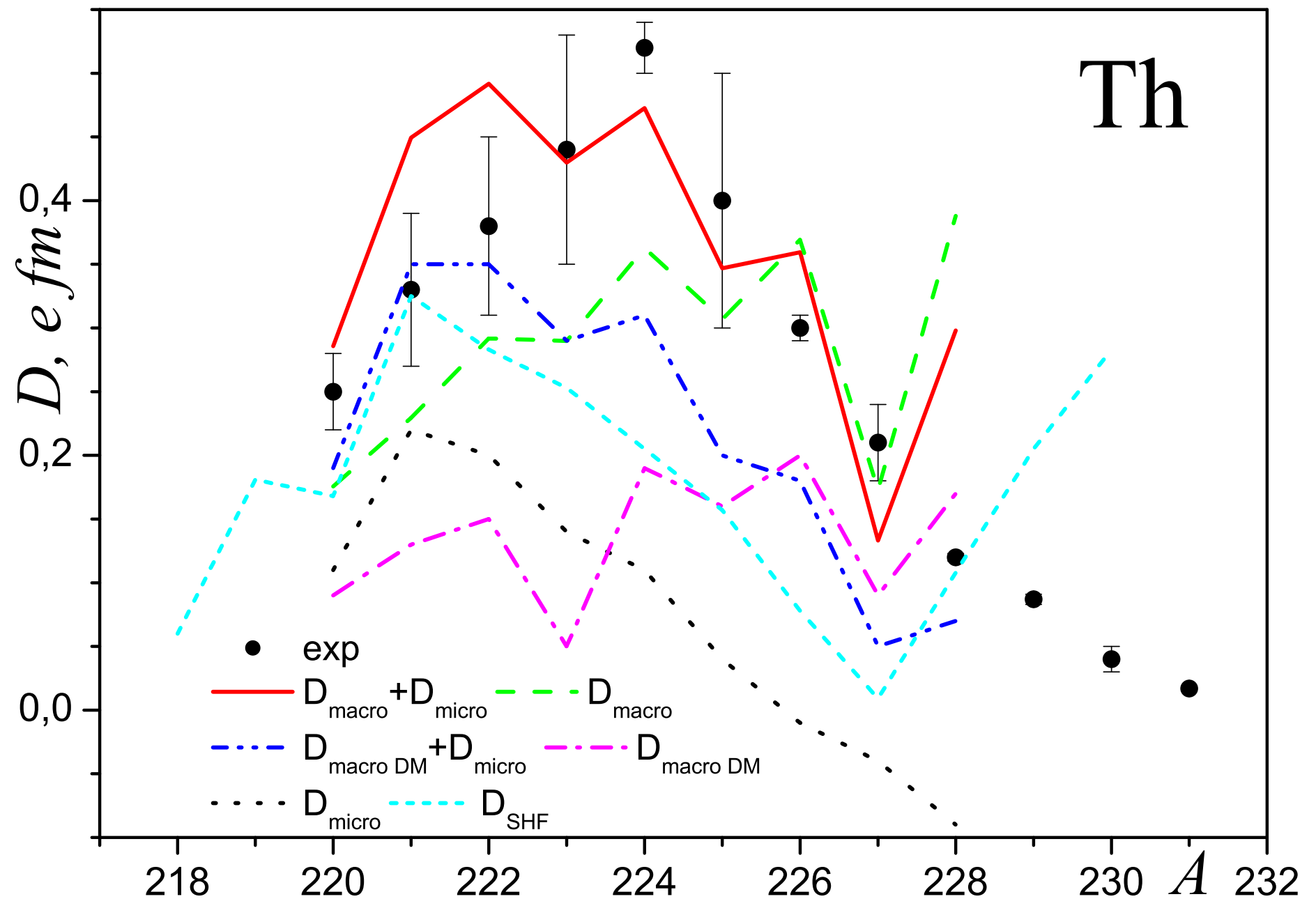
$$D_{macro} = D_{macro}^{vol} + D_{macro}^{surf} = \frac{AZe^3}{32\pi} \left(\frac{1}{J} + \frac{15}{8QA^{1/3}} \right) \sum_{\ell=2}^{\infty} \frac{12(\ell-1)(\ell+1)(8\ell+9)}{5(2\ell+1)^{3/2}(2\ell+3)^{3/2}} \beta_{\ell}^0 \beta_{\ell+1}^0.$$

Тут J - енергія симетрії ядра (ізовекторна об'ємна жорсткість), а Q - ефективна жорсткість нейтронної шкіри в енергетичних одиницях. Доданок з J в ПЕДМ пов'язано з протонно-нейтронним перерозподілом в обсязі ядра D_{macro}^{vol} , а доданок з Q - з протонно-нейтронним перерозподілом густини на поверхні ядра і обумовлено зміною товщини нейтронної шкіри d_{macro}^{surf} .

Дипольний момент має два вклади - макроскопічний і оболонковий (мікроскопічний).

$$D_{tot} = D_{macro} + D_{micro}.$$

Th



Розглянемо неаксіальне ядро, форма якого описується співвідношенням

$$R(\theta, \phi) = R_0 \left[1 + \sum_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \beta_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \right],$$

де R_0 - радіус, а $\beta_{\ell m}$ - параметри деформації ядра, які задовольняють вимогам $\beta_{\ell-m} = (-1)^m \beta_{\ell m}$.

Вираз для ПЕДМ в неаксіальних ядрах

$$\begin{aligned} D_{\mu} &= D_{\mu}^{(v)} + D_{\mu}^{(s)} = \sum_{\ell \geq 2} d_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \langle \ell m (\ell + 1) \mu - m | 1 \mu \rangle \beta_{\ell m} \beta_{\ell+1 \mu-m} = \\ &= \frac{3e^3 AZ}{40\pi} \left(\frac{1}{J} + \frac{15}{8QA^{1/3}} \right) \frac{1}{\sqrt{(1+\mu)!(1-\mu)!}} \times \\ &\times \sum_{\ell \geq 2} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (-1)^m (8\ell + 9)(\ell - 1) \sqrt{\frac{(l+1-\mu+m)!(l+1+\mu-m)!}{(2\ell+1)^3(2\ell+3)^3(l+m)!(l-m)!}} \beta_{\ell m} \beta_{\ell+1 \mu-m}. \end{aligned}$$

Тут

$$d_{\ell} = (-1)^{\ell} \frac{\sqrt{3}e^3 AZ}{40\pi} \left(\frac{1}{J} + \frac{15}{8QA^{1/3}} \right) \frac{(8\ell + 9)(\ell - 1)(\ell + 1)^{1/2}}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}.$$

