01

Расчеты энергий рентгеновских переходов для сверхтяжелых элементов с $Z = 104-126$

© И.М. Савельев[1], И.И. Тупицын[1], Д.П. Усов[1], В.М. Шабаев[1,2]

[1] Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, Санкт-Петербург, Россия
[2] Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра „Курчатовский институт", Гатчина, Ленинградская обл., Россия

e-mail: i.savelev@spbu.ru

Поступила в редакцию 05.05.2026 г.
В окончательной редакции 05.05.2026 г.
Принята к публикации 12.05.2026 г.

Представлены результаты систематических *ab initio* расчетов энергий рентгеновских переходов $K\alpha_1$, $K\alpha_2$, $K\beta_1$ и $K\beta_3$ для сверхтяжелых элементов с атомными номерами $104 \leq Z \leq 126$. Вычисления выполнены в рамках релятивистского метода конфигурационного взаимодействия в базисе орбиталей Дирака–Фока–Штурма. Последовательно учтены вклады взаимодействия Брейта, включая его частотнозависимую часть, а также квантово-электродинамические поправки. Дополнительно рассчитаны коэффициенты полевого сдвига для всех переходов. Проведенный анализ позволяет оценить отдельные вклады в энергии рентгеновских линий. Полученные результаты могут быть использованы для интерпретации имеющихся экспериментальных данных, а также для планирования будущих экспериментов.

Ключевые слова: сверхтяжелые элементы, рентгеновские линии, релятивистские эффекты, корреляционные эффекты, КЭД эффекты.

DOI: 10.61011/OS.2026.09.63811.9696-26

1. Введение

Пределы существования ядер и элементов остаются одной из ключевых проблем современной физики [1]. Характеристическое рентгеновское излучение, в частности линии K-серии, существенным образом зависит от заряда ядра и распределения электронной плотности и поэтому может служить эффективным инструментом идентификации элементов [2]. Для сверхтяжелых элементов (СТЭ) рентгеновская спектроскопия является одним из немногих прямых методов определения атомного номера, поскольку в условиях малых сечений образования и коротких времен жизни ядер традиционные методы идентификации существенно ограничены. Энергии данных переходов достигают сотен килоэлектронвольт, при этом помимо электронной корреляции значительное влияние на них оказывают релятивистские эффекты, квантово-электродинамические поправки и т. д. Классическим примером является идентификация резерфордия ($Z = 104$) по K-линиям дочернего нобелия ($Z = 102$), зарегистрированного в совпадении с α-распадами [3].

Современные эксперименты по изучению рентгеновского излучения СТЭ, как правило, основаны на регистрации единичных фотонов в совпадении с α-распадами. Сообщалось о наблюдении фотонов с энергиями 130.1 и 136.9 keV, интерпретированных как $K\alpha$-линии дубния [4]. В работе [5] наблюдались K-линии резерфордия в области 127–134 keV, однако их более надежная идентификация была достигнута в работе [6] в цепочке ^{258}Db $\rightarrow$ ^{258}Rf, где регистрировались совпадения испущенных фотонов, конверсионных электронов и событий деления. Отдельные наблюдения, такие как фотон с энергией 155.0 keV, интерпретированный как возможная $K\alpha$-линия мейтнерия ($Z = 109$) [7], остаются неоднозначными и не имеют независимого подтверждения. В экспериментах с московием ($Z = 115$) также регистрировались кандидаты в K-линии мейтнерия и бория ($Z = 107$) [8–10], однако ограниченная статистика и фон затрудняют их однозначную интерпретацию.

Таким образом, несмотря на ограниченную статистику и отсутствие высокоразрешенных спектров, имеющиеся эксперименты демонстрируют принципиальную возможность идентификации СТЭ методами рентгеновской спектроскопии и подчеркивают необходимость определения надежных теоретических значений энергий переходов для анализа текущих данных и планирования дальнейших исследований.

Первые систематические теоретические расчеты энергий рентгеновских линий СТЭ были выполнены в работах [11–13]. Наиболее полные результаты представлены в [13], где в рамках метода Дирака–Фока (ДФ) были получены значения энергий для элементов с зарядом ядра $95 \leq Z \leq 130$. Вклад взаимодействия Брейта в этой работе учитывался по теории возмущений, тогда как электронная корреляция и квантово-электродинамические (КЭД) поправки вводились на основе экстраполяции данных для меньших значений Z. При этом полные

расчеты были выполнены лишь для ограниченного числа элементов, данные для остальных были получены с помощью интерполяции.

