ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА, 2022, том 85, № 1, с. 53–65

ЯДРА

КОЭФФИЦИЕНТЫ ВНУТРЕННЕЙ КОНВЕРСИИ ДЛЯ НАБЛЮДАЕМЫХ γ-ПЕРЕХОДОВ НИЗКОЙ ЭНЕРГИИ

© 2022 г.
М. Б. Тржасковская [1)*], В. К. Никулин [2)]

Поступила в редакцию 06.07.2021 г.; после доработки 06.07.2021 г.; принята к публикации 31.07.2021 г.

Вычислены полные коэффициенты внутренней конверсии (КВК) для экспериментально наблюдаемых γ-переходов низкой энергии $E_\gamma \lesssim 10$ кэВ. Значения представлены для тех переходов, где они существенно отличаются от теоретических КВК, приведенных на веб-сайте ядерных данных Брукхейвенской лаборатории (www.nndc.bnl.gov/nudat2/ensdf/), или отсутствуют там. Выявлено более 60 таких переходов. Анализируются возможные причины ошибочных значений КВК на сайте ядерных данных. Наши расчеты выполнены методом Дирака–Фока с точным учетом обменного взаимодействия как между связанными электронами, так и между связанными и свободными электронами. Вакансия в атомной оболочке после конверсии учитывалась в приближении замороженных орбиталей. Вычисленные КВК хорошо согласуются с надежными экспериментальными данными. Рассматриваются особенности поведения парциальных и полных КВК при низких энергиях переходов.

DOI: 10.31857/S0044002722010135

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время известно значительное число ядерных изомеров и γ-переходов низкой энергии, которые активно исследуются экспериментально и теоретически. Развитие экспериментальной техники позволило повысить точность измерений конверсионной электронной спектроскопии и мессбауэровской конверсионной спектроскопии. Исследования конверсионных спектров в области низких энергий используются для определения электронной структуры вещества [1, 2], кристаллической и магнитной структуры твердых тел [3, 4], а также для изучения фазовой композиции тонких пленок [5]. Разработка ядерно-лазерных технологий дает возможность накачивать лазером изомерные состояния низких энергий [6–11]. Примерами таких изомеров являются $^{229m}_{90}$Th, имеющий энергию $E_\gamma \approx 8$ эВ [8, 9], и $^{235m}_{92}$U с энергией $E_\gamma = 76.5$ эВ [10, 11]. Изомер $^{229m}_{90}$Th с уникально низкой энергией привлекает сейчас особое внимание, так как является кандидатом на новый ядерно-оптический стандарт длины и времени, на основе которого предполагается создание в будущем ядерно-оптических часов с потенциальной погрешностью 10^{-19}–10^{-21} [12–15].

Веб-сайт ядерных данных Брукхейвенской лаборатории [16], широко используемый специалистами, содержит около двухсот переходов с энергиями $E_\gamma \lesssim 10$ кэВ, наблюдаемых экспериментально. Энергии многих из этих переходов известны с достаточно высокой точностью, определена мультипольность перехода и приведены значения коэффициентов внутренней конверсии (КВК), которые используются для анализа ядерных уровней и переходов. Так как для переходов низких энергий известно очень небольшое количество экспериментальных КВК, в [16] приведены теоретические значения полных КВК со ссылкой на [17, 18].

Веб-сайт [18], описание которого дано в работе [17], дает возможность получить значения КВК, рассчитанные с помощью нашего компьютерного кода RAINE [19, 20].

В настоящее время код RAINE позволяет вычислить наиболее точные значения КВК, хорошо согласующиеся с надежными экспериментальными данными. Вычисления проводятся релятивистским методом Дирака–Фока (ДФ) [21] с точным учетом обменного взаимодействия как между связанными электронами, так и между связанными и свободными электронами. Учитывается вакансия в атомной оболочке, на которой произошла конверсия.

Таблицы КВК [20] вычислены методом ДФ, но без учета вакансии. Расчеты КВК с учетом и без учета вакансии сравнивались в работах [20, 22] с имеющимися тогда экспериментальными данными, измеренными с точностью, лучшей, чем 5%. Сравнение показало, что расчеты без учета вакансии

[1)] НИЦ "Курчатовский институт" — ПИЯФ, Гатчина, Россия.
[2)] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия.
[*] E-mail: trzhask@thd.pnpi.spb.ru

лучше согласуются с экспериментом в среднем по всем рассматриваемым переходам. Однако в последнее время был выполнен обширный цикл прецизионных экспериментов [23–30] с целью проверки теоретических предположений при расчете КВК. Результаты показали, что КВК, вычисленные методом ДФ с учетом вакансии, прекрасно, в большинстве случаев с точностью, лучшей, чем 1%, согласуются с этими экспериментальными данными.

Важно отметить, что различие между вычислениями КВК с учетом и без учета вакансии особенно велико для низких энергий конверсионного электрона. Различие тем больше, чем ниже кинетическая энергия конверсионного электрона E_k, которая равна разности энергии γ-перехода и энергии связи ε_i оболочки, на которой идет конверсия:

$$E_k = E_\gamma - \varepsilon_i. \qquad (1)$$

Так, например, различие между теоретическими значениями КВК на K-оболочке в $^{193m}_{77}$Ir при $M4$-переходе с энергией $E_k = 4.1$ кэВ, рассчитанными с учетом и без учета вакансии, превышает 10%. При этом вычисленное нами методом ДФ значение с учетом вакансии согласуется с экспериментальным КВК с точностью 0.5% [23]. Прекрасное согласие теоретических КВК на K-оболочке и полных КВК с экспериментами [23–30], выполненными для ряда элементов с атомными номерами из области $45 \leqslant Z \leqslant 80$ и для энергий конверсионных электронов от 4.1 кэВ до нескольких сотен кэВ, инициировало пересчет КВК и создание веб-интерфейса BrICC [18]. Веб-сайт [18] позволяет определить теоретические КВК путем интерполяции значений, вычисленных методом ДФ как с учетом вакансии, так и без учета, а также получить КВК, вычисленные в ранних работах [31, 32] в несколько других предположениях, в частности, с приближенным учетом обменного взаимодействия (см. [17, 22]).

Необходимо подчеркнуть, что все имеющиеся в мире систематические расчеты и таблицы включают КВК для переходов с кинетической энергией электрона $E_k \gtrsim 1$ кэВ [18, 20, 31–33]. Исключение составляет работа [34], в которой приводятся расчеты КВК методом ДФ для переходов с энергиями $E_\gamma \lesssim 3$ кэВ. Однако только немногие из этих переходов совпадают с рассматриваемыми в данной работе. Кроме того, уже опубликованы наши таблицы КВК при энергиях E_γ от 0.1 кэВ до 1 кэВ для элементов $10 \leqslant Z \leqslant 118$ [35]. Эти таблицы полезны, если нужно определить КВК на i-й оболочке, когда $\varepsilon_i < E_\gamma < \varepsilon_i + 1$ кэВ, или полный КВК, который включает оболочки с такой энергией связи. Однако нужно иметь в виду, что экстраполяция КВК по имеющимся значениям для более высоких энергий, и даже интерполяция, может оказаться ошибочной из-за того, что, как будет показано ниже, КВК при низких энергиях резко меняются и могут иметь резонансную структуру [36]. Мы обнаружили большое количество неверных теоретических значений полных КВК для переходов низких энергий на сайте [16]. Кроме того, для многих низкоэнергетических переходов с известными мультипольностями значения КВК отсутствуют в [16].

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы дать правильные теоретические значения полных КВК для тех переходов с энергиями $E_\gamma \lesssim 10$ кэВ, которые определены экспериментально и перечислены на сайте [16]. Мы приводим расчеты полных КВК для 63 чистых переходов и для 6 переходов смешанной мультипольности в тех случаях, когда они существенно отличаются от значений, представленных в [16], или отсутствуют там. Анализируются возможные причины расхождений. В связи с этим рассматриваются также особенности поведения КВК при низких энергиях переходов. Показано, что резкое изменение величины КВК при низких энергиях E_γ и резонансное поведение КВК являются причиной существенной зависимости низкоэнергетических КВК от деталей теоретической модели, используемой в расчетах: точного учета обмена между электронами, учета или неучета вакансии в атомной оболочке после конверсии, адекватного выбора энергии связи оболочек в случае, когда неизвестны их экспериментальные значения. Эти особенности поведения могут оказаться также причиной того, что интерполяция КВК при низких энергиях дает неверное значение.

2. МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Формулы для вычисления КВК получены на основе квантовой теории запаздывающего взаимодействия зарядов в первом неисчезающем приближении теории возмущений [37]. КВК $\alpha_i^{\tau L}$ на i-й атомной оболочке может быть записан:

$$\alpha_i^{\tau L} = \sum_{\kappa_f} |B_i^{\tau L}(\kappa_f)\, R_i^{\tau L}(\kappa_f)\,|^2, \qquad (2)$$

где τL — мультипольность ядерного перехода электрического типа ($\tau = E$) или магнитного типа ($\tau = M$), $B_i^{\tau L}(\kappa_f)$ — угловая часть матричного элемента, $R_i^{\tau L}(\kappa_f)$ — радиальная часть. Индекс i относится к начальному (связанному) состоянию электрона, а индекс f — к конечному (свободному) состоянию. Суммирование в (2) проводится по релятивистским квантовым числам κ_f конечного состояния, $\kappa = (\ell - j)(2j + 1)$, где ℓ и j — орбитальный и полный моменты электрона. Моменты

конечного состояния электрона подчиняются следующим правилам отбора:

$$|L - j_i| \leqslant j_f \leqslant L + j_i, \tag{3}$$

причем $(\ell_i + \ell_f + L)$ четно для EL-переходов и нечетно для ML-переходов.

В случае EL-переходов угловая часть конверсионного матричного элемента для полностью заполненной атомной оболочки имеет вид

$$B_i^{EL}(\kappa_f) = (-1)^{j_f+\frac{1}{2}+L} \times \times C^{L0}_{\ell_i 0 \ell_f 0} W(\ell_i j_i \ell_f j_{f;\frac{1}{2}} L) \times \times \left[\pi k\alpha \frac{(2j_i+1)(2\ell_i+1)(2j_f+1)(2\ell_f+1)}{L(L+1)(2L+1)}\right]^{1/2}. \tag{4}$$

Радиальная часть записывается следующим образом:

$$R_i^{EL}(\kappa_f) = (\kappa_i - \kappa_f) \times \times (R_{1,\Lambda=L-1} + R_{2,\Lambda=L-1}) + + L(R_{2,\Lambda=L-1} - R_{1,\Lambda=L-1} + R_{3,\Lambda=L}). \tag{5}$$

В (4), k — энергия γ-кванта в единицах m_0c^2, α — постоянная тонкой структуры, $C^{L0}_{\ell_i 0 \ell_f 0}$ — коэффициент Клебша–Гордана, $W\left(\ell_i j_i \ell_f j_{f;\frac{1}{2}} L\right)$ — коэффициент Рака. В этих вычислениях мы используем релятивистские единицы, где единицей длины является комптоновская длина волны электрона $\hbar/m_0c$, а единицей энергии — энергия покоя электрона m_0c^2.

Для ML-переходов соответствующие выражения записываются в виде

$$B_i^{ML}(\kappa_f) = (-1)^{j_f+\frac{1}{2}+L} \times \times C^{L0}_{\ell_i 0 \bar{\ell}_f 0} W\left(\ell_i j_i \bar{\ell}_f j_{f;\frac{1}{2}} L\right) \times \times \left[\pi k\alpha \frac{(2j_i+1)(2\ell_i+1)(2j_f+1)(2\bar{\ell}_f+1)}{L(L+1)(2L+1)}\right]^{1/2}, \tag{6}$$

где $\bar{\ell}_f = 2j_f - \ell_f$, и

$$R_i^{ML}(\kappa_f) = (\kappa_i + \kappa_f)(R_{1,\Lambda=L} + R_{2,\Lambda=L}). \tag{7}$$

Радиальные интегралы, входящие в (5) и (7), определяются следующим образом:

$$R_{1,\Lambda} = \int_0^\infty G_i F_f(E_k) X_\Lambda(kr)\, dr, \tag{8}$$

$$R_{2,\Lambda} = \int_0^\infty F_i G_f(E_k) X_\Lambda(kr)\, dr, \tag{9}$$

$$R_{3,\Lambda} = \int_0^\infty [G_i G_f(E_k) + + F_i F_f(E_k)] X_\Lambda(kr)\, dr. \tag{10}$$

Так как формулы для угловых матричных элементов (4) и (6) записаны для полностью заполненной оболочки i, полный КВК определяется суммированием парциальных КВК для всех занятых оболочек атома в виде

$$\alpha^{\tau L}_{\text{tot}} = \sum_i \frac{q_i}{2j_i+1} \alpha_i^{\tau L}, \tag{11}$$

где q_i — число заполнения оболочки.

Конечные размеры ядра учитываются в модели поверхностных токов Слива [38].

В соответствии с этой моделью ядро предполагается сферическим, и внутри ядра действует потенциал однородно заряженной сферы. Радиальная часть этого потенциала имеет вид

$$X_\Lambda(kr) = \begin{cases} j_\Lambda(kr)\, h_\Lambda(kR_0)/j_\Lambda(kR_0) \\ \text{для} \quad r \leqslant R_0, \\ h_\Lambda(kr) \quad \text{для} \quad r > R_0, \end{cases} \tag{12}$$

где $j_\Lambda(x)$ и $h_\Lambda(x)$ — сферические функции Бесселя и Ханкеля соответственно. Радиус сферического ядра R_0 может быть вычислен в единицах Ферми следующим образом:

$$R_0 = 1.2A^{1/3}, \tag{13}$$

где A — массовое число.

Радиальные функции $G(r) = rg(r)$ и $F(r) = rf(r)$ представляют собой домноженные на r большую и малую компоненты релятивистской электронной волновой функции. Связанные и свободные состояния электрона рассчитываются методом ДФ с точным учетом обменного взаимодействия между электронами [20, 22]. Волновые функции связанного состояния G_i и F_i вычисляются в самосогласованном ДФ поле нейтрального атома, а волновые функции свободного состояния $G_f(E_k)$ и $F_f(E_k)$ — в ДФ поле иона с вакансией в той оболочке, на которой произошла конверсия. Вакансия учитывается в так называемом приближении замороженных орбиталей, т.е. волновая функция свободного электрона вычисляется в поле иона, но не самосогласованном, а построенном по волновым функциям нейтрального атома без учета функции удаленного электрона. Это соответствует предположению, что вакансия после конверсии образуется, но атомные оболочки не успевают перестроиться после излучения электрона.

Волновые функции свободного состояния вычисляются при энергии, равной кинетической энергии конверсионного электрона E_k. При расчете E_k

в формуле (1) используются экспериментальные значения энергий связи ε_i для элементов $Z \leqslant 95$, приведенные в [17]. Для элементов $Z \geqslant 96$ мы вычисляли в этой работе энергию связи ε_i как разность между полными энергиями нейтрального атома и иона с вакансией в i-й оболочке

$$\varepsilon_i^{(\mathrm{theor})} = -\left[E_{\mathrm{tot}}\,(\mathrm{atom}) - E_{\mathrm{tot}}^{(i)}\,(\mathrm{ion})\right]. \qquad (14)$$

Полные энергии E_{tot} атома и иона определялись самосогласованным методом ДФ, включая магнитное взаимодействие Брейта [39].

Сравним результаты расчетов КВК, полученных, используя описанные выше методы и формулы, с экспериментальными данными. Из-за отсутствия надежных экспериментальных значений КВК для переходов с энергиями $E_\gamma \lesssim 10$ кэВ, в табл. 1 сравниваются теоретические КВК $\alpha^{\tau L}_{\mathrm{theor}}$ с экспериментальными значениями $\alpha^{\tau L}_{\mathrm{exp}}$, измеренными с точностью лучшей, чем $\lesssim 3\%$, для переходов более высоких энергий. Таблица 1 демонстрирует, что вычисления КВК находятся в хорошем согласии с современными экспериментальными данными. Как видно, максимальное отклонение теоретических КВК от экспериментальных $\bar{\Delta} = -3.0\%$ для полного КВК при $E3$-переходе в $^{111}_{48}$Cd, а в большинстве случаев $\bar{\Delta} \lesssim 1\%$. Совпадение с экспериментом для переходов сравнительно низких энергий подтверждает справедливость теоретической модели, используемой в вычислениях, и дает основание полагать, что эта модель может быть использована при вычислении КВК для переходов с энергиями $E_\gamma \lesssim 10$ кэВ.