4. Електричні дипольні, квадрупольні та октупольні переходи з урахуванням динамічної деформації ядра при обертанні

1. Наведена ймовірність електричного переходу мультипольності ℓ зі стану зі спіном I_i в стан зі спіном I_f визначається виразом

$$B(E\ell, i \rightarrow f) = \frac{1}{2I_i + 1} \sum_{M_i M_f \mu} | \langle \Phi_{I_f}^{\pm}(\beta_\ell, \theta) | \mathcal{M}_\mu(E\ell) | \Phi_{I_i}^{\pm}(\beta_\ell, \theta) \rangle |^2.$$

Тут $\mathcal{M}_\mu(E\ell)$ - електричний мультипольний оператор, який має вигляд

$$\mathcal{M}_\mu(E\ell) = e \sum_{k=1}^Z r_k^\ell Y_{\ell\mu}(\theta_k, \phi_k),$$

де e - електричний заряд протона, r_k, θ_k, ϕ_k - сферичні координати k -го протона щодо лабораторної системи координат. Для квадрупольних і октупольних електричних переходів в аксіально симетричному ядрі в макроскопічному наближенні мультипольний оператор має вигляд відповідно

$$\mathcal{M}_\mu(E2) = \left(\frac{5}{16\pi} \right)^{1/2} Q_2 \frac{\beta_2}{\beta_2^0} D_{0\mu}^2(\theta), \quad \mathcal{M}_\mu(E3) = \left(\frac{7}{16\pi} \right)^{1/2} Q_3 \frac{\beta_3}{\beta_3^0} D_{0\mu}^3(\theta).$$

Тут і нижче ми розрізняємо статичні (додатковий індекс 0) і динамічні деформації,

$$Q_2 = \frac{3}{(5\pi)^{1/2}} Z e R_0^2 \beta_2^0, \quad Q_3 = \frac{3}{(7\pi)^{1/2}} Z e R_0^3 \beta_3^0.$$

квадрупольний і октупольний момент ядра відповідно.

Переходячи в циліндричні координати перепишемо оператори квадрупольних і октупольних переходів у вигляді

$$\mathcal{M}_\mu(E2) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} Q_2 \mu \rho \frac{\cos\varepsilon}{\cos\varepsilon_0} D_{0\mu}^2(\theta),$$

$$\mathcal{M}_\mu(E3) = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} Q_3 \mu \rho \frac{\sin\varepsilon}{\sin\varepsilon_0} D_{0\mu}^3(\theta).$$

Для наведених ймовірностей $E2$ - і $E3$ - переходів між рівнями $|nI_i0\rangle$ і $|nI_f0\rangle$ однаковою парності знаходимо відповідно вирази

$$B(E2, I \rightarrow I + 2) = B_a(E2, I \rightarrow I + 2) S_{I, I+2}^2(E2) \exp(-\hbar/2(BC_\varepsilon)^{1/2}),$$

$$B(E3, I \rightarrow I + 3) = B_a(E3, I \rightarrow I + 3) S_{I, I+3}^2(E3) \exp(-\hbar/2(BC_\varepsilon)^{1/2}).$$

тут $S_{I, I+\ell}(E\ell)$ - фактор, обумовлений деформаційними ρ - збудженнями ядра

$$S_{I_i, I_f}(E2) = \frac{\mu \Gamma(1 + (s_{I_i\nu}^\pm + s_{I_f\nu}^\pm)/2) \Gamma(n + (s_{I_i\nu}^\pm - s_{I_f\nu}^\pm)/2 - 1/2)}{(n! \Gamma(s_{I_f\nu}^\pm + 1/2) \Gamma(n + s_{I_i\nu}^\pm + 1/2))^{1/2} \Gamma((s_{I_i\nu}^\pm - s_{I_f\nu}^\pm)/2 - 1/2)},$$

$$S_{I_i, I_f}(E3) = \frac{\mu \Gamma(1 + (s_{I_i\nu}^\pm + s_{I_f\nu}^\mp)/2) \Gamma(n + (s_{I_i\nu}^\pm - s_{I_f\nu}^\mp)/2 - 1/2)}{(n! \Gamma(s_{I_f\nu}^\mp + 1/2) \Gamma(n + s_{I_i\nu}^\pm + 1/2))^{1/2} \Gamma((s_{I_i\nu}^\pm - s_{I_f\nu}^\mp)/2 - 1/2)}$$

и $B_a(E\ell, I \rightarrow I + \ell)$ - зведена ймовірність $E\ell$ - переходів у жорсткому аксіально-симетричному ядрі

$$B_a(E\ell, I \rightarrow I + \ell) = \frac{2\ell + 1}{16\pi} Q_\ell^2 \langle I_i 0 \ell 0 | I_f 0 \rangle^2,$$

$\langle I_i 0 \ell 0 | I_f 0 \rangle$ - коефіцієнт Клебша-Гордана.

Оператор електричних дипольних переходів в ядрах з квадрупольною і октупольною деформаціями між рівнями протилежної парності пов'язаний з ПЕДМ D_0

$$\mathcal{M}_\mu(E1) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} D_0 \frac{\beta_2\beta_3}{\beta_2^0\beta_3^0} D_{0\mu}^1(\theta).$$

Величина ПЕДМ в випадку ядер з квадрупольною і октупольною деформаціями рівна

$$D_0 = \frac{9AZe^3}{56\pi(35)^{1/2}} \left(\frac{1}{J} + \frac{15}{8QA^{1/3}}\right) \beta_2^0\beta_3^0.$$

Також як і у випадку $E2$ – і $E3$ – переходів, перепишемо оператор дипольного моменту в полярних координатах

$$\mathcal{M}_\mu(E1) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} D_0 \mu^2 \rho^2 \frac{\sin 2\varepsilon}{\sin 2\varepsilon_0} D_{0\mu}^1(\theta).$$

Преобразуємо наведену ймовірність $E1$ – переходів через наведену ймовірність переходів для жорсткого аксіально-симетричного ротатора

$$B(E1, I \rightarrow I + 1) = B_a(E1, I \rightarrow I + 1) S_{I,I+1}^2(E1) \exp(-2\hbar/(BC_\varepsilon)^{1/2}),$$

де

$$B_a(E\ell, I \rightarrow I + \ell) = \frac{3}{4\pi} D_0^2 \langle I_i 0 1 0 | I_f 0 \rangle^2$$