Для СТЭ вклад взаимодействия Брейта и КЭД-эффектов в энергии рентгеновских линий становится существенным и достигает величин порядка 1 keV, что требует их явного учета. Такие вычисления были выполнены с помощью метода ДФ для $K\alpha_1$- и $K\alpha_2$-линий элементов с $104 \le Z \le 112$ в работе [14] и для $103 \le Z \le 116$ в работе [15]. В настоящей работе мы провели аналогичные расчеты для всех элементов с $104 \le Z \le 126$. Кроме $K\alpha_1$- и $K\alpha_2$-переходов, были вычислены энергии $K\beta_1$- и $K\beta_3$-линий. Мы также вычислили значения коэффициентов полевого сдвига для всех изучаемых переходов с целью возможного получения данных для различных изотопов. Особый интерес представляет исследование влияния электронной корреляции, в том числе оже-сдвигов, на получаемые результаты. Для их учета в работе использовался релятивистский метод конфигурационного взаимодействия (CI) в базисе орбиталей Дирака–Фока–Штурма (CI-DFS) совместно с многочастичной теорией возмущений [16–18].

Таким образом, в работе представлен систематический анализ вкладов электронной корреляции, взаимодействия Брейта, КЭД-поправок, а также частотнозависимой части брейтовского взаимодействия, что обеспечивает получение надежных теоретических значений энергий рентгеновских переходов, необходимых при интерпретации текущих и планировании будущих экспериментов.

2. Теоретические методы

Настоящие расчеты основаны на использовании релятивистского гамильтониана Дирака-Кулона (ДК)

$$\hat{H}_{\mathrm{DC}} = \Lambda^{+}(\hat{H}_{\mathrm{D}} + \hat{H}_{\mathrm{C}})\Lambda^{+} \tag{1}$$

и гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта (ДКБ)

$$\hat{H}_{\mathrm{DCB}} = \Lambda^{+}(\hat{H}_{\mathrm{D}} + \hat{H}_{\mathrm{C}} + \hat{H}_{\mathrm{B}})\Lambda^{+}. \tag{2}$$

Здесь $\hat{H}_{\mathrm{D}}$ — сумма одноэлектронных гамильтонианов Дирака:

$$\hat{H}_{\mathrm{D}} = \sum_{i=1}^{N} \left[(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{p}_i)c + (\beta - 1)mc^2 + V(r_i)\right], \tag{3}$$

$\hat{H}_{\mathrm{C}}$ и $\hat{H}_{\mathrm{B}}$ — двухэлектронные операторы кулоновского и брейтовского взаимодействий соответственно:

$$\hat{H}_{\mathrm{C}} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N} \frac{1}{r_{ij}}, \tag{4}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{B}} = -\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N} \frac{1}{2r_{ij}}\left[\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2}\right]. \tag{5}$$

Таблица 1. Значения среднеквадратичных радиусов ядер, использованные в настоящей работе

Z		R, fm	Z		R, fm	Z		R, fm
104	Rf	5.985	112	Cn	6.229	120	Ubn	6.391
105	Db	5.919	113	Nh	6.250	121	Ubu	6.410
106	Sg	6.015	114	Fl	6.271	122	Ubb	6.430
107	Bh	6.023	115	Mc	6.291	123	Ubt	6.449
108	Hs	6.008	116	Lv	6.311	124	Ubq	6.475
109	Mt	6.052	117	Ts	6.331	125	Ubp	6.494
110	Ds	6.188	118	Og	6.351	126	Ubh	6.513
111	Rg	6.209	119	Uue	6.371			

Здесь $\boldsymbol{\alpha}$ — вектор, состоящий из матриц Дирака, $\mathbf{p}$ — оператор импульса, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. Проектор Λ^{+} является прямым произведением одноэлектронных проекторов на положительный спектр оператора ДФ.