3. ОСОБЕННОСТИ КВК ПРИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЯХ γ-ПЕРЕХОДА

Как известно, величина КВК для переходов с энергиями $E_k \gtrsim 1$ кэВ обычно плавно уменьшается с увеличением энергии перехода [20]. Исключение составляют КВК на ns-оболочках ($n \geqslant 2$) легких и средних элементов $Z \lesssim 50$ для $E2$–$E5$-переходов [41, 42]. В этих случаях зависимость $\alpha^{EL}_{ns}(E_\gamma)$ имеет один минимум при $E_\gamma \lesssim 100$ кэВ.

Более выраженная резонансная структура КВК с несколькими минимумами была обнаружена для значительного числа случаев при низких энергиях перехода $0.01 \lesssim E_\gamma \lesssim 10$ кэВ [36]. В этой области резонансная структура характерна для КВК на ns-оболочках ($n \geqslant 2$) легких и средних элементов при всех электрических переходах $E1$–$E5$, а при $E1$-переходе также и для тяжелых атомов ($Z \lesssim 100$). При $E1$-переходе существует один минимум в КВК $\alpha^{E1}(E_\gamma)$ на np-оболочках ($n \geqslant 3$) и nd-оболочках ($n \geqslant 4$) всех элементов, включая сверхтяжелые.

Поведение КВК $\alpha^{EL}(E_\gamma)$ представлено на рис. 1 для переходов $E1$–$E5$ в $^{99}_{43}$Tc для N_1-оболочки (рис. 1*а*), O_1-оболочки (рис. 1*б*), а также для $E1$-перехода при конверсии на N_3-, N_4- и N_5-оболочках (рис. 1*в*). Как видно из рис. 1*а* и 1*б*, все рассматриваемые зависимости $\alpha^{EL}_{ns}(E_\gamma)$ имеют один или более минимумов, причем их количество увеличивается с увеличением мультипольности перехода L. Значения КВК в минимуме могут уменьшаться существенно, иногда более чем на порядок величины. В работе [36] показано, что чем легче элемент, тем глубже минимумы в КВК на ns-оболочках. Для КВК на np- и nd-оболочках, наоборот, минимумы становятся глубже для тяжелых элементов. Поэтому КВК, которые находятся путем интерполяции или экстраполяции для указанных оболочек и переходов, могут оказаться неверными. На рис. 1 видно также, что КВК в области $E_\gamma \lesssim 1$ кэВ резко убывают на несколько порядков величины с увеличением энергии. При дальнейшем увеличении E_γ КВК убывают значительно медленнее.

Следы резонансного поведения парциальных КВК остаются также в полных КВК. Однако здесь они почти незаметны из-за пилообразного вида кривой $\alpha^{\tau L}_{\mathrm{tot}}(E_\gamma)$, максимумы которой соответствуют энергиям, где в полный КВК при увеличении энергии включаются более внутренние оболочки. На рис. 2 представлена зависимость полного $\alpha^{E1}_{\mathrm{tot}}(E_\gamma)$ для $^{99}_{43}$Tc. Все хорошо определенные максимумы и минимумы связаны с оболочечной структурой атома. Как видно, в низкоэнергетической области их значительно больше, чем при более высоких энергиях. Только некоторые малозаметные изгибы остаются от резонансной структуры парциальных КВК, представленных на рис. 1. Например, можно увидеть изгиб при $E_\gamma \lesssim 0.2$ кэВ, где КВК при $E1$-переходе на N_4- и N_5-оболочках имеют выраженный минимум. Эти оболочки вносят небольшой, но заметный вклад в $\alpha^{E1}_{\mathrm{tot}}$.

Следует заметить, что полный КВК при низких энергиях нельзя определять путем интерполяции именно из-за нескольких резких изменений, связанных со структурой внешних оболочек атома. Интерполироваться, а затем суммироваться должны именно парциальные КВК, но это не всегда возможно из-за их резонансной структуры. На рис. 2 также ясно видно, что полный КВК при низких энергиях перехода $E_\gamma \lesssim 1$ кэВ уменьшается с увеличением энергии более чем на 5 порядков величины, тогда как при дальнейшем увеличении энергии на 1 кэВ α_{tot} убывает только в несколько раз.

Такое поведение КВК при низких энергиях перехода приводит к существенному влиянию на величину КВК теоретической модели, используемой

Таблица 1. Сравнение теоретических $\alpha^{\tau L}_{\rm theor}$ и экспериментальных $\alpha^{\tau L}_{\rm exp}$ значений полных КВК и КВК для K-оболочки; различие $\bar{\Delta} = [(\alpha^{\tau L}_{\rm exp} - \alpha^{\tau L}_{\rm theor})/\alpha^{\tau L}_{\rm exp}] \times 100\%$

Z	Ядро	E_γ, кэВ	τL	$\alpha^{\tau L}_{\rm theor}$	$\alpha^{\tau L}_{\rm exp}$	$\bar{\Delta}$, %
41	^{93}Nb*	30.8760 *5*	$M4$	2.540(4)**	2.537(4) *94* [30]	−0.1
45	^{103}Rh***	39.752 *6*	$E3+M4$	1426	1428.0 *13* [29]	0.1
47	^{109}Ag	88.034 *2*	$E3$	26.34	26.4 *4* [40]	0.2
48	^{111}Cd*	150.853 *15*	$E3$	1.451	1.449 *18* [26]	−0.1
48	^{111}Cd	150.853 *15*	$E3$	2.284	2.217 *26* [26]	−3.0
50	^{117}Sn	156.02 *3*	$M4$	46.96	46.40 *25* [20]	−1.2
50	^{119}Sn*	65.660 *10*	$M4$	1618	1621.0 *25* [25]	0.2
52	^{125}Te*	109.276 *15*	$M4$	185.2	185.0 *40* [28]	−0.1
52	^{125}Te	109.276 *15*	$M4$	355.6	350.0 *38* [28]	−1.6
52	^{127}Te*	88.2 *7*	$M4$	486.4	484.0 *6* [27]	−0.5
62	^{154}Sm	81.976 *18*	$E2$	4.869	4.83 *11* [20]	−0.8
64	^{160}Gd	75.26 *1*	$E2$	7.333	7.41 *21* [20]	1.0
66	^{164}Dy	73.392 *5*	$E2$	8.896	8.92 *19* [20]	0.3
70	^{174}Yb	76.471 *1*	$E2$	9.303	9.08 *35* [20]	−2.4
77	^{193}Ir*	80.22 *2*	$M4$	102.5	103.0 *1* [23]	0.5
77	^{193}Ir	80.22 *2*	$M4$	2.113(4)	2.13(4) *4* [23]	0.8
90	^{230}Th	53.20 *2*	$E2$	228.0	229.0 *7* [20]	0.4
94	^{240}Pu	42.824 *8*	$E2$	906.1	904.0 *30* [20]	−0.2

Примечания:
* КВК даны для K-оболочки. В остальных случаях сравниваются полные КВК.
** В скобках указан десятичный порядок числа, т.е. $2.540(4) = 2.540 \times 10^4$.
*** Для смешанного перехода в $^{103}_{45}$Rh коэффициент смеси $\delta_{\rm mix} = 0.02$.

в расчетах. Так КВК на отдельных оболочках, рассчитанные методом ДФ с точным учетом обмена, при низких энергиях могут значительно, в насколько раз, отличаться от соответствующих значений, полученных методом Дирака–Слейтера (ДС) [34], где обмен между электронами учитывается приближенно [31–33]. Это различие проявляется, хотя и в меньшей степени, также в полных КВК.

На рис. 3 представлены полные КВК, вычисленные методом ДФ и методом ДС, в $^{93}_{43}$Tc для $E1$-перехода (рис. 3*а*), а также в $^{154}_{63}$Eu для $M1$-перехода (рис. 3*б*) и для $E2$-перехода (рис. 3*в*). Обозначим различие между этими двумя вычислениями $\Delta_{\rm DF}$, где

$$\Delta_{\rm DF} = \{[\alpha^{\tau L}_{\rm tot}({\rm DF}) - \alpha^{\tau L}_{\rm tot}({\rm DS})]/\alpha^{\tau L}_{\rm tot}({\rm DF})\} \times 100\%. \quad (15)$$

Для $E1$-перехода в $^{93}_{43}$Tc это различие составляет $\Delta_{\rm DF} = -196\%$ при низкой энергии $E_\gamma = 0.01$ кэВ, $\Delta_{\rm DF} = +32\%$ при $E_\gamma = 0.1$ кэВ, и $\Delta_{\rm DF} = -13\%$ при энергии экспериментального перехода $E_\gamma = 0.31$ кэВ (см. табл. 2). Для $^{154}_{63}$Eu и $M1$-перехода различия при энергиях $E_\gamma = 0.01$ кэВ, $E_\gamma = 0.1$ кэВ и экспериментальной энергии $E_\gamma = 0.91$ кэВ составляют соответственно −104%, −33% и −3%. В случае $E2$-перехода в $^{154}_{63}$Eu различия $\Delta_{\rm DF}$ при тех же энергиях равны −37%, −55% и −12%. Таким образом, при низких энергиях точный учет обменного взаимодействия может очень существенно влиять на величину не только парциальных, но и полных КВК. Как видно из рис. 3, отличия $\Delta_{\rm DF}$ ведут себя немонотонно, они особенно велики при очень низких энергиях в области $E_\gamma \lesssim 1$ кэВ и уменьшаются при последующем увеличении энергии.