і також введений множник, який пов'язаний з посиленням сили переходу, внаслідок збудження ядра при обертанні

$$S_{I_i, I_f}(E1) = \frac{\mu^2 \Gamma(\frac{3}{2} + (s_{I_i\nu}^\pm + s_{I_f\nu}^\mp)/2) \Gamma(n + (s_{I_i\nu}^\pm - s_{I_f\nu}^\mp)/2 - 1)}{(n! \Gamma(s_{I_f\nu}^\mp + 1/2) \Gamma(n + s_{I_i\nu}^\pm + 1/2))^{1/2} \Gamma((s_{I_i\nu}^\pm - s_{I_f\nu}^\mp)/2 - 1)}.$$

При обчисленні наведених ймовірностей дипольних, квадрупольних і октупольних переходів між рівнями ядра з квадрупольною і октупольною деформаціями ми будемо нехтувати внеском неспареного нуклону, так як ці переходи є колективними і внесок одного нуклону зневажливо малий. Це наближення є досить точним, так як $E\ell$ – переходи між рівнями ядра пов'язані з електричним ℓ - польним моментом ядра. Внесок від одного нуклону в Q_2 , Q_3 і D_0 є малим, тому ми можемо використовувати отримані раніше результати.

У цьому наближенні вирази для наведених ймовірностей дипольних і квадрупольних переходів в непарних ядрах залишаються такими ж, як і для парно-парних. Однак параметр $s_{I\nu}^{\pm}$, який явно входить в вирази для наведених ймовірностей, у випадку непарних ядер пов'язаний з функцією $f(I, K, \pm)$.

2. При експериментальному дослідженні ядер з квадрупольною і октупольною деформаціями часто вимірюється відношення наведених ймовірностей і

$$\mathcal{W}(I_i) = \frac{B(E1, I_i \rightarrow I_i + 1)}{B(E2, I_i \rightarrow I_i + 2)},$$

яке пов'язане з інтенсивністю переходів $I_i \rightarrow I_{f_1} = I_i + 1$ и $I_i \rightarrow I_{f_2} = I_i + 2$ [1-16]. За допомогою знайдених раніше формул для наведених ймовірностей переходів отримаємо для їх відношення в разі $n = \nu = 0$ вираз

$$\mathcal{W}(I) = \mathcal{W}_a(I) \Omega^2 \frac{\Gamma(s_{f_2}^{\pm} + 1/2)\Gamma((s_i^{\pm} + s_{f_1}^{\mp}) + 3/2)}{\Gamma(s_{f_1}^{\mp} + 1/2)\Gamma((s_i^{\pm} + s_{f_2}^{\mp}) + 1)},$$

де $\mathcal{W}_a(I)$ - відношення наведених ймовірностей для жорсткого ротатора

$$\mathcal{W}_a(I) = \frac{8(2I - 1)}{5(I - 1)} \left(\frac{D_0}{Q_2} \right)^2$$

и $\Omega = \mu \exp(-3\hbar/4(BC_\varepsilon)^{\frac{1}{2}})$. З виразу для електричного квадрупольного моменту і ПЕОМ випливає, що для розрахунку $\mathcal{W}(I)$ необхідно знати також величину октупольної деформації ядра і значення параметра Ω .

Таблиця Експериментальні та теоретичні значення відносини $\mathcal{W}(I)$.

(Значення $\mathcal{W}(I)$ дані в одиницях $10^{-6}\Phi_{\text{M}}^{-2}$.)

Ядро	^{218}Ra		^{220}Ra		^{220}Th		^{222}Th		
	I	exp	theor	exp	theor	exp	theor	exp	theor
6	3.7	0.881			1.8	0.688	1.1	1.014	
7	2.8	0.428			2.2	0.698	1.1	.411	
8	3.5	0.858	1.2	0.841	2.3	0.711	2.5	1.023	
9	2.2	0.471			1.7	0.726	1.4	.449	
10	1.1	0.859	1.8	0.874	1.6	0.742	2.6	1.035	
11	3.6	0.511	1.6	0.736	1.3	0.758	2.6	.487	
12	1.8	0.871	1.2	0.907			1.9	1.049	
13	2.9	0.549	1.9	0.776			2.6	.524	
14	1.3	0.888	0.8	0.940			2.2	1.065	
15	2.9	0.585	1.3	0.815			3.4	.560	
16									
17			2.1	0.853					

Для аналізу залежності наведених ймовірностей від спина і дослідження впливу деформації ядра при обертанні на наведені ймовірності корисно розглянути поведінку відношення наведених ймовірностей

$$\mathcal{R}(I, \ell) = \frac{B(E\ell, I_i \rightarrow I_i + \ell)}{B(E\ell, 0 \rightarrow \ell)}.$$

Зауважимо, що це відношення залежить тільки від параметрів $\hbar\omega_\sigma$ і Δ_ν^\pm . З точністю до коефіцієнта, що залежить від спина I , величина $\mathcal{R}(i, \ell)$ пов'язана з фактором $S_{I, I+\ell}(E\ell)$, обумовлені деформаційними ρ -збудженнями ядра. У разі жорсткого ядра фактор $S_{I, I+\ell}(E\ell) = 1$.

Table 3. Експериментальні та теоретичні значення співвідношення $\mathcal{R}(I, L)$ при $L = 1, 2, 3$ для ^{226}Ra .