Для учета КЭД-эффектов использовался модельный КЭД-оператор $V_{\mathrm{QED}}^{\mathrm{mod}}$ [19–22], позволяющий приближенно учитывать вклады вакуумной поляризации и собственной энергии электрона в многоэлектронных системах. Оператор $V_{\mathrm{QED}}^{\mathrm{mod}}$ включался непосредственно в многоэлектронный гамильтониан.

Вклады взаимодействия Брейта и КЭД-эффектов вычислялись как разности полных энергий, полученных с учетом и без учета соответствующих операторов в многоэлектронном гамильтониане на уровне CI-расчетов. Поправка на частотную зависимость брейтовского взаимодействия определялась как среднее значение частотнозависимой части оператора однофотонного обмена в кулоновской калибровке, вычисленное на многоэлектронной волновой функции, полученной методом CI-DFS.

Распределение зарядовой плотности ядра было учтено в рамках модели Ферми. Для среднеквадратичных радиусов СТЭ (в единицах ферми) использовались выражения:

$$R = \sqrt{\frac{3}{5}}R_{\mathrm{sphere}}, \qquad R_{\mathrm{sphere}} = 1.2A^{1/3}, \tag{6}$$

где число нуклонов A для $Z \ge 110$ вычислялось по формуле из работы [23]:

$$A = 0.00733Z^2 + 1.30Z + 63.6. \tag{7}$$

Полученное таким образом значение A затем округлялось до ближайшего целого числа. Такой выбор параметров ядер согласуется с работой [22], где область действия модельного КЭД-оператора была расширена для $110 \le Z \le 170$. Для остальных элементов ($104 \le Z \le 109$) среднеквадратичные радиусы были взяты из QEDMOD-кода [20] (табл. 1).

Одноэлектронные орбитали занятых состояний определялись методом ДФ в приближении центра тяжести нерелятивистской конфигурации валентных оболочек (*LS*-усреднение) [18,30]. При построении базиса орбиталей Дирака–Фока–Штурма взаимодействие Брейта и КЭД-эффекты не учитывались.

Таблица 2. Вклады в энергии $K\alpha_1$- и $K\alpha_2$-линий (keV) для изотопа урана ^{238}U ($R = 5.8569$ fm). Здесь E_{DF} – энергия в приближении Дирака–Фока, ΔE_{Breit} – поправка от взаимодействия Брейта, $\Delta E^{(\omega)}_{Breit}$ – вклад частотнозависимой части брейтовского взаимодействия, ΔE_{QED} – КЭД-поправки, ΔE_{corr} – вклад электронной корреляции и оже-процессов, ΔE_{MS} – поправка на массовый сдвиг, ΔE_{NP} – вклад ядерной поляризации, ΔE_{ND} – вклад ядерной деформации, E_{total} – полная энергия перехода с учетом всех поправок

Источник	E_{DF}	ΔE_{Breit}	$\Delta E^{(\omega)}_{Breit}$	ΔE_{QED}	ΔE_{corr}	ΔE_{MS}	ΔE_{NP}	ΔE_{ND}	E_{total}
	$K\alpha_1$								
Данная работа	99.1031	−0.4339	0.0067	−0.2467	0.0034				98.4325
Теория [18]	99.1031	−0.4339	0.0067	−0.2466	0.0038	−0.0001	0.0002	0.0001	98.4333(38)
Теория [24]	99.1016	−0.4319	0.0066	−0.2436	0.0030		0.0002[a]		98.4359[b]
Теория [25]									98.4336(36)
Эксперимент [25,26]									98.43158(28)
Источник	$K\alpha_2$								
Данная работа	95.2777	−0.3940	0.0126	−0.2496	0.0042				98.6509
Теория [18]	95.2777	−0.3940	0.0126	−0.2486	0.0030	−0.0001	0.0002	0.0001	94.6508(30)
Теория [24]	95.2763	−0.3923	0.0125	−0.2460	0.0046		0.0002[a]		94.6553[b]
Теория [25]									94.6531(37)
Эксперимент [25,26]									94.65084(56)

[a] Исправлено согласно работам [27–29].
[b] Исправлено с учетом обновленного значения ядерной поляризации.

При учете электронной корреляции в рамках метода CI в качестве активных выбирались электроны внутренних оболочек и рассматривались одно- и двукратные возбуждения в пространство виртуальных орбиталей положительного спектра Дирака. Учет влияния валентных электронов на активные остовные производился путем введения одночастичного потенциала, описанного в работе [18].

