

Ю.В. Дубровская, к.ф.-м.н., доц., А.В. Игнатенко, к.ф.-м.н., доц.,

Л.А. Витавецкая, к.ф.-м.н., доц.

Одесский государственный экологический университет

## ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ ФЕРМИ В ТЕОРИИ БЕТА - РАСПАДА ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ОПРЕДЕЛЕНИЯХ ИСКОМОЙ ФУНКЦИИ

*В рамках нового подхода к вычислению интегральной функции Ферми в теории бета распада, базирующегося на релятивистской теории возмущений с использованием оптимизированных базисов дирак-фоковских релятивистских функций, получены численные оценки различия значений функции Ферми для бета распада при выборе разных определений для искомой величины (на границе ядра и вблизи нуля).*

*Ключевые слова:* интегральная функция Ферми, релятивистская теория возмущений

**Введение.** Разработка неэмпирического высокоточного метода (или существенное усовершенствование существующих) определения функции Ферми, интегральной функции Ферми, вероятностей соответствующих  $\beta$ -,  $\gamma$ - и других переходов по-прежнему относится к числу крайне актуальных и важных вычислительно-математических задач современной теории бета распада, а также многочисленных смежных проблем в теории ядра [1-20]. Имеющиеся методы, как правило, основываются на использовании базисов релятивистских функций типа Дирака-Фока (ДФ) или Дирака-Фока-Слэтера [1-12,20]. В более простых численных схемах применяются базисы нерелятивистских функций типа Хартри-Фока, Хартри-Фока-Слэтера (ХФС) [5,7]. В наиболее полных расчетах характеристик вероятностей и периодов полураспада бета процессов использовался метод вычисления релятивистских атомных полей как с приближенным учетом обмена по ХФС (с учетом релятивистских эффектов по теории возмущений) или по Дираку-Фоку-Слэтеру, так и с полным, без какой-либо аппроксимации, учетом обмена методом ДФ [1-8]. Кроме того, в искомых методах предусмотрена возможность вычисления волновых функций непрерывного спектра как в поле ХФС, так и в поле ДФ с полным учетом обмена рассматриваемого электрона непрерывного спектра со всеми электронами атома. Хотя перечисленные подходы дали возможность получить крайне важную информацию о функции Ферми, интегральной функции Ферми, вероятностях соответствующих  $\beta$ -,  $\gamma$ - и других переходов, однако до настоящего времени существенно улучшить методы с целью обеспечения достаточно высокой точности расчета различных характеристик бета распада не удалось. В частности, речь по-прежнему идет о неполном учете межчастичных корреляций (включая вклад так называемых ядерных остов-поляризационных эффектов, индуцируемых валентными протонами ядра), не полном выполнении принципа калибровочной инвариантности и соответственно недостаточной корректности волновых функций т.д.

В данной работе в рамках нашего подхода к вычислению функции Ферми и интегральной функции Ферми в теории бета распада, базирующегося на релятивистской теории возмущений с использованием оптимизированных дирак-фоковских (ОДФ) базисов релятивистских функций, получены численные оценки различия значений функции Ферми  $F(E,Z)$  для  $\beta^-$  распада при выборе разных определений для искомой величины (на границе ядра и вблизи нуля). Поскольку основные аспекты нашего подхода, применимого, вообще говоря, к так называемым разрешенным бета переходам, изложены ранее [18-20], далее мы ограничимся лишь основными моментами.

**Релятивистский подход к вычислению функции Ферми.** Естественно, для вычисления вероятности  $\beta$ -распада обычно используется метод теории возмущений. Константа взаимодействия  $g$  характеризуется значительной малостью, что позволяет фактически в расчете ограничиваться учетом членов лишь первого порядка, соответствующих прямым переходам из начального состояния в конечное. Вероятность перехода системы из начального состояния  $|\xi\rangle$  с энергией  $E_\xi$  в некоторое конечное состояние  $\langle f|$  с энергией  $E_f$  в единицу времени при условии  $E_0 = E_f - E_\xi$  определяется следующим стандартным выражением

$$dW_{\xi f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H | \xi \rangle|^2 \left. \frac{d\tilde{N}}{dE} \right|_{E=E_0}. \quad (1)$$

Матричный элемент в формуле (1) определяется видом гамильтониана взаимодействия  $H_\beta$  и волновых функций начального  $\psi_\xi$  и конечного  $\psi_f$  состояний ядра

$$\langle f | H | \xi \rangle = \int \psi_f H_\beta \psi_\xi d^3 r_1 \dots d^3 r_A. \quad (2)$$

Величина  $\left. \frac{d\tilde{N}}{dE} \right|_{E=E_0}$  определяет плотность конечных состояний системы на