Nucl.	$L = 1$			$L = 2$			$L = 3$		
I	exp.	soft	rigid	exp.	soft	rigid	exp.	soft	rigid
0	1.000 $^{+0.392}_{-0.392}$	1.000	1.000	1.000 $^{+0.009}_{-0.009}$	1.000	1.000	1.000 $^{+0.056}_{-0.056}$	1.000	1.000
1	0.617 $^{+0.235}_{-0.235}$	0.676	0.667	0.874 $^{+0.008}_{-0.009}$	0.643	0.600	0.618 $^{+0.042}_{-0.036}$	0.591	0.571
2	0.298 $^{+0.111}_{-0.111}$	0.623	0.600	0.536 $^{+0.005}_{-0.005}$	0.533	0.514	0.686 $^{+0.039}_{-0.039}$	0.491	0.476
3	0.186 $^{+0.068}_{-0.068}$	0.608	0.571	0.468 $^{+0.004}_{-0.004}$	0.533	0.476	0.828 $^{+0.077}_{-0.077}$	0.471	0.433
4	0.384 $^{+0.141}_{-0.141}$	0.621	0.556	0.507 $^{+0.005}_{-0.005}$	0.500	0.455	0.572 $^{+0.032}_{-0.034}$	0.443	0.408
5				0.295 $^{+0.003}_{-0.003}$	0.524	0.441	0.449 $^{+0.025}_{-0.025}$	0.455	0.392
6	0.758 $^{+0.276}_{-0.276}$	0.663	0.538	0.441 $^{+0.004}_{-0.004}$	0.511	0.431	0.555 $^{+0.031}_{-0.033}$	0.443	0.380
7	1.176 $^{+0.594}_{-0.594}$	0.672	0.533	0.388 $^{+0.003}_{-0.004}$	0.543	0.424			
8	1.355 $^{+0.497}_{-0.497}$	0.726	0.529	0.402 $^{+0.004}_{-0.004}$	0.539	0.418	0.244 $^{+0.032}_{-0.159}$	0.461	0.365
9	1.535 $^{+0.605}_{-0.605}$	0.731	0.526	0.472 $^{+0.005}_{-0.009}$	0.574	0.414			
10	2.074 $^{+0.777}_{-0.777}$	0.801	0.524	0.755 $^{+0.007}_{-0.008}$	0.577	0.410			
11	2.130 $^{+0.878}_{-0.878}$	0.800	0.522	0.851 $^{+0.018}_{-0.012}$	0.614	0.407			
12	6.350 $^{+2.389}_{-2.389}$	0.883	0.520	0.420 $^{+0.006}_{-0.004}$	0.621	0.404			
13	6.259 $^{+2.587}_{-2.290}$	0.875	0.519	0.682 $^{+0.071}_{-0.041}$	0.659	0.402			
14				0.455 $^{+0.028}_{-0.007}$	0.669	0.400			
15	3.903 $^{+1.468}_{-1.658}$	0.968	0.517						
16				0.185 $^{+0.005}_{-0.004}$	0.669	0.400			

ПОЛЯРИЗОВАНІСТЬ АКСІАЛЬНО-СИМЕТРИЧНИХ МЕТАЛЕВИХ КЛАСТЕРІВ

1. Різні властивості металевих кластерів (МК) активно досліджуються в останнім часом. Валентні електрони в МК в першому наближенні можна розглядати як вільні частинки, щільність яких рівномірно розподілена за обсягом МК, то можна використовувати модель желе для вивчення характеристик МК. В рамках моделі желе успішно описані багато властивостей МК. У цій моделі передбачається, що вільні валентні електрони знаходяться в кулонівському полі іонного остова, який має однакову щільність в обсязі МК.

З експериментів з фото-поглинання випливає, що поверхня МК в залежно від числа частинок в кластері може бути як сферичної, так і деформованій. Найбільший вплив на енергетичну залежність перетину фото-поглинання має квадрупольна деформація кластерів. З різних теоретичних розрахунків рівноважної форми МК випливає, що поверхня МК має складну форму, в якій поряд з квадрупольної можливі октупольної і більше високі мультипольні деформації. Причому мультипольні деформації можуть бути неаксіально-симетричними. Відзначимо, що мультипольні деформації мають немонотонну залежність від числа іонів в МК.

Важливою властивістю МК є поляризованість α . Поляризованість МК залежить від деформації. Раніше поляризованість досліджувалася теоретиками тільки в еліпсоїдальне деформованих МК.

Метою є розрахунок поляризованості в аксіально-симетричних МК, форма яких описується співвідношен

$$R(\vartheta) = R \left[1 + \sum_{\ell=2}^{\ell_{max}} \beta_{\ell} Y_{\ell 0}(\vartheta) \right].$$

Тут R - радіус іонного кору МК, а β_ℓ - параметри деформацій, $Y_{\ell 0}(\vartheta)$ - сферичні гармоніки.

2. Вираз для поляризованості деформованого МК

У різних моделях і наближеннях було показано, що поляризованість сферичного МК дорівнює

$$\alpha = (R_0 + \delta)^3,$$

де величина R_0 пов'язана з радіусом Вігнера-Зейтца r_{wz} і числом іонів в МК N , $R_0 = r_{wz}N^{1/3}$, δ - фактор, пов'язаний з тим, що хмара валентних електронів виходить за поверхню остова. Через δ впливає, що поляризованість МК збільшена в порівнянні з поляризованістю металеві кулі, радіус якого збігається з радіусом іонного остова МК. Фактично поляризованість МК пов'язана з радіусом ефективної поверхні валентних електронів $R_{ef} = R_0 + \delta$.

У МК з формою $R(\vartheta)$ усереднену за напрямками поляризованість можна представити у вигляді

$$\alpha = (R_0 + \delta)^3 F(\{\beta\}).$$

тут множник $f(\{\beta\})$ - пов'язаний з деформацією МК $\{\beta\} = \beta_2, \dots, \beta_{\ell_{max}}$, який можна знайти, обчислюючи поляризованість металеві сфери.

Потенціал поза металеві сферою, що знаходиться в постійному зовнішньому полі, представимо у вигляді суми зовнішнього φ_e і індукованого φ_i потенціалів

$$\varphi = \varphi_e + \varphi_i,$$

де

$$\varphi_e = -(\mathbf{r}\mathbf{E}) = -\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \sum_{\nu} r Y_{1\nu}(\vartheta, \varphi) E_{\nu},$$

$$\varphi_i = \sum_{\ell=1}^{\infty} r^{-\ell-1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell m} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi).$$

тут враховано, що потенціал індукованого поля є спадаючим на нескінченності рішення рівняння Лапласа. Знайдемо поляризованість металеві сфери на ν - компоненту зовнішнього поля. Нижче обмежимося квадратичними членами за величиною деформацій.

З умови сталості потенціалу на поверхні провідника

$$\varphi|_{R_{ef}(\vartheta)} = \varphi_e|_{R_{ef}(\vartheta)} + \varphi_i|_{R_{ef}(\vartheta)} = 0$$

следує

$$\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} Y_{1\nu}(\vartheta, \varphi) E_{\nu} = \sum_{\ell=1}^{\infty} R_{ef}^{-\ell-2}(\vartheta) \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell m \nu} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi).$$

Тут враховується, що фактично поляризованість МК пов'язана з ефективною поверхнею валентних електронів.

Множачи рівняння на $Y_{\lambda\mu}^*(\vartheta, \varphi)$ та після інтегрування по $d\Omega = \sin(\vartheta)d\vartheta d\varphi$ отримаємо нескінченномірну систему лінійних рівнянь для визначення коефіцієнтів $a_{\ell m \nu}$:

$$\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \delta_{1\lambda} \delta_{\mu\nu} E_{\nu} R_{ef}^3(\{\beta\}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell m \nu} c_{\ell m \lambda \mu},$$

де

$$c_{\ell m \lambda \mu} = \int \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi Y_{\lambda \mu}^*(\vartheta, \varphi) (R_{ef}(\vartheta)/R_{ef})^{-\ell-2} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi),$$

$$R_{ef}^3(\{\beta\}) = R_{ef}^3(1 - v_0) = (R_0 + \delta)^3(1 - v_0)$$

и

$$v_0 = \frac{3}{4\pi} \sum_{\ell=2}^{\ell_{max}} \beta_{\ell}^2.$$

Член з v_0 пов'язан з вимогою збереження об'єму.