Корреляционная энергия вычислялась как сумма трех частей. Первый вклад происходит от учета в рамках CI одно- и двукратных возбуждений, исключающих заполнение внутренней вакансии за счет перехода электронов с орбиталей, имеющих энергию большую, чем энергия орбитали с дыркой. На втором и третьем этапах учитывались только двукратные переходы, в которых один из электронов заполняет остовную вакансию. Учет возбуждений типа Оже с переходом второго электрона в сплошной спектр был выполнен с использованием техники интегрирования простого полюса, предложенной в работах [31,32]. Третий вклад происходит от учета возбуждений с переходом второго электрона в дискретный спектр. Он был вычислен методом CI.

Энергии $K\alpha$- и $K\beta$-переходов определялись как разности полных энергий ионов

$$\Delta E = E_n - E_{n'}, \tag{8}$$

где $n = 1s$ и $n' = 2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$, $3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$ обозначают релятивистские оболочки с недостающим электроном.

3. Энергии рентгеновских линий урана

Чтобы проверить наш подход, мы выполнили расчеты рентгеновских $K\alpha$-линий изотопа урана ^{238}U, для которых имеются высокоточные экспериментальные данные [25,26] и предыдущие теоретические расчеты [18,24,25]. Результаты приведены в табл. 2. Основной вклад, полученный методом ДФ, представлен в первом столбце таблицы. Вклады взаимодействия Брейта, КЭД и электронной корреляции приведены в последующих столбцах.

Как видно из приведенных в табл. 2 результатов работы [18], вклады массового сдвига, ядерной поляризации и ядерной деформации значительно меньше погрешности, связанной с учетом электронной корреляции, поэтому в настоящей работе они не учитывались. Наши данные находятся в хорошем согласии с результатами предыдущих работ и отличаются от экспериментальных данных на величину, не превышающую 1 eV. Некоторые отличия от результатов работы [18], где также использовался метод CI-DFS, во вкладе КЭД и корреляционной энергии могут быть объяснены тем, что в настоящей работе было использовано конфигурационное пространство большего размера.

4. Результаты

Убедившись в согласии наших данных для ^{238}U с результатами экспериментальных и других теоретических работ, мы применили тот же подход для вычисления рентгеновских переходов в сверхтяжелых элементах. Электронные конфигурации СТЭ с $Z \geq 120$ были взяты из работы [33]. Итоговые энергии $K\alpha_1$-, $K\alpha_2$-, $K\beta_1$- и $K\beta_3$-линий вместе с отдельными вкладами представлены в табл. 3–6.

Основной вклад в энергии переходов определяется кулоновским взаимодействием в приближении ДФ; со-

Таблица 3. Вклады в энергии $K\alpha_1$-линий для элементов с $Z = 104-126$ (keV). Здесь E_{DF} — энергия в приближении Дирака–Фока, $\Delta E_{\mathrm{Breit}}$ — поправка от взаимодействия Брейта, $\Delta E^{(\omega)}_{\mathrm{Breit}}$ — вклад частотнозависимой части брейтовского взаимодействия, ΔE_{QED} — КЭД-поправки, ΔE_{corr} — вклад электронной корреляции и оже-процессов, E_{total} — полная энергия перехода с учетом всех поправок