Как отмечалось выше, различие в КВК, вычисленных с учетом вакансии в оболочке, где произошла конверсия $\alpha^{\tau L}_i(h)$, и без учета вакансии

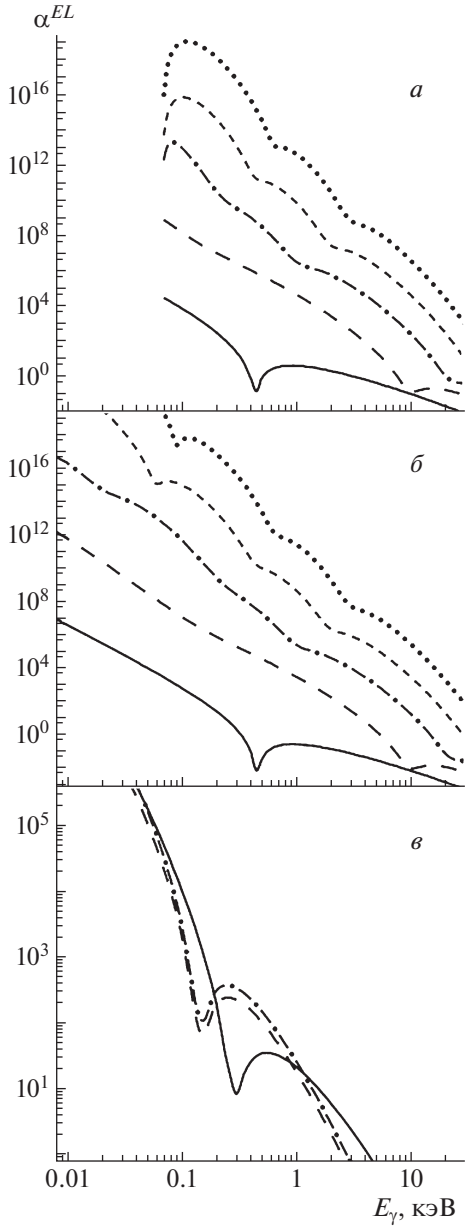

Рис. 1. КВК для электрических переходов в $^{99}_{43}$Tc. *а* — КВК для EL-переходов на N_1-оболочке, *б* — КВК для EL-переходов на O_1-оболочке. Кривые: сплошная — $E1$-переход, штриховая — $E2$, штрихпунктирная — $E3$, штриховая с короткими штрихами — $E4$, точечная — $E5$-переход. *в* — КВК для $E1$-перехода на N_3 — (сплошная), N_4 — (штриховая) и N_5-оболочке (штрихпунктирная).

$\alpha_i^{\tau L}(nh)$, могут достигать 10% при энергиях конверсионного электрона $E_k \gtrsim 1$ кэВ. В области низких энергий перехода это различие может быть значительно больше как для парциальных, так и для полных КВК. Различие в КВК из-за учета вакансии Δ_h записывается в виде

$$\Delta_h^i = \{[\alpha_i^{\tau L}(h) - \alpha_i^{\tau L}(nh)]/\alpha_i^{\tau L}(h)\} \times 100\%. \quad (16)$$

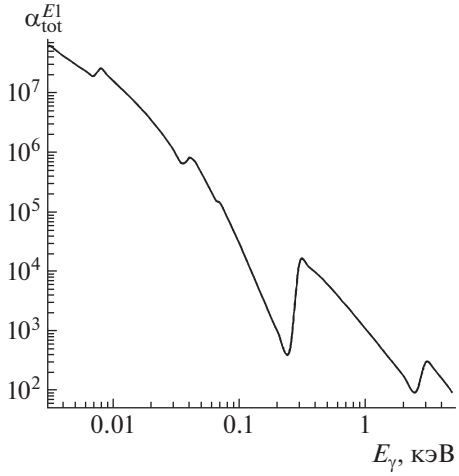

Рис. 2. Полный КВК для $E1$-перехода в $^{99}_{43}$Tc.

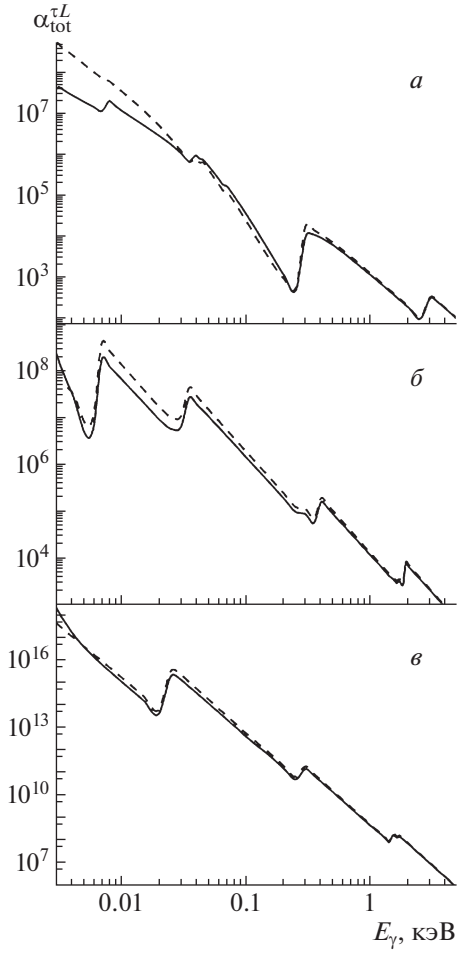

Рис. 3. Полные КВК $\alpha_{\rm tot}^{\tau L}$, вычисленные методом ДФ (сплошные кривые) и методом ДС (штриховые). *а* — $E1$-переход в $^{99}_{43}$Tc; *б* — $M1$-переход в $^{154}_{63}$Eu; *в* — $E2$-переход в $^{154}_{63}$Eu.

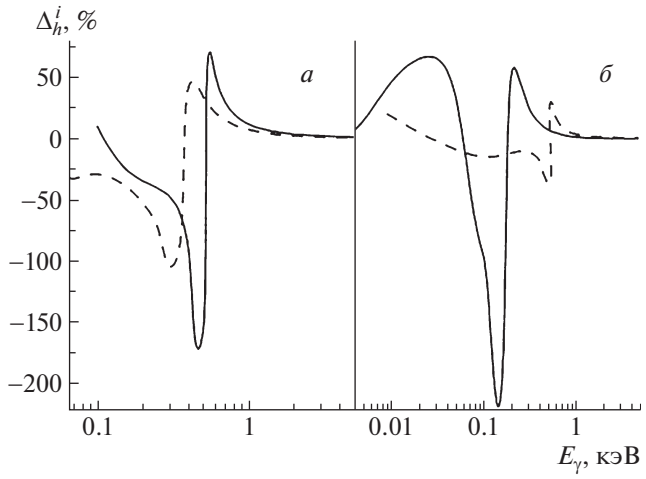

Рис. 4. Различие Δ_h^i (в %) (16) в парциальных КВК α_i^{E1} для N- и O-оболочек в $^{110}_{47}$Ag при $E1$-переходе, вычисленных с учетом и без учета вакансии в атомной оболочке после конверсии. Вычисления выполнены ДФ методом. Вакансия учитывалась в приближении замороженных орбиталей. *а* — $\Delta_h^{N_1}$ (сплошная кривая) и $\Delta_h^{N_2}$ (штриховая); *б* — $\Delta_h^{N_4}$ (сплошная кривая) и $\Delta_h^{O_1}$ (штриховая).