С точністю до квадратичних членів по величині деформацій коефіцієнти $c_{\ell m \lambda \mu}$ рівні

$$c_{\ell m \lambda \mu} = \delta_{\ell \lambda} \delta_{m \mu} + \mathcal{A}_{\ell m \lambda \mu} + \mathcal{B}_{\ell m \lambda \mu},$$

где

$$\mathcal{A}_{\ell m \lambda \mu} = -(-1)^m (\ell + 2) \times \sum_{L=2}^{\ell_{max}} \left(\frac{(2\ell + 1)(2\lambda + 1)}{4\pi(2L + 1)} \right)^{1/2} \langle \ell 0 \lambda 0 | L 0 \rangle \langle \ell m \lambda - \mu | L 0 \rangle \beta_L,$$

$$\mathcal{B}_{\ell m \lambda \mu} = (-1)^m \frac{(\ell + 2)(\ell + 3)}{8\pi} \times \sum_{LL'=2}^{\ell_{max}} ((2\ell + 1)(2\lambda + 1)(2L + 1)(2L' + 1))^{1/2} \beta_L \beta_{L'} \times$$

$$\times \sum_J \frac{\langle L 0 L' 0 | J 0 \rangle^2 \langle \ell 0 \lambda 0 | J 0 \rangle \langle \ell m \lambda - \mu | J 0 \rangle}{2J + 1}.$$

Відметимо, що коефіцієнти $\mathcal{A}_{\ell m \lambda \mu}$, $\mathcal{B}_{\ell m \lambda \mu}$ и $c_{\ell m \lambda \mu}$ пропорційні $\delta_{m \mu}$ і симетричні щодо перестановки індексів jm на $\lambda \mu$, і коефіцієнт $\mathcal{A}_{\ell m \lambda \mu}$ може містити внесок від дипольної деформації.

Використовуючи метод математичної індукції, легко знайти рішення системи рівнянь з точністю до квадратичних членів за величиною деформації β_L . У цьому випадку коефіцієнти A_{1m} мають вигляд

$$a_{1m\nu} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \delta_{m\nu} E_\nu R_{ef}^3 F_m(\{\beta\}),$$

где

$$F_m(\{\beta\}) = 1 - \mathcal{A}_{1m1m} - \mathcal{B}_{1m1m} + \sum_{j=1}^{\ell_{max}+1} \mathcal{A}_{1mjm} \mathcal{A}_{jm1m} - v_0.$$

При розрахунку $F_m(\{\beta\})$ необхідно враховувати член з β_{1m} в $\mathcal{A}_{\ell m \lambda \mu}$ тільки в другому доданку в (17), так як дипольна деформація пропорційна добутку деформацій $\beta_\ell \beta_{\ell+1}$ (як буде показано нижче). Однак, так як $\langle 1010|10 \rangle = 0$, то член з β_1 взагалі вкладу не дає.

Коефіцієнти $a_{1m\nu}$ пов'язані з тензором поляризованості α_{mk} , компоненти якого в разі аксіально-симетричної металеві поверхні рівні

$$\alpha_{m\nu} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \frac{a_{1m\nu}}{E_\nu} = \delta_{m\nu} R_{ef}^3 F_m(\{\beta\}).$$

Знаючи тензор поляризованості, можна знайти і усереднену по поляризованості МК з точністю до квадратичних членів по деформації, яка вимірюється в експериментах, і визначити функцію $F(\{\beta\})$

$$\alpha = \frac{1}{3} \sum_{m\nu} \alpha_{m\nu} = R_{ef}^3 F(\{\beta\}) = (R_0 + \delta)^3 F(\{\beta\}).$$

Відзначимо, що точністю до квадратичних членів по деформації

$$F(\{\beta\}) = (F_0(\{\beta\}) + 2F_1(\{\beta\}))/3 = 1.$$

У нашому наближенні з точністю до квадратичних членів по деформації усереднена за напрямками поляризованість МК с деформаціями $\beta_2, \beta_3, \beta_4, \dots$ така ж, як і у кулі з радіусом $R_{ef} = R_0 + \delta$, який має рівновеликий обсяг зайнятий хмарою вільних валентних електронів.

3. ЕДМ дзеркально-асиметричних МК

У МК, як і в атомних ядрах, з октупольною деформацією або з будь-якою іншою деформацією, яка описується непарною сферичною гармонікою, порушена дзеркальна симетрія відносно площини $x - y$. Дзеркальна симетрія відновлюється в результаті квантово механічних тунельних переходів між формами з протилежними значеннями октупольної (або будь $2\ell + 1$ -польної) деформації. У разі кінцевого бар'єру між ямами основний стан МК $|0\rangle$ описується парною комбінацією хвильових функцій, пов'язаних з формами з протилежними значеннями октупольної деформації, а перше збуджене $|1\rangle$ стан-непарною комбінацією цих хвильових функцій.

Величина розщеплення рівнів $|0\rangle$ і $|1\rangle$ внаслідок тунелі переходу між двома, наближено дорівнює

$$\epsilon_{10} = \frac{\hbar\omega}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\beta_3^t}^{\beta_3^t} (2b(\beta_3)(U(\beta_3) - E_0))^{1/2} d\beta_3\right),$$

де ω - частота класичних періодичних коливань, $B(\beta_3)$ та $U(\beta_3)$ - масовий параметр та потенційна енергія, які пов'язані з октупольною деформацією МК відповідно. Величина розщеплення рівнів $|0\rangle$ і $|1\rangle$ внаслідок тунельного переходу між ямами приблизно дорівнює

$$\epsilon_{10} = \frac{\hbar\omega}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\beta_3^t}^{\beta_3^t} (2B(\beta_3)(U(\beta_3) - E_0))^{1/2} d\beta_3\right),$$