Z	E_{DF}	$\Delta E_{\mathrm{Breit}}$	$\Delta E^{(\omega)}_{\mathrm{Breit}}$	ΔE_{QED}	ΔE_{corr}	E_{total}	[13]
104	134.980	−0.678	0.012	−0.381	0.005	133.937	133.947
105	138.435	−0.704	0.012	−0.397	0.005	137.352	137.354
106	141.945	−0.729	0.013	−0.411	0.005	140.822	140.803
107	145.552	−0.756	0.013	−0.426	0.006	144.389	144.366
108	149.251	−0.784	0.014	−0.441	0.006	148.045	148.013
109	153.026	−0.812	0.014	−0.457	0.006	151.777	151.748
110	156.869	−0.841	0.015	−0.470	0.006	155.578	155.573
111	160.834	−0.872	0.015	−0.486	0.006	159.497	159.488
112	164.897	−0.903	0.016	−0.502	0.006	163.513	163.504
113	169.063	−0.936	0.016	−0.519	0.006	167.630	167.622
114	173.334	−0.970	0.017	−0.536	0.006	171.850	171.844
115	177.716	−1.005	0.017	−0.554	0.006	176.180	176.177
116	182.213	−1.041	0.018	−0.573	0.006	180.623	180.621
117	186.829	−1.079	0.018	−0.591	0.006	185.184	185.179
118	191.569	−1.118	0.019	−0.610	0.006	189.866	189.863
119	196.438	−1.158	0.019	−0.630	0.006	194.675	194.677
120	201.442	−1.200	0.020	−0.650	0.006	199.617	199.621
121	206.586	−1.244	0.020	−0.675	0.006	204.693	204.705
122	211.875	−1.289	0.021	−0.697	0.006	209.916	209.929
123	217.317	−1.336	0.021	−0.718	0.006	215.290	215.304
124	222.912	−1.385	0.021	−0.741	0.006	220.814	220.839
125	228.679	−1.436	0.022	−0.763	0.006	226.508	226.536
126	234.619	−1.488	0.022	−0.786	0.006	232.372	232.408

Таблица 4. Вклады в энергии $K\alpha_2$-линий для элементов с Z=104−126 (keV). Здесь E_{DF} — энергия в приближении Дирака–Фока, $\Delta E_{\mathrm{Breit}}$ — поправка от взаимодействия Брейта, $\Delta E^{(\omega)}_{\mathrm{Breit}}$ — вклад частотнозависимой части брейтовского взаимодействия, ΔE_{QED} — КЭД-поправки, ΔE_{corr} — вклад электронной корреляции и оже-процессов, E_{total} — полная энергия перехода с учетом всех поправок

Z	E_{DF}	$\Delta E_{\mathrm{Breit}}$	$\Delta E^{(\omega)}_{\mathrm{Breit}}$	ΔE_{QED}	ΔE_{corr}	E_{total}	[13]
104	127.791	−0.603	0.023	−0.382	0.004	126.834	126.851
105	130.866	−0.624	0.024	−0.397	0.004	129.874	129.882
106	133.978	−0.646	0.026	−0.411	0.005	132.951	132.941
107	137.166	−0.668	0.027	−0.425	0.005	136.104	136.090
108	140.423	−0.690	0.028	−0.440	0.005	139.326	139.304
109	143.735	−0.714	0.029	−0.455	0.005	142.600	142.583
110	147.091	−0.738	0.031	−0.467	0.004	145.921	145.927
111	150.542	−0.762	0.032	−0.482	0.004	149.333	149.337
112	154.065	−0.788	0.033	−0.498	0.004	152.816	152.821
113	157.660	−0.814	0.035	−0.514	0.004	156.370	156.376
114	161.331	−0.841	0.036	−0.530	0.004	159.999	160.007
115	165.079	−0.869	0.038	−0.547	0.004	163.705	163.716
116	168.907	−0.897	0.039	−0.564	0.004	167.489	167.503
117	172.817	−0.926	0.041	−0.581	0.003	171.354	171.362
118	176.811	−0.957	0.043	−0.599	0.003	175.302	175.311
119	180.891	−0.987	0.044	−0.617	0.003	179.334	179.349
120	185.060	−1.019	0.046	−0.635	0.003	183.455	183.476
121	189.320	−1.052	0.048	−0.657	0.003	187.661	187.681
122	193.672	−1.086	0.050	−0.676	0.003	191.962	191.984
123	198.121	−1.120	0.051	−0.696	0.002	196.359	196.450
124	202.661	−1.155	0.053	−0.715	0.002	200.846	200.889
125	207.306	−1.192	0.055	−0.735	0.002	205.436	205.479
126	212.052	−1.229	0.057	−0.755	0.001	210.128	210.179

Таблица 5. Вклады в энергии $K\beta_1$-линий для элементов с Z=104−126 (keV). Здесь E_{DF} — энергия в приближении Дирака–Фока, $\Delta E_{\mathrm{Breit}}$ — поправка от взаимодействия Брейта, $\Delta E^{(\omega)}_{\mathrm{Breit}}$ — вклад частотнозависимой части брейтовского взаимодействия, ΔE_{QED} — КЭД-поправки, ΔE_{corr} — вклад электронной корреляции и оже-процессов, E_{total} — полная энергия перехода с учетом всех поправок