единицу энергии. Рассмотрим далее разрешенные переходы. Распределение  $\beta$ -частиц по энергии в этом случае имеет вид [1,3]:

$$dW_\beta(E)/dE = \frac{1}{2\pi^3} G^2 \cdot F(E, Z) \cdot E \cdot p \cdot (E_0 - E)^2 \cdot |M|^2, \quad (3)$$

$$E_0 = 1 + (E_{cp}/m_e c^2),$$

$$p = (E^2 - 1)^{1/2}.$$

Здесь  $G$ - константа слабого взаимодействия,  $E$  - полная энергия  $\beta$ -частицы,  $E_{cp}$ - граничная энергия  $\beta$ -спектра,  $|M|$  -матричный элемент, не зависящий от энергии в случае разрешенных  $\beta$ -переходов.

Интересующие нас функция Ферми  $F$  и интегральная функция Ферми  $f$  определяются соответственно следующим стандартным образом:

$$F(E, Z) = \frac{1}{2p^2} (g_{-1}^2 + f_{+1}^2), \quad (4)$$

$$f(E_0, Z) = \int_1^{E_0} F(E, Z) \cdot E \cdot p \cdot (E_0 - E)^2 dE. \quad (5)$$

Здесь  $f_{+1}$  и  $g_{-1}$  - релятивистские электронные радиальные волновые функции, которые в разных вариантах теории либо вычисляются на границе сферического ядра с радиусом  $R_0$  (как сделано в таблицах [1]), либо используются значения этих функций в нуле (амплитуды разложения функций в ряд в нуле), как сделано в [5-8]; значки  $\pm 1 = \kappa$ , где  $\kappa = (l-j)/(2j+1)$ . В выше приведенных формулах использована следующая нормировка релятивистских радиальных функций  $f_\kappa$  и  $g_\kappa$ , при которой при больших значениях радиальной переменной:

$$g_i(r) \rightarrow r^{-1} [(E+1)/E]^{1/2} \cdot \sin(pr + \delta_i), \quad (6)$$

$$f_i(r) \rightarrow r^{-1} (v|v|) [(E-1)/E]^{1/2} \cdot \cos(pr + \delta_i). \quad (7)$$

Вычисление искомых функций выполнено в оптимизированном приближении ОДФ [18]. Альтернативные подходы, развитые в работах [1,5-8], обладают рядом недостатков по сравнению с методом [18]. В ОДФ применяется фундаментальный принцип минимизации энергетического функционала, представляющего собой вклад поляризационных диаграмм 4-порядка КЭД теории возмущений, т.е. вклад диаграмм, связанный с обменом продольными фотонами в мнимую часть энергии системы [14]. В результате соответствующий базис релятивистских функций является калибровочно-инвариантными и оптимизированным. Для определения ядерного потенциала использована известная гауссова модель в варианте [16,18]. Соответствующая система уравнений Дирака-Фока решалась численно методом Рунге-Кутты. Функции непрерывного спектра находились итеративным путем (первоначально в приближении «замороженного» остова). Самосогласование функции непрерывного спектра считалось достигнутым, когда нормированные функции на двух соседних итерациях различались менее чем на  $5 \cdot 10^{-4}$  по отношению к их значениям в точке максимума функции. Для разных энергий для достижения необходимой точности требовалось от 3 (при большей энергии) до 10 (при малой энергии) итераций. Вычисление нормирующего множителя проводится с помощью усреднения по периоду осцилляций функции непрерывного спектра. Если эти усредненные нормирующие множители на двух соседних периодах отличались менее, чем на 0,05%, нормирующий множитель полагался равным вычисленному значению на последнем периоде. Для достижения нормировки с требуемой точностью, уравнение интегрируется до расстояний от ядра, при которых функция непрерывного спектра проходит 5-8 периодов. При вычислении интегралов в них (как это принято при вычислении интегралов от сильно осциллирующих функций) вводился фактор затухания  $\exp(-\gamma r)$ . Значения  $\gamma$  выбирались таким образом, чтобы была обеспечена требуемая точность ( $\sim 0,01\%$ ).

**Результаты расчета и выводы.** Приведем численные оценки различия значений функции Ферми  $F(E,Z)$  для  $\beta$  распада при выборе разных определений для искомой величины. Как указывалось выше, функция Ферми  $F(E,Z)$  рассчитывалась нами как на границе ядра, так и вблизи нуля. В первом случае вычисление функция Ферми  $F(E,Z)$  проводилось с помощью значений радиальных электронных волновых функций  $f_{+1}^2(R_0) + g_{-1}^2(R_0)$  на границе ядра (равномерно заряженного сферического ядра) [1,5], во втором – функция Ферми вычислялась с помощью квадратов амплитуд разложения

$$N_{\kappa=+1}^2 + N_{\kappa=-1}^2$$

радиальных электронных волновых функций  $f_{+1}^2(0) + g_{-1}^2(0)$  при  $r \rightarrow 0$  [1].