где ω - частота класичного періодичного руха, $B(\beta_3)$ и $U(\beta_3)$ - масовий параметр и потенційна енергія, які пов'язані з октупольною деформацією МК відповідно, $\pm\beta_3^t$ - точки повороту на бар'єрі, що розділяє ями. Масовий параметр і частота ω раніше не оцінювалися для МК с октупольної деформацією, тому положимо, що $\omega = (C_0/B)^{1/2}$, потенційна енергія між точками повороту наближена $U(\beta_3) = C_B[(\beta_3^t)^2 - \beta_3^2]/2$, величина масового параметру B близька до гідродинамічного значення B_h та не залежить від деформації. Виходячи з виду потенційної поверхні для МК з $N = 44$, можна покласти $C_B \approx 10$ еВ, $C_0 \approx 20$ еВ і $\beta_3^t \approx 0,1$. Використовуючи вираз для обчислення масового параметра в гідродинамічному наближенні, знайдемо $B_h \approx 1,14 \cdot 10^6 \hbar^2/\text{еВ}$. Підставивши ці значення, отримаємо $\epsilon_{10} \approx 1,3 \cdot 10^{-26}$ еВ. (Для порівняння, в атомних ядрах енергія $|1 >$ стану становить кілька сотень КЕВ.) Така маленька величина розщеплення свідчить про дуже слабкий зв'язок форм з протилежними значеннями дзеркально-асиметричних деформацій в МК, тому кожену форму можна розглядати окремо. Так як гідродинамічний масовий параметр пропорційний $B_h \propto N^{5/3}$, то величина розщеплення, експоненціально залежить від Bb_h , буде різко зменшуватися з ростом n . Отже зі збільшенням N зв'язок між дзеркально-асиметричними формами швидко слабшає і наше наближення про те, що кожену з дзеркально-асиметричних форм можна розглядати окремо, стає більш точним.

ЕДМ можна розраховувати на будь-який з дзеркально-симетричних форм. Обчислимо ЕРС в МК.

У моделі желе густина числа іонів в деформованому МК з радіусом іонного остова $r_i(\vartheta)$, що має кутову залежність (1), має ступінчастий вид

$$\rho_i(r) = \rho_i^0 \theta(R_i(\vartheta) - r),$$

де $\theta(x)$ - тета-функція. Розподіл густини вільних валентних електронів може бути представлено у вигляді

$$\rho_e(r) = \rho_e^0 f(r - R_e(\vartheta)),$$

де $r_e(\vartheta)$ - радіус поверхні електронів, функція $f(r - R_e(\vartheta))$ близька до 1 всередині МК і різко убуває на його поверхні при $r \approx R_e(\vartheta)$, швидко прагнучі до нуля при $r > R_e(\vartheta)$. Нижче більш детально обговоримо функцію $f(x)$. Детальні мікроскопічні розрахунки розподілу густин вільних електронів і іонів в МК добре узгоджуються з цими припущеннями про функцію $f(r - R_e(\vartheta))$ особливо у важких МК. Внаслідок великої жорсткості іонного остова нехтуємо варіаціями щільності іонів, пов'язаними з несферичністю форми.

У разі МК з відмінними від нуля деформаціями непарних мультипольностей β_ℓ центр ваги МК повинен знаходитися в площині дзеркальної симетрії

$$R_0^{c.m.} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \int d\mathcal{V} r Y_{10}(\vartheta) \rho = 0,$$

де ρ - щільність розподілу маси в МК. Виконання цієї умови досягається відповідним вибором параметра дипольної деформації β_1 . З точністю до членів, пропорційних другого ступеня параметрів деформацій,

$$\beta_1 = -\frac{9}{(12\pi)^{1/2}} \sum_{\ell \geq 2}^{\ell_{max}-1} \frac{(l+1)}{((2\ell+1)(2\ell+3))^{1/2}} \beta_\ell \beta_{\ell+1}.$$

тут враховано, що маса іонів багато більше маси вільних електронів, тому внеском від електронної хмари, яке має розподіл щільності, що відрізняється від ступінчастого, в величину β_1 можна знехтувати.

ЕДМ дорівнює

$$D = e | \langle 1 | \mathcal{D} | 0 \rangle | = \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} e \int d\mathcal{V} r Y_{10}(\vartheta) \rho_e.$$

Зауважимо, що умова збігу центрів мас дзеркально-симетричних островів призводить до відсутності вкладу іонного остова в ЕДМ.

Вираз для ЕДМ МК зручно представити у вигляді

$$D = \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} e \int d\mathcal{V} r Y_{10}(\vartheta) [\rho_e^0(f(r - R_e(\vartheta)) - \theta(R_e(\vartheta) - r))].$$

Звідси випливає, що ЕРС пов'язаний з неоднорідністю розподілу вільних електронів в МК з функцією $f(r - R_e(\vartheta))$.

Визначення функції $f(x)$ є досить складним обчислювальним завданням навіть у найбільш простому наближенні локальної густини. Для того, щоб оцінити величину ЕДМ візьмемо $f(x)$ у вигляді

$$f(x) = (1 + \exp(x/d))^{-1},$$

де d - дифузності розподілу. Відзначимо, що розподіл щільності валентних електронів, знайдене в різних детальних моделях, досить добре апроксимується. Крім того, при взятті інтегралів від даного розподілу зручно користуватися формулою

$$(1 + \exp((x - R)/d))^{-1} \approx \theta(R - r) - \frac{(\pi d)^2}{6} \delta'(r - R),$$

яка має ступінь точності порядку $O(\exp(-R/d))$ і дозволить нам отримати аналітичний вираз для ЕДМ.

Тут $\delta'(x)$ - позначає похідну дельта-функції.