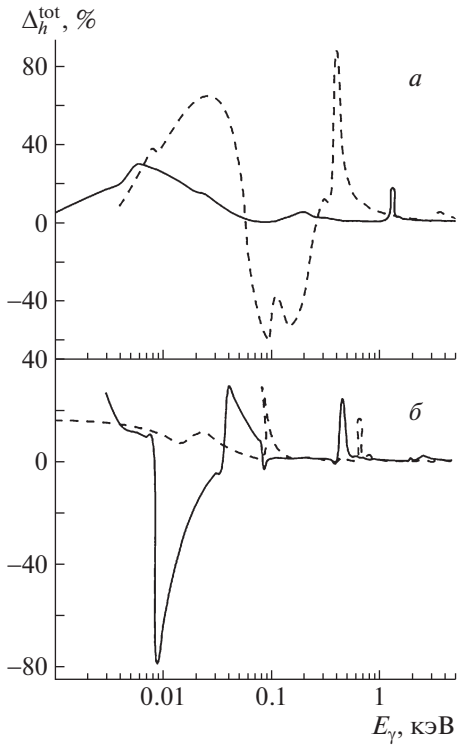

Рис. 5. Различие $\Delta_h^{\rm tot}$ (в %) (16) в полных КВК $\alpha_{\rm tot}$, вычисленных с учетом и без учета вакансии в атомных оболочках после конверсии. Вычисления выполнены ДФ методом. Вакансия учитывалась в приближении замороженных орбиталей. *а* — $^{78}_{31}$Ga, $M2$-переход (сплошная кривая) и $^{110}_{47}$Ag, $E1$-переход (штриховая); *б* — $^{188}_{75}$Re, $M3$-переход (сплошная кривая) и $^{205}_{82}$Pb, $E2$-переход (штриховая).

На рисунке 4 приведены различия Δ_h^i для оболочек атома $^{110}_{47}$Ag при $E1$-переходе. Рисунок показывает, что эти различия могут быть очень велики и достигать более чем −200%, как, например, в случае N_4-оболочки. Обычно такие большие различия между расчетами с вакансией и без нее случаются вблизи резонансов в КВК $\alpha_i^{EL}(E_\gamma)$. Для N_1-, N_2-, N_4-, O_1-оболочек, приведенных на рис. 4, области резонансов располагаются в районе энергий $E_\gamma = 0.55$, 0.45, 0.2, 0.55 кэВ соответственно. Отличия Δ_h^i имеют минимумы и максимумы приблизительно при таких же значениях E_γ.

Полные КВК, вычисленные с учетом вакансии и без учета, тоже могут существенно различаться. На рис. 5 приведены различия $\Delta_h^{\rm tot}$ в полных КВК в $^{78}_{31}$Ga при $M2$-переходе, в $^{110}_{47}$Ag при $E1$-переходе, в $^{188}_{75}$Re при $M3$-переходе и в $^{205}_{82}$Pb при $E2$-переходе. Рисунок 5 показывает, что различие $\Delta_h^{\rm tot}$ может изменяться от ∼−60% до ∼+90% в случае $^{110}_{47}$Ag при $E1$-переходе и достигать ∼−80% в случае $^{188}_{75}$Re при $M3$-переходе. Эти различия связаны, в основном, с пилообразной формой зависимости полного КВК от энергии E_γ.

Кроме того, КВК при низких энергиях E_k могут различаться в зависимости от того, какое значение энергии связи используется для i-й оболочки. Как указано выше, мы используем экспериментальные значения для $Z \leqslant 95$ [17]. Для элементов $Z \geqslant 96$ энергия связи вычислялась по формуле (14) с учетом взаимодействия Брейта. Расчеты показали, что, например, для внешних оболочек атома урана отличие экспериментальных энергий связи от вычисленных составляет от 8 до 30%. При этом полный КВК для $^{235}_{92}$U при экспериментальной энергии $E3$-перехода $E_\gamma = 0.0765$ кэВ (см. табл. 2), вычисленный с экспериментальными энергиями связи и рассчитанными по формуле (14), различаются всего на 0.5%. Энергии связи для самых внешних $6d_{3/2}$- и $7s$-оболочек атома тория $^{229}_{90}$Th, определенные с помощью (14), отличаются от экспериментальных значений на ∼11%, а отличие в полных КВК как для $M1$-, так и для $E2$-перехода при энергии $E_\gamma = 0.0076$ кэВ, рассчитанных с вычисленными и экспериментальными энергиями связи, составляет $\lesssim 1\%$.

Парциальные КВК при очень низких энергиях E_k могут отличаться более значительно, однако это отличие уменьшается быстро с увеличением энергии. Например, как показывает табл. 3, различие в 13% между экспериментальной и вычисленной энергиями связи для P_1-оболочки урана

Таблица 2. Сравнение полных КВК $\alpha_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma)$, вычисленных в данной работе для экспериментально определенных переходов, и КВК $\tilde{\alpha}_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma)$, приведенных в [16]

Z	Ядро	E_γ, кэВ	τL	$\alpha_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma-\delta)$	$\alpha_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma)$	$\alpha_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma+\delta)$	$\tilde{\alpha}_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma)$ [16]	Δ, %
23	^{45}V	0.8	$M1$		2.828(3)*			
	^{45}V	0.8	$E2$		2.170(8)			
29	^{75}Cu	4.5 *6***	$M1$	73.77	48.07	33.05	54.0 *20*	−12
31	^{74}Ga	3.2 *2*	$M2$	3.928(5)	2.884(5)	2.158(5)	2.9(5) *11*	−0.6
37	^{84}Rb	3.4	$M1$		360.9		361	0.0
41	^{90}Nb	2.3 *4*	$M2$	4.270(6)	1.673(6)	3.861(6)	39	−79
	^{90}Nb	2.3 *4*	$E3$	2.320(10)	6.688(9)	9.273(9)		
43	^{93}Tc	0.31 *2*	$E1$	1.433(4)	1.431(4)	1.336(4)		
	^{99}Tc	2.1726 *4*	$E3$	1.361(10)	1.360(10)	1.358(10)	1.4(10)	−2.9
46	^{106}Pd	6.0 *1*	$E2$	6.242(6)	2.492(6)	1.145(6)		
47	^{110}Ag	1.112 *16****	$E1$	1081	1041	1004	933.0 *66*	10
48	^{110}Cd	1.60 *10*	$M1$	2915	2405	2009		
	^{121}Cd	7.52 *11*	$M1$	132.7	127.0	121.6		
	^{121}Cd	7.52 *11*	$E2$	1.067(5)	9.904(4)	9.204(4)		
49	^{111}In	5.0	$M1$		475.5			
	^{111}In	5.0	$E2$		8.562(5)			
51	^{129}Sb	9.76 *8*	$E2$	3.790(4)	3.636(4)	3.489(4)	3.39(4)	6.8
53	^{130}I	3.30	$M1$		505.8		563	−11
	^{130}I	3.98	$E1$		48.39		55.5	−15
	^{130}I	4.37	$M1$		218.6		242.6	−11
54	^{123}Xe	4.6	$E1$		34.33		39.0	−14
55	^{129}Cs	6.545 *1*	$E2$	4.016(5)	4.013(5)	4.010(5)	4.32(5)	−7.6
56	^{141}Ba	6.469 *50*	$M1$	467.1	457.0	444.1	482	−5.5
59	^{142}Pr	3.683 *4*	$M3$	1.178(10)	1.169(10)	1.160(10)	1.17(1)****	0.0
62	^{153}Sm	7.535 *5*	$M1$	157.3	157.0	156.7	200	−27
63	^{154}Eu	0.91	$M1$		1.452(4)			
	^{154}Eu	0.91	$E2$		6.838(8)			
	^{154}Eu	8.6	$E3$		7.595(7)		≈5.6(7)	26
	^{154}Eu	3.99	$E1$		72.52			
64	^{157}Gd	9.365 *12*	$E1$	33.65	33.53	33.42	30.8	8.1
66	^{148}Dy	10.0	$E1$		29.68		27.0	9.0
67	^{156}Ho	8.72 *5*	$E1$	28.56	28.14	27.73	11	61
	^{162}Ho	9.80 *5*	$E3$	4.918(7)	4.769(7)	4.625(7)		
	^{163}Ho	9.8	$M1$		387.6		98.3	75
68	^{169}Er	10.0 *1*	$M1$	409.3	399.1	388.9	69.1	83
69	^{161}Tm	7.4	$M3$		4.475(8)			
	^{163}Tm	9.74 *5*	$E2$	1.843(5)	1.806(5)	1.766(5)	1.32(5)	27