Z	E_{DF}	$\Delta E_{\mathrm{Breit}}$	$\Delta E^{(\omega)}_{\mathrm{Breit}}$	ΔE_{QED}	ΔE_{corr}	E_{total}	[13]
104	151.890	−0.749	0.020	−0.389	0.010	150.782	150.797
105	155.704	−0.776	0.020	−0.405	0.010	154.554	154.557
106	159.577	−0.805	0.021	−0.420	0.010	158.385	158.370
107	163.551	−0.834	0.022	−0.435	0.011	162.315	162.296
108	167.619	−0.864	0.023	−0.450	0.011	166.340	166.311
109	171.769	−0.895	0.024	−0.466	0.011	170.444	170.418
110	175.991	−0.926	0.025	−0.479	0.011	174.621	174.618
111	180.337	−0.959	0.026	−0.496	0.011	178.919	178.912
112	184.787	−0.994	0.027	−0.513	0.011	183.319	183.311
113	189.342	−1.029	0.028	−0.530	0.011	187.822	187.817
114	194.007	−1.066	0.029	−0.548	0.012	192.434	192.431
115	198.787	−1.103	0.030	−0.566	0.012	197.159	197.157
116	203.685	−1.143	0.031	−0.585	0.012	202.000	202.001
117	208.706	−1.183	0.032	−0.604	0.011	206.963	206.961
118	213.856	−1.225	0.033	−0.625	0.011	212.050	212.051
119	219.138	−1.269	0.034	−0.644	0.016	217.275	217.274
120	224.558	−1.314	0.035	−0.665	0.013	222.627	222.634
121	230.122	−1.360	0.037	−0.691	0.014	228.122	228.135
122	235.836	−1.409	0.038	−0.713	0.015	233.767	233.781
123	241.707	−1.459	0.039	−0.735	0.015	239.567	239.582
124	247.734	−1.511	0.040	−0.758	0.015	245.520	245.546
125	253.938	−1.565	0.041	−0.781	0.015	251.647	251.677
126	260.319	−1.621	0.042	−0.805	0.015	257.950	257.987

Таблица 6. Вклады в энергии $K\beta_3$-линий для элементов с Z=104−126 (keV). Здесь E_{DF} — энергия в приближении Дирака–Фока, $\Delta E_{\mathrm{Breit}}$ — поправка от взаимодействия Брейта, $\Delta E^{(\omega)}_{\mathrm{Breit}}$ — вклад частотнозависимой части брейтовского взаимодействия, ΔE_{QED} — КЭД поправки, ΔE_{corr} — вклад электронной корреляции и оже-процессов, E_{total} — полная энергия перехода с учетом всех поправок

Z	E_{DF}	$\Delta E_{\mathrm{Breit}}$	$\Delta E^{(\omega)}_{\mathrm{Breit}}$	ΔE_{QED}	ΔE_{corr}	E_{total}	[13]
104	150.171	−0.733	0.023	−0.389	0.009	149.080	149.098
105	153.890	−0.760	0.024	−0.405	0.009	152.758	152.787
106	157.663	−0.787	0.025	−0.419	0.009	156.491	156.480
107	161.532	−0.815	0.026	−0.434	0.009	160.319	160.303
108	165.491	−0.844	0.027	−0.449	0.009	164.234	164.209
109	169.524	−0.874	0.028	−0.465	0.009	168.223	168.202
110	173.623	−0.904	0.030	−0.479	0.009	172.280	172.282
111	177.841	−0.936	0.031	−0.495	0.009	176.451	176.449
112	182.155	−0.969	0.032	−0.511	0.010	180.717	180.715
113	186.567	−1.003	0.033	−0.529	0.010	185.079	185.079
114	191.081	−1.038	0.035	−0.546	0.010	189.542	189.542
115	195.701	−1.074	0.036	−0.564	0.010	194.109	194.114
116	200.431	−1.111	0.038	−0.583	0.010	198.785	198.790
117	205.275	−1.150	0.039	−0.602	0.010	203.572	203.575
118	210.236	−1.190	0.040	−0.621	0.010	208.476	208.479
119	215.319	−1.231	0.042	−0.641	0.010	213.499	213.507
120	220.529	−1.274	0.043	−0.661	0.010	218.648	218.659
121	225.872	−1.319	0.045	−0.686	0.010	223.922	223.941
122	231.350	−1.364	0.046	−0.707	0.010	229.334	229.354
123	236.971	−1.412	0.048	−0.729	0.010	234.888	234.908
124	242.734	−1.461	0.049	−0.751	0.010	240.581	240.612
125	248.656	−1.512	0.051	−0.774	0.010	246.431	246.467
126	254.739	−1.564	0.052	−0.797	0.010	252.440	252.481