Удобной величиной, характеризующей искомое отличие, является параметр:

$$\Delta_3 = \{ [ F(E, Z, R=0) / F(E, Z, R=R_0) ] - 1 \} \cdot 100\%,$$

где  $F(E, Z, R=R_0)$  – значение функции Ферми, вычисленное со значениями радиальных электронных волновых функций на границе ядра;  $F(E, Z, R=0)$  – значение функции Ферми, вычисленное с помощью амплитуд разложения волновых радиальных функций вблизи нуля.

Оценки отличий значений функции Ферми  $F(E,Z)$  для  $\beta$  распада при выборе двух разных определений этой величины приведены в табл. 1. Приведены результаты расчета в рамках метода ОДФ, а также для сравнения для ряда значений кинетической энергии данные оценок в рамках релятивистского метода ХФС [1,5,6,20].

Таблица 1 - Различие функции Ферми  $F(E, Z)$  для  $\beta$  распада при выборе разных определений для этой величины:  $\Delta_3 = \{ [ F(E, Z, R=0) ] / F(E, Z, R=R_0) - 1 \} \cdot 100\%$ , где  $F(E, Z, R=R_0)$  вычислено со значениями радиальных электронных волновых функций на границе ядра, а  $F(E, Z, R=0)$  – с помощью амплитуд разложения волновых радиальных функций вблизи нуля ( $R_0 = 1,2 \cdot A^{1/3}$  фм); ХФС – расчет методом Хартри-Фока-Слэтера; ОДФ – наши данные

E <sub>кин</sub> , кэВ	$\Delta_3$ , %						
	Z=20		Z=44	Z=63	Z=80	Z=95	
	ХФС	ОДФ	ОДФ	ОДФ	ОДФ	ХФС	ОДФ
0,1	1,35	1,39	5,44	12,72	23,25	33,9	36,8
1,0	1,37	1,42	5,53	12,84	23,36	34,1	37,2
50	1,38	1,45	5,58	12,95	23,58	34,2	37,6
500	1,50	1,58	5,84	13,10	24,61	35,5	39,88

Анализ результатов показывает, что с ростом атомного номера  $Z$  различие в значениях функции Ферми, определенной по разным методикам, резко возрастает. Аналогичным оказывается изменение интегральной функция Ферми  $f(E_{\beta}, Z)$ . В частности, оценки показывают, что при переходе от определения  $F(E, Z)$  по функциям на границе ядра к определению  $F(E, Z)$ , вычисляемой по амплитудам в нуле функция  $f$  возрастает для распадов  $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$  ( $E_{\beta} = 249$ кэВ),  $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$  ( $E_{\beta} = 167$ кэВ) на 2-4%,  $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$  ( $E_{\beta} = 65,8$ кэВ) - на 5%,  $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$  ( $E_{\beta} = 140,7$  кэВ) – 12%,  $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$  ( $E_{\beta} = 20,8$  кэВ) – 32%. Отметим, что в литературе приводились различные точки зрения на корректность и приемлемость того или иного подхода к определению функции Ферми. По нашему мнению (см. также [1,3-8]), определение функции Ферми с помощью амплитуд разложения волновых функций около нуля является более оправданным и рациональным. Как указывалось в [6,8], дополнительным фактором в пользу этого утверждения является то обстоятельство, что на основе амплитуд разложения электронных волновых функций в нуле обычно рассчитываются, например, электронный фактор  $EO$ - конверсии  $\Omega(EO)$ , поправки к коэффициентам внутренней конверсии для учета аномалий и т.д.

В заключение авторы считают своим приятным долгом выразить глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за критические замечания.

### Список литературы

1. Джелепов Б.С., Зырянова Л.П., Сулов Ю.П. Бета-процессы. Функции для анализа бета-спектров и электронного захвата.– Л.: Наука, 1978. – 473с.
2. Bohr O., Motelsson B. Structure of Atomic Nucleus.- New York: Plenum, 1971.-380p.
3. Rusov V.D., Tarasov V.A., Litvinov D.A. Theory of Beta Processes in Georeactor.-Moscow: URSS, 2008.- 320p.
4. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L. Electron- $\beta$ -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the  $\beta$ -Decay parameters// Advances in Theory of Atomic and Molecular Systems: Dynamics, Spectroscopy, Clusters and Nanostructures. Series: Progress in Theoretical Chem. and Phys. (Berlin, Springer).-2009.- Vol. 20.-P. 125-182.
5. Behrens H., Janske J. Landolt-Berstein. New series. Gr.1.V.4.: N-Y, Spriner- 1969.
6. Karpeshin F, Trzhaskovskaya M., Gangrskii Y.P. Resonance Internal Conversion in heavy Ions //JETP.-2004.-Vol.99.-P.286-289.