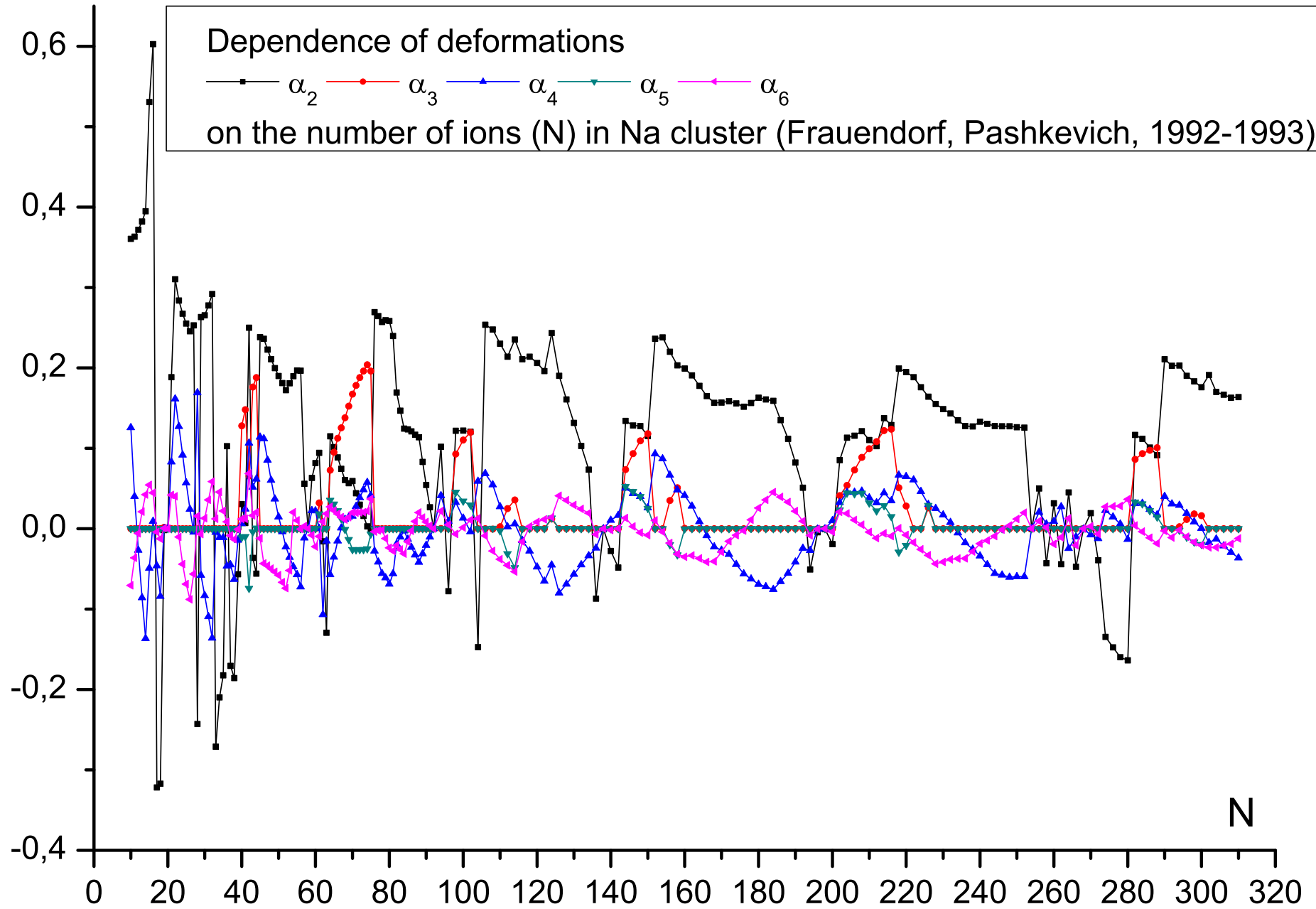
Отримаємо для ЕДМ МК в найнижчому порядку за величиною деформації і дифузності розподілу вільних електронів на поверхні просте вираження:

$$D = \frac{eZ\pi^{3/2}d^2}{3^{1/2}r_{wz}N^{1/3}}\beta_1,$$

де Z - число вільних валентних електронів в кластері. Тут враховано, що $R_e(\vartheta) \simeq R_i(\vartheta) \simeq R(\vartheta)$ и $\rho_e^0 \approx 3Z/(4\pi r_{wz}N^{1/3})$ с точністю до квадратичних членов по d .

Як і у випадку атомних ядер, ЕДМ МК пропорційний добутку деформацій $\beta_\ell\beta_{\ell+1}$. Внесок у величину ЕДМ квадрупольної та октупольної деформацій порівняємо за величиною з внеском від деформацій більш високих мультипольностей. У деформованому МК ЕДМ пов'язаний з дифузністю розподілу щільності електронів на поверхні. У цьому істотна відмінність Походження ЕДМ у випадках МК і атомних ядер. У ядрах ЕДМ відрізняється від нуля в наближенні ступінчастого розподілу щільності, в той час як в нейтральних МК ЕДМ дорівнює нулю в цьому наближенні. Причому, в атомних ядрах ЕДМ пов'язаний з перерозподілом протонів відносно нейтронів внаслідок деформації ядра, а МК перерозподіл валентних електронів щодо іонів буде поправкою до знайденого нами. Також можна зробити висновок, що величина c_ℓ і ЕДМ в негативно заряджених кластерах ($Z > N$) більше, ніж в нейтральних ($Z = N$) і позитивно заряджених ($Z < N$). Відзначимо, що нейтральні МК також мають відмінний від нуля ЕДМ. В атомних ядрах ЕДМ призводить до значного посилення дипольних переходів. Подібне явище повинно спостерігатися і в МК.

4. Обговорення результатів



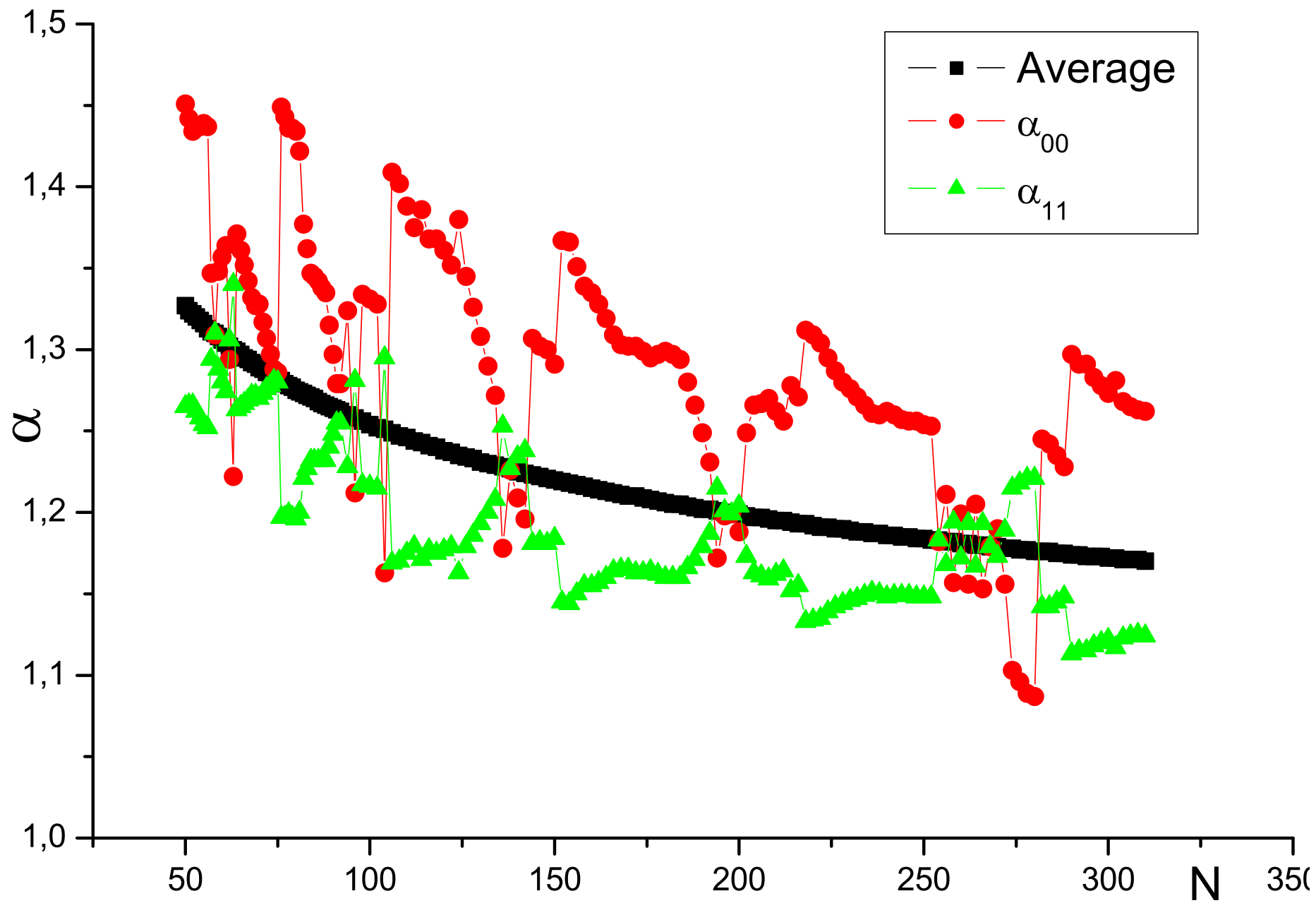
Для аналізу величини поляризованості МК, що складається з n іонів, зручно досліджувати величину