ответствующие значения приведены во вторых столбцах таблиц. Взаимодействие Брейта вносит существенные поправки в эти энергии, причем их относительный вклад линейно возрастает с увеличением Z. Для каждого перехода абсолютная величина этого вклада примерно удваивается при изменении Z от 104 до 126.

Аналогичная тенденция наблюдается и для КЭД-эффектов, однако их вклад примерно вдвое меньше. Вклад частотнозависимой части брейтовского взаимодействия существенно ниже и находится на уровне 0.01 – 0.06 keV.

Для оценки вклада электронной корреляции мы рассмотрели следующее активное пространство. В рамках CI были учтены одно- и двукратные возбуждения из внутренних электронных оболочек, включающих орбитали $1s$ – $3d$. Остальные электроны были отнесены к замороженному остову и рассматривались в приближении центра тяжести нерелятивистской конфигурации. На этом этапе возбуждения заполняющие дырку во внутренней орбитали были исключены из рассмотрения. Набор виртуальных орбиталей включал в себя до 6 нерелятивистских орбиталей для каждого $l \leq 3$. Так, например, для оганесона ($Z = 118$) максимальный набор виртуальных орбиталей состоял из $8s$ – $13s$, $8p$ – $13p$, $7d$ – $12d$, $6f$ – $11f$. Анализ сходимости результатов с ростом числа виртуальных орбиталей, выполненный нами для всех Z, показал, что такое обрезание базисного набора приводит к погрешности, не превышающей нескольких десятых электронвольт. Для четырех элементов ($Z = 104$, 111, 118, 125) мы также произвели вычисления в расширенном активном пространстве, учитывающем возбуждения из орбиталей $1s$ – $4d$. Переход к увеличенному пространству привел к изменениям энергий переходов, не превышающим 0.6 eV.

Анализ оже-вклада включал в себя учет возбуждений из всех занятых орбиталей вплоть до $5f$ включительно. При рассмотрении вклада сплошного спектра в качестве виртуальных орбиталей использовались состояния с орбитальным моментом $l \leq 4$.

Из табл. 3–6 видно, что вклад от учета электронной корреляции сильно зависит от рассматриваемого перехода. Наибольших значений он достигает для $K\beta_1$-линий и составляет 10 – 16 eV, в то время как для $K\alpha_2$ находится на уровне 1 – 5 eV. Отметим, что вклад эффекта Оже наиболее значим для переходов $K\beta_1$ и $K\beta_3$, где он составляет примерно половину полной корреляционной энергии, в то время как для $K\alpha_1$ он оказывается пренебрежимо малым.

Итоговые результаты для энергий линий приводятся в столбцах E_{total}. Наши результаты для резерфордия — энергии $K\alpha_2$ (126.834 keV), $K\alpha_1$ (133.937 keV) и $K\beta_1$ (150.782 keV) — согласуются с экспериментальными данными из работы [6] (126.9 ± 0.7 keV, 133.9 ± 0.9 keV, 149.8 ± 1.6 keV). Для дубния наши значения энергий $K\alpha$-линий (129.874 keV и 137.352 keV) также хорошо согласуются с измерениями [4] (130.1 keV и 136.9 keV), учитывая, что экспериментальная погрешность, находится на уровне не ниже 0.5 keV. Как отмечалось в статьях [14,15], измеренная в работе [7] линия 155.0 ± 0.8 keV, вопреки предположениям не может быть идентифицирована как $K\alpha_1$-линия мейтнерия. Такой вывод подтверждается нашими результатами (151.777 keV).