7. *Harston M.R., Pyper N.C.* On estimates of probabilities for beta decay of a nucleus with capture on electron shells//Phys.Rev.Lett.-1986.-Vol.56.-P.1790-1795.
8. *Band I.M., Trzhaskovskaya M.B., Nestor Jr., C.W., Tikkanen P.O., Raman S.* Dirac-Fock internal conversion coefficients// Atomic Data and Nucl Dat Tables.-2002.-Vol.81.-P.1-334.
9. *Dietz K., Hess B.A.* Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics// Phys.Scripta.-1989.-Vol.39.-P.682-688.
10. *Wilson S.* Handbook on Molecular Physics and Quantum Chemistry.-Chichester: Wiley.-2007.-700p.
11. *Grant I. P.* Relativistic quantum theory of atoms and molecules.-N.-Y.: Springer, 2007.-286p.
12. *Глушков А.В.* Релятивистские и корреляционные эффекты в спектрах атомных систем.- Одесса: Астропринт, 2006.- 400с.
13. *Glushkov A.V.* Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions// Low Energy Antiproton Phys.-2005.-Vol.796.-P.206-210.
14. *Glushkov A.V., Ivanov L.N.* Radiation decay of atomic states: atomic residue and gauge noninvariant contributions//Phys.Lett.A.-1992.-V.170.-P.33-37.
15. *Glushkov A.V., Makarov I.T., Nikiforova E., Pravdin M., Sleptsov I.* Muon component of EAS with energies above  $10^{17}$  eV// Astroparticle Physics.-1995.-Vol.4.-P. 15-22.
16. *Glushkov A.V., Rusov V.D., Ambrosov S.V., Loboda A.V.* Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions //New Projects and New Lines of research in Nuclear physics. Eds. Fazio G. and Hanappe F. - Singapore : World Scientific, 2003.-P.142-154.
17. *Glushkov A.V., Dedenko L.G., Pravdin M.I., Sleptsov I.E.* Spatio-temporal structure of the muon disk at  $E_0 \geq 5 \times 10^{16}$  eV from EAS array data//JETP.-2004.-Vol.99.-P.123-132.
18. *Malinovskaya S.V., Dubrovskaya Yu.V., Zelentzova T.N.* The atomic chemical environment effect on the  $\beta$  decay probabilities: Relativistic calculation//Вісник Київського ун-ту.Сер фіз.-мат.-2004.-№4 .-С.427-432.
19. *Glushkov A.V., Dubrovskaya Yu.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V., Vitavetskaya L.A.* Consistent quantum theory of cooperative muon-nuclear processes // Recent Advances in Theory of Phys. and Chem. Systems. Series: Progress in Theoretical Chem. and Phys. (Berlin, Springer).-2006.-Vol.15.-P.301-328.
20. *Дубровская Ю.В.* Новый численный подход к вычислению функции Ферми//Вестник Одесского гос. экологического ун-та.-2009.-N7.-P.236-240.

**Розрахунок інтегральної функції Фермі в теорії бета - розпаду при різних визначеннях шуканої функції. Дубровська Ю.В., Ігнатенко Г.В., Вітавецька Л.А.**

*У межах нового підходу до розрахунку функції Фермі в теорії бета розпаду, який базується на релятивістській теорії збурень з використанням оптимізованих базисів релятивістських дірако-фоківських функцій, отримані чисельні оцінки різниці значень функції Фермі для бета розпаду при виборі різних визначень шуканої функції (на межі ядра та поблизу нуля).*

**Ключові слова:** інтегральна функція Фермі, новий релятивістська теорія збурень

**Calculation of the integral Fermi function in a beta decay theory for different definitions of the cited function. Dubrovskaya Yu.V., Ignatenko A.V., Vitavetskaya L.A.**

*There are presented numerical estimates for difference of the Fermi function values under choice of different definitions of this function (on the boundary of a nucleus and near zero) within a new approach to calculating the Fermi function in beta decay theory, which bases on the relativistic perturbation theory with using optimized bases of relativistic Dirac-Fock functions.*

**Keywords:** integral Fermi function, relativistic perturbation theory