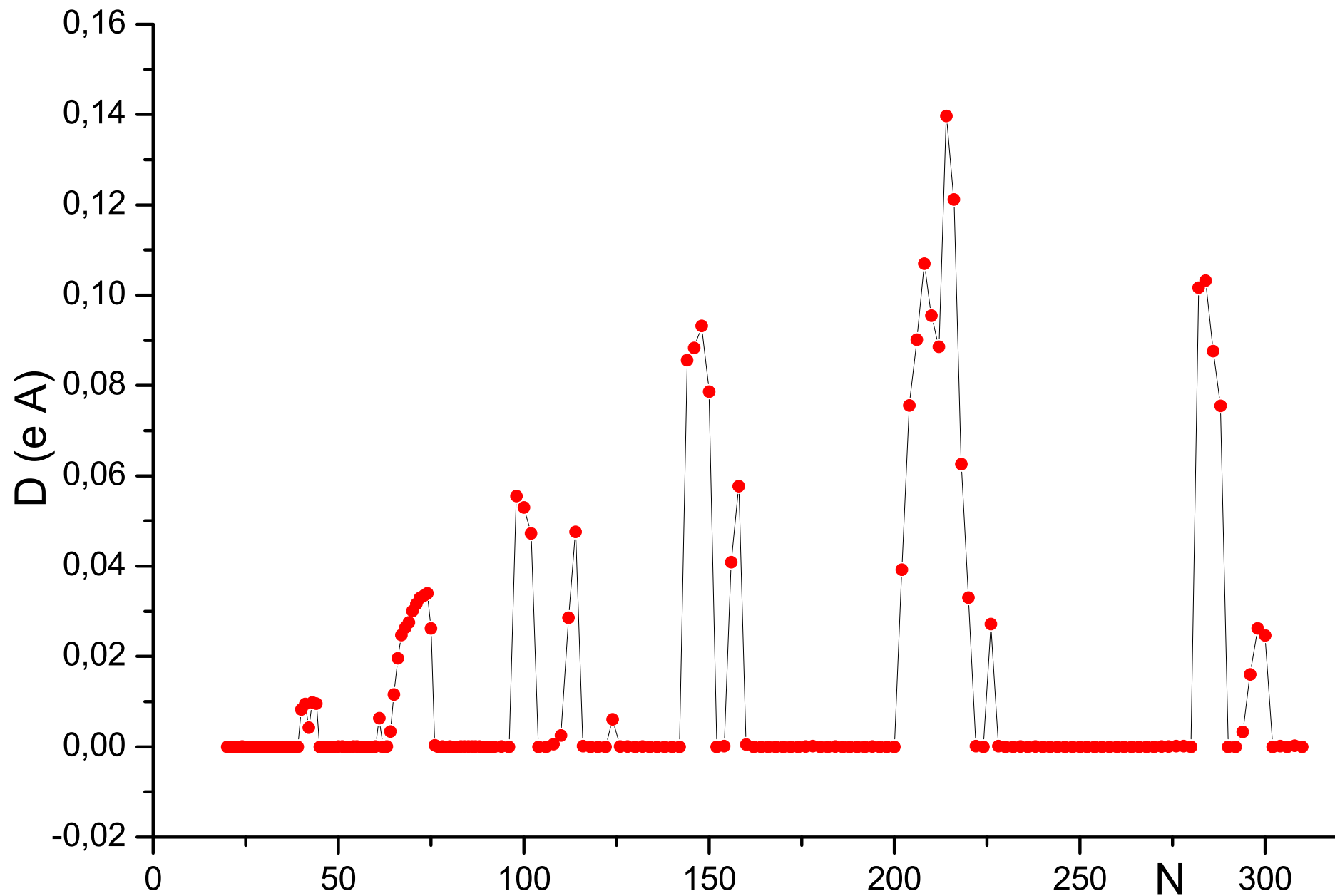
$$p(N) = \frac{\alpha}{r_{wz}^3 N} = \left(1 + \frac{\delta}{r_{wz} N^{1/3}}\right)^3,$$

яка визначає поляризованість МК в одиницях поляризованості металеві кулі, у якого радіус збігається з радіусом іонного остова.

У нашому наближенні деформовані МК мають таку ж поляризованість, як і рівновеликі сферичні.

Розрахунок поляризованості зроблений при наступних значеннях параметрів: $r_{wz} = 2,17 \text{ \AA}$, $\delta = 0,79 \text{ \AA}$ і $D = 0,54 \text{ \AA}$. Дане значення величини радіуса Вігнера-зейца відповідає щільності Na при $500^0 K$, для якого розраховувалися параметри деформацій.





Дякую за увагу!