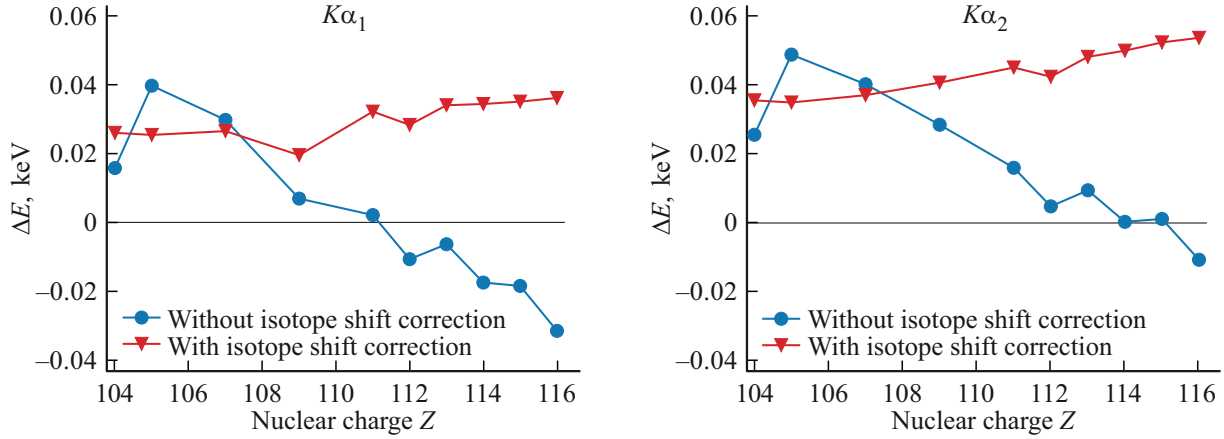
Таблица 7. Коэффициенты полевого сдвига (keV/fm)

Z	$K\alpha_1$	$K\alpha_2$	$K\beta_1$	$K\beta_3$
104	−0.142	−0.138	−0.142	−0.140
105	−0.156	−0.151	−0.155	−0.154
106	−0.171	−0.166	−0.170	−0.169
107	−0.188	−0.182	−0.187	−0.185
108	−0.206	−0.199	−0.205	−0.203
109	−0.226	−0.218	−0.225	−0.223
110	−0.249	−0.240	−0.248	−0.245
111	−0.273	−0.263	−0.272	−0.269
112	−0.300	−0.288	−0.299	−0.295
113	−0.330	−0.315	−0.328	−0.324
114	−0.362	−0.345	−0.360	−0.356
115	−0.397	−0.378	−0.396	−0.390
116	−0.437	−0.414	−0.435	−0.428
117	−0.480	−0.454	−0.478	−0.470
118	−0.527	−0.497	−0.525	−0.516
119	−0.579	−0.545	−0.577	−0.567
120	−0.636	−0.597	−0.634	−0.622
121	−0.699	−0.653	−0.696	−0.683
122	−0.769	−0.715	−0.766	−0.750
123	−0.845	−0.783	−0.842	−0.824
124	−0.929	−0.856	−0.925	−0.905
125	−1.021	−0.937	−1.017	−0.993
126	−1.123	−1.025	−1.118	−1.091

В последнем столбце каждой таблицы для сравнения приведены результаты работы [13]. Различия значений, полученных в ней, а также значений, полученных в [14,15], с нашими результатами и между собой находятся на уровне нескольких десятков eV. Во всех этих работах были использованы различные предположения о параметрах ядер изучаемых элементов (в том числе и их массах). Поэтому корректное сравнение может быть выполнено только после уточнения среднеквадратичных радиусов ядер, для которых были выполнены вычисления.

5. Изотопические сдвиги

Главным источником погрешностей вычисленных энергий рентгеновских линий является неопределенность в параметрах ядер СТЭ. Для пересчета энергий при изменении среднеквадратичных радиусов изучаемых элементов нами были вычислены коэффициенты полевого сдвига, который является доминирующим вкладом в изотопический сдвиг.



Разность энергий, полученных в настоящей работе, и результатов работы [15] для $K\alpha_1$-линий (слева) и $K\alpha_2$-линий (справа). Наши расчеты выполнены с использованием среднеквадратичных радиусов ядер из табл. 1 (кружки), а также с использованием радиусов