Таблица 2. Окончание

Z	Ядро	E_γ, кэВ	τL	$\alpha_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma-\delta)$	$\alpha_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma)$	$\alpha_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma+\delta)$	$\tilde{\alpha}_{\rm tot}^{\tau L}(E_\gamma)$ [16]	Δ, %
71	^{173}Lu	4.670 *8*	$E2$	2.033(6)	2.016(6)	1.998(6)	2.18(6)	−8.1
73	^{181}Ta	6.240 *20*	$E1$	30.30	30.04	29.78	70.5 *25*	−135
	^{181}Ta	3.90 *10*	$M1$	2651	2454	2277	2684	−9.4
75	^{188}Re	2.636 *3*	$M3$	1.158(12)	1.149(12)	1.140(12)	1.6(12) *5*	−39
77	^{185}Ir	5.8 *1*	$E2$	1.246(6)	1.143(6)	1.050(6)	1.22(6)	−6.7
78	^{193}Pt	1.642 *2*	$M1$	1.220(4)	1.216(4)	1.211(4)	3116	74
79	^{184}Au	3.4 *2*	$M1$	2534	2130	5584		
	^{189}Au	8.9	$E2$		1602.0(5)			
82	^{192}Pb	7.2	$M1$		976.2			
	^{192}Pb	7.2	$E2$		5.934(5)			
	^{203}Pb	4.9	$E3$		6.613(9)		5.9(9)	11
	^{205}Pb	2.328 *7*	$E2$	3.816(7)	3.759(7)	3.703(7)	3.76(7) *8*	0.0
84	^{207}Po	3.4	$M1$		2.809(3)			
	^{208}Po	4.02 *3*	$E2$	1.292(7)	1.247(7)	1.204(7)	3.30(6)	74
85	^{205}At	8.5 *5*	$E2$	4.524(6)	3.347(6)	2.519(6)		
86	^{219}Rn	4.4 *10*	$E2$	8.820(6)	9.436(6)	3.464(6)	4.34(6)	54
87	^{227}Fr	2.74	$E1$		77.30		74.5	3.6
89	^{223}Ac	8.0	$M1$		1451			
90	^{229}Th	0.0076 *5*	$M1$	1.682(9)	1.378(9)	1.144(9)		
	^{229}Th	0.0076 *5*	$E2$	1.717(16)	1.230(16)	8.984(15)		
91	^{233}Pa	6.68 *5*	$M1$	3115	3047	2980		
92	^{235}U	0.0765 *4*	$E3$	2.765(20)	2.666(20)	2.571(20)	>1.(10)	
94	^{239}Pu	4.2	$E1$		120.5			
97	^{250}Bk	1.12	$E1$		968.0			
	^{250}Bk	8.0	$E2$		1.238(6)		1.3(6)	−5.0
100	^{251}Fm	3.4 *3*	$M1$	2.112(4)	1.604(4)	1.247(4)	1.6(4) *5*	0.2

Примечания:
*В скобках указан десятичный порядок числа, т.е. $2.828(3) = 2.828 \times 10^3$.
** Если известны неопределенности энергий перехода δ, приводятся три значения КВК.
*** В [16], видимо, перепутаны энергии перехода, и КВК приведен для $E_\gamma = 1.16$ кэВ.
**** В [16] допущена опечатка в порядке величины КВК: указано 10^1 вместо 10^{10}.

$^{235}_{92}$U дает разницу в КВК $\alpha_{P_1}^{E3}$ при $E_\gamma = 0.06$ кэВ, равную 31%, но при $E_\gamma = 0.08$ кэВ эта разница уменьшается до 2.8%. Однако различие в энергиях связи парциальных КВК может изменить значение полного КВК, если энергия перехода E_γ окажется достаточно близка к энергии связи оболочки, вносящей значительный вклад в $\alpha_{\rm tot}$.

Таким образом, рассмотренные особенности поведения КВК при низких энергиях перехода E_γ, т.е. резонансная структура и резкое падение при увеличении энергии, приводят к усилению зависимости теоретических значений КВК от модели, лежащей в основе вычислений. Это требует осторожности при интерполяции и, тем более, при экстраполяции КВК. Поэтому в области низких энергий лучше всего использовать прямые вычисления, выполненные в адекватной модели.

Таблица 3. Различие $\Delta_\varepsilon = \{[\alpha^{E3}_{P_1}(\varepsilon_{\rm exp}) - \alpha^{E3}_{P_1}(\varepsilon_{\rm theor})]/\alpha^{E3}_{P_1}(\varepsilon_{\rm exp})\} \times 100\%$ между КВК на P_1-оболочке урана $^{235}_{92}$U при $E3$-переходе, рассчитанными с экспериментальной энергией связи $\varepsilon_{\rm exp} = 0.0495$ кэВ и теоретической $\varepsilon_{\rm theor} = 0.0561$ кэВ, вычисленной по формуле (14)

E_γ, кэВ	Δ_ε, %
0.060	31
0.065	15
0.070	7.3
0.075	4.3
0.080	2.8
0.090	1.3
0.100	0.8
0.300	0.4
0.600	0.3
1.000	0.2

4. ПОЛНЫЕ КВК ДЛЯ НАБЛЮДАЕМЫХ ПЕРЕХОДОВ НИЗКОЙ ЭНЕРГИИ

Мы представляем теоретические значения полных КВК для экспериментально наблюдаемых γ-переходов низкой энергии, для которых определены энергии и мультипольности [16]. Эти значения вычислены с использованием модели, описанной выше. Приводятся КВК для чистых (табл. 2) и смешанных (табл. 4) переходов с энергиями $E_\gamma \lesssim 10$ кэВ, если они отсутствуют на сайте [16] или существенно отличаются от представленных там. Кроме того, приводятся значения КВК для всех переходов с энергиями $E_\gamma \lesssim 5$ кэВ, даже если они согласуются с данными [16], так как вычисленные КВК являются более точными. Если в [16] указаны неопределенности δ энергий перехода, мы приводим три вычисленных значения КВК, так как неопределенности для многих низкоэнергетических переходов велики, а КВК, как показано выше, резко меняются в этой области энергий.

Напомним, что полные КВК, приведенные в [16], являются теоретическими значениями, полученными с помощью сайта [18], т.е. путем интерполяции по значениям, рассчитанным, используя код RAINE [19, 20]. Однако, так как [18] не позволяет получить КВК, если энергия $E_k \leqslant 1$ кэВ, значения полных КВК для переходов низких энергий в [16] во многих случаях оказываются неверными. В табл. 2 и 4 приведено различие Δ между КВК $\alpha^{\tau L}_{\rm tot}(E_\gamma)$, вычисленными в настоящей работе, и значениями $\tilde\alpha^{\tau L}_{\rm tot}(E_\gamma)$ из [16]:

$$\Delta = [(\alpha^{\tau L}_{\rm tot} - \tilde\alpha^{\tau L}_{\rm tot})/\alpha^{\tau L}_{\rm tot}] \times 100\%. \qquad (17)$$

Как показывает табл. 2, из 63 переходов мы приводим КВК только для пяти переходов с энергиями $E_\gamma \lesssim 5$ кэВ, где $\Delta \lesssim 1\%$. Данные для 28 переходов отсутствуют в [16]. Для остальных 30 переходов из табл. 2 различие Δ изменяется от -135% до $+83\%$.

В случаях, где $\tilde\alpha^{\tau L}_{\rm tot}$ меньше $\alpha^{\tau L}_{\rm tot}$, т.е. $\Delta > 0$, различие обычно связано с тем, что значения КВК для какой-то оболочки или для нескольких оболочек не учитывались в [16], так как для них $E_k \lesssim 1$ кэВ. Например, для $E3$-перехода с энергией $E_\gamma = 8.6$ кэВ в $^{154}_{63}$Eu при определении полного КВК опущен вклад L_1- и L_2-оболочек, что привело к ошибке в 26%. Неучет этих же оболочек в $^{169}_{68}$Er при вычислении КВК для $M1$-перехода с энергией $E_\gamma = 10.0$ кэВ дает ошибку $\Delta = 83\%$. Ошибка $\Delta = 74\%$ возникла в полном КВК при переходе $E2$ с энергией $E_\gamma = 4.02$ кэВ в $^{208}_{84}$Po, так как там были опущены КВК для M_2–M_5-оболочек, которые нельзя получить на сайте [18]. При определении полного КВК для $E1$-перехода с энергией $E_\gamma = 1.112$ кэВ в $^{110}_{47}$Ag, где $\Delta = 10\%$, по-видимому, были перепутаны энергии перехода, и результат приведен для $E_\gamma = 1.16$ кэВ.

Труднее объяснить различие, если неверное значение КВК $\tilde\alpha^{\tau L}_{\rm tot}$ больше $\alpha^{\tau L}_{\rm tot}$. Например, в случае $^{130}_{53}$I для трех переходов: $M1$ с энергией $E_\gamma = 3.30$ кэВ, $E1$ с энергией $E_\gamma = 3.98$ кэВ и $M1$ с $E_\gamma = 4.37$ кэВ отличия составляют $\Delta = -11\%$, -15% и -11% соответственно (см. табл. 2), хотя для всех этих переходов сайт [18] дает правильные значения КВК для всех оболочек. Аналогично, в случае $^{181}_{73}$Ta при $E1$-переходе с энергией $E_\gamma = 6.240$ кэВ значение КВК в [16] в два с лишним раза превышает вычисленное нами $\alpha^{E1}_{\rm tot}$, а в случае $^{90}_{41}$Nb при $M2$-переходе с энергией $E_\gamma = 2.3$ кэВ $\tilde\alpha^{\tau L}_{\rm tot}$ почти вдвое больше КВК, полученного нами. Непонятно, как были получены эти значения $\tilde\alpha^{\tau L}_{\rm tot}$. В перечисленных случаях не участвуют оболочки, для которых $E_k \leqslant 1$ кэВ. Для всех переходов низких энергий в [16] стоит ссылка на сайт [18]. Наша проверка с использованием этого сайта дала практически те же КВК, которые получены нами и приведены в табл. 2. Более того, значения КВК, вычисленные, используя сайт [18], для этих же случаев в других приближениях, в частности, с приближенным обменом [31, 32], оказываются гораздо более близкими к представленным нами в табл. 2 по сравнению с [16].

Несколько иная ситуация имеет место при $M3$-переходе с энергией $E_\gamma = 2.636$ кэВ в $^{188}_{75}$Re. В этом

Таблица 4. Сравнение полных КВК $\alpha_{\rm tot}^{\rm mix}$ для переходов смешанной мультипольности $\tau L + \tau' L'$, вычисленных в данной работе, и $\tilde{\alpha}_{\rm tot}^{\rm mix}$ приведенных в [16]; даны также полные КВК для компонент перехода и доли смеси δ

Z	Ядро	E_γ, кэВ	$\tau L + \tau' L'$	$\alpha_{\rm tot}(E_\gamma - \delta)$	$\alpha_{\rm tot}(E_\gamma)$	$\alpha_{\rm tot}(E_\gamma + \delta)$	$\delta_{\rm mix}$ [16]	$\alpha_{\rm tot}^{\rm mix}(E_\gamma)$	$\tilde{\alpha}_{\rm tot}^{\rm mix}(E_\gamma)$ [16]	Δ, %
36	^{83}Kr	9.4057 *6*	$M1+E2$	15.07	15.07	15.07				
				7548	7545	7543	0.0129 *6*	16.32 *12*	17.09	−4.7
62	^{151}Sm	4.821 *3*	$M1+E2$	435.6	434.8	433.9				
				7.748(5)	7.724(5)	7.700(5)	0.024 *3*	879 *118*	880 *120*	−0.1
66	^{155}Dy	9.1 *1*	$M1+E2$	138.0	432.1	421.5				
				2.116(5)	2.019(5)	1.915(5)	0.0189 *21*	504 *17*	≈530	−5.2
67	^{160}Ho	7.133 *10*	$E1+M2$	17.44	17.37	17.31				
				2.975(5)	2.955(5)	2.935(5)	⩽0.0012	17.78	19.2	−8.0
70	^{171}Yb	9.149 *1*	$M1+E2$	150.2	150.2	150.2				
				1.820(5)	1.819(5)	1.819(5)	0.016 *5*	197 *34*	160 *10*	19
80	^{201}Hg	1.5648 *10*	$M1+E2$	1.755(4)	1.751(4)	1.748(4)				
				2.247(8)	2.240(8)	2.233(8)	0.0105 *15*	4.2(4) *7*	4.7(4) *7*	−12

случае сайт [18] не вычисляет КВК для M_3–M_5-оболочек, имеющих энергии $E_k \leqslant 1$ кэВ. Однако КВК $\tilde{\alpha}_{\rm tot}^{M3}$ на 39% превышает вычисленное значение $\alpha_{\rm tot}^{M3}$. Возможно, здесь использовалась неправомерная интерполяция или экстраполяция.

В табл. 4 приведены КВК для шести переходов смешанной мультипольности $\tau L + \tau' L'$ и доли смеси $\delta_{\rm mix}$, указанные в [16]. КВК для смешанного перехода может быть вычислен, используя следующее выражение:

$$\alpha_{\rm tot}^{\rm mix} = \frac{\alpha_{\rm tot}^{\tau L} + \delta_{\rm mix}^2 \alpha_{\rm tot}^{\tau' L'}}{1 + \delta_{\rm mix}^2}, \qquad (18)$$

где $\alpha_{\rm tot}^{\tau L}$ и $\alpha_{\rm tot}^{\tau' L'}$ — КВК для компонент чистой мультипольности. Мы приводим вычисления КВК как для смешанного перехода, так и для его компонент. Неопределенности в $\alpha_{\rm tot}^{\rm mix}$ даны в табл. 4 только с учетом неопределенностей в $\delta_{\rm mix}$. Как видно из табл. 4, различия Δ (17) между нашими вычислениями и значениями КВК из [16] значительны для $^{155}_{66}$Dy, где в [18] нет данных для L_1- и L_2-оболочек, для $^{171}_{70}$Yb, где нет данных для L_3-оболочки, и для $^{201}_{80}$Hg, где нет данных для N_1-, N_2-, N_3-оболочек. Кроме того, имеются заметные расхождения $\Delta = -4.7\%$ для Kr и $\Delta = -8\%$ для $^{160}_{67}$Ho, хотя в этих случаях КВК на всех оболочках могут быть вычислены, используя [18].

Здесь, как и для КВК из табл. 2, можно уверенно объяснить только различие в случае $^{171}_{70}$Yb, где $\Delta > 0$, так как добавление КВК для L_3-оболочки $\alpha_{L3}^{M1+E2} = 36.83$ к значению из [16], дает величину, полученную в настоящей работе, с точностью $\Delta = 0.1\%$. Во всех случаях, где $\Delta < 0$, это отличие, вероятно, связано с какими-то приближениями или неправомерной интерполяцией для оболочек, для которых КВК для данного перехода не могут быть получены из [18].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вычислены полные КВК для экспериментально наблюдаемых γ-переходов низкой энергии $E_\gamma \lesssim 10$ кэВ. Расчеты выполнены методом ДФ с точным учетом обменного взаимодействия между связанными электронами, а также между связанными и свободными электронами. Учитывалась вакансия в атомной оболочке, на которой произошла конверсия. Теоретические значения сравниваются с надежными экспериментальными данными для переходов более высоких энергий. Показано, что как парциальные, так и полные КВК, полученные в этой модели, хорошо совпадают с экспериментальными данными, в частности, с результатами прецизионных экспериментов [23–30], выполненных в последние годы.

Рассматриваются особенности поведения парциальных и полных КВК $\alpha^{\tau L}(E_\gamma)$ в области низких энергий E_γ. Эти особенности — резкое уменьшение на несколько порядков величины и резонансное поведение — являются причиной существенной зависимости значений КВК при низких энергиях от теоретической модели, используемой в расчетах.

Пересмотрены теоретические значения полных КВК для экспериментально наблюдаемых переходов с энергиями $E_\gamma \lesssim 10$ кэВ, представленные на

сайте ядерных данных Брукхейвенской лаборатории [16], который широко используется специалистами. Показано, что на сайте имеется большое количество неверных значений КВК. Нами получены полные КВК, для нескольких десятков переходов, отличающиеся от значений [16] или отсутствующие там. Наши вычисления во многих случаях отличаются от [16] значительно, иногда в несколько раз. Анализируются возможные причины ошибок.

Учитывая возрастающий интерес к исследованию низкоэнергетических переходов, эти значения КВК, верные и более полные, чем в [16], могут быть использованы для анализа имеющихся экспериментальных данных, а также для подготовки и интерпретации будущих экспериментов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J. W. Petersen, G. Weyer, A. Svane, E. Holzschuh, and W. Kundig, Nucl. Instrum. Methods B **63**, 179 (1992).
2. V. V. Kharitonov and V. N. Gerasimov, Report AEI-6232/9, National Research Center "Kurchatov Institute" (Moscow, 2001).
3. М. А. Андреева, С. М. Иркаев, В. Г. Семенов, ЖЭТФ **105**, 1767 (1994).
4. A. Blachowski and K. Ruebenbauer, Phys. Scr. **73**, 263 (2006).
5. T. Bulin, P. Roupkova, C. Ondrusek, and O. Schneeweiss, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. **461**, 012009 (2018).
6. C. J. Campbell, A. V. Steele, R. L. Churchill, M. V. DePalatis, D. E. Naylor, D. N. Matsukevich, A. Kuzmich, and M. S. Chapman, Phys. Rev. Lett. **102**, 233004 (2009).
7. O. Renner, L. Juha, J. Krasa, E. Krousky, M. Pfeifer, A. Velyhan, C. Granja, J. Jakubek, V. Linhart, T. Slavicek, Z. Vykydal, S. Pospisil, J. Kravarik, J. Ullschmied, A. A. Andreev, T. Kämpfer, *et al.*, in *Proceedings of the 3rd International Conference on the Frontiers of Plasma Physics and Technology* (PC/5029), p. S5-3 (2008).
8. B. R. Beck, J. A. Becker, P. Beiersdorfer, G. V. Brown, K. J. Moody, J. B. Wilhelmy, F. S. Porter, C. A. Kilboume, and R. L. Kelley, Phys. Rev. Lett. **98**, 142501 (2007).
9. B. Seiferle, L. von der Wense, P. V. Bilous, I. Amersdorffer, C. Lemell, F. Libisch, S. Stellmer, T. Schumm, C. E. Düllmann, A. Pálffy, and P. G. Thirolf, Nature **573**, 243 (2019).
10. Y. Izawa and C. Yamanaka, Phys. Lett. B **88**, 59 (1979).
11. В. Ю. Добрецов, ЖЭТФ **102**, 774 (1992).
12. F. F. Karpeshin and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **76**, 054313 (2007).
13. F. F. Karpeshin and M. B. Trzhaskovskaya, Nucl. Phys. A **969**, 173 (2018).
14. A. Yamaguchi, M. Kolbe, H. Kaser, T. Reichel, A. Gottwald, and E. Peik, New J. Phys. **17**, 053053 (2015).
15. A. Yamaguchi, H. Muramatsu, T. Hayashi, N. Yuasa, K. Nakamura, M. Takimoto, H. Haba, K. Konashi, M. Watanabe, H. Kikunaga, N. Y. Yamasaki, and K. Mitsuda, Phys. Rev. Lett. **123**, 222501 (2019).
16. Brookhaven National Laboratory, Nuclear Structure and Decay Data, http://www.nndc.bnl.gov/nudat2/ensdf/
17. T. Kibédi, T. W. Burrov, M. B. Trzhaskovskaya, P. M. Davidson, and C. W. Nestor, Jr., Nucl. Instrum. Methods A **589**, 202 (2008).
18. T. Kibédi, T. W. Burrov, M. B. Trzhaskovskaya, P. M. Davidson, and C. W. Nestor, Jr., www.rsphysse.anu.edu.au/nuclear/bricc/
19. И. М. Банд, М. Ф. Листенгартен, М. Б. Тржасковская, В. И. Фомичев, Препринт № 289, ЛИЯФ (Ленинград, 1976); И. М. Банд, М. Б. Тржасковская, В. И. Фомичев, Препринт № 299, ЛИЯФ (Ленинград, 1977); И. М. Банд, М. Б. Тржасковская, Препринт № 300, ЛИЯФ (Ленинград, 1977); И. М. Банд, В. И. Фомичев, Препринт № 498, ЛИЯФ (Ленинград, 1979); И. М. Банд, М. Ф. Листенгартен, М. Б. Тржасковская, Препринт № 1479, ЛИЯФ (Ленинград, 1989).
20. I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, C. W. Nestor, Jr., P. O. Tikkanen, and S. Raman, At. Data Nucl. Data Tables **81**, 1 (2002).
21. I. P. Grant, Adv. Phys. **19**, 747 (1970).
22. S. Raman, C. W. Nestor, Jr., A. Ichihara, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **66**, 044312 (2002).
23. N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, S. Raman, C. W. Nestor, Jr., and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **70**, 054305 (2004).
24. N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, J. R. Montague, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **71**, 054320 (2005); N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, W. E. Rockwell, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **75**, 024308 (2007); N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, C. Balonek, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **77**, 034306 (2008); N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, J. Goodwin, C. Balonek, M. Hernberg, J. Nolan, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **80**, 064314 (2009).
25. N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, M. Bencomo, V. Horvat, H. I. Park, M. Maguire, S. Miller, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **89**, 014303 (2014).
26. N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, T. A. Werke, C. M. Folden, III, L. Pineda, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **93**, 034305 (2016).
27. N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, T. A. Werke, C. M. Folden, III, K. Ofodile, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **95**, 064301 (2017).
28. N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, H. I. Park, K. Brandenburg, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **95**, 034325 (2017).
29. N. Nica, J. C. Hardy, V. E. Iacob, V. Horvat, H. I. Park, T. A. Werke, K. J. Glennon, C. M. Folden, III, V. I. Sabla, J. B. Bryant, X. K. James, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **98**, 054321 (2018).
30. V. Horvat, E. E. Tereshatov, J. C. Hardy, N. Nica, C. M. Folden, III, V. E. Iacob, and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **102**, 014310 (2020).

31. R. S. Hager and E. C. Seltzer, Nucl. Data A **4**, 1 (1968).
32. F. Rösel, H. M. Fries, K. Alder, and H. C. Pauli, At. Data Nucl. Data Tabes **21**, 91 (1978).
33. И. М. Банд, М. Б. Тржасковская, *Таблицы КВК гамма-лучей на K-, L-, M-оболочках*, Издание ЛИЯФ (Ленинград, 1978).
34. I. M. Band and M. B. Trzhaskovskaya, At. Data Nucl. Data Tables **55**, 43 (1993).
35. M. B. Trzhaskovskaya and V. K. Nikulin, At. Data Nucl. Data Tables **140**, 101426 (2021); http://doi.org/10.1016/j.adt.2021.101426
36. M. B. Trzhaskovskaya, T. Kibédi, and V. K. Nikulin, Phys. Rev. C **81**, 024326 (2010).
37. И. М. Банд, М. Ф. Листенгартен, А. П. Ферезин, *Аномалии в коэффициентах внутренней конверсии гамма-лучей* (Наука, Ленинград, 1976).
38. Л. А. Слив, ЖЭТФ **21**, 770 (1951).
39. I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers, and N. C. Pyper, Comput. Phys. Commun. **21**, 207 (1980).
40. J. Plch, P. Dryak, J. Zderadicka, E. Schonfeld, and A. Szorenyi, Czech. J. Phys. B **29**, 1071 (1979).
41. E. L. Church and J. T. Monahan, Phys. Rev. **98**, 718 (1955).
42. I. M. Band, V. A. Listengarten, and M. B. Trzhaskovskaya, Report LNPI-664 (Leningrad, 1981).

INTERNAL CONVERSION COEFFICIENTS FOR OBSERVED LOW ENERGY γ-TRANSITIONS

M. B. Trzhaskovskaya [1)] and **V. K. Nikulin** [2)]

[1)] *National Research Center "Kurchatov Institute" — PNPI, Gatchina, Russia*
[2)] *Ioffe Physical Technical Institute, St. Petersburg, Russia*

Total internal conversion coefficients (ICCs) have been calculated for experimentally observed transitions at low γ-ray energy $E_\gamma \lesssim 10$ keV. The ICC values are presented for transitions where they differ considerably from theoretical ICCs presented in the website of nuclear data by Brookhaven National Laboratory (www.nndc.bnl.gov/nudat2/ensdf/) or for transitions where ICCs are missing in the site. More than sixty low-energy transitions were revealed where ICCs are erroneous or absent. Plausible reasons of the errors are analyzed. Our calculations are based on the Dirac–Fock method taking into account properly the exchange interaction between bound electrons as well as between bound and free electrons. The vacancy in the atomic shell where the conversion occurs is included in the framework of the frozen core approximation. The calculations are in good agreement with reliable experimental data. Peculiarities of the partial and total ICC behavior at low energies are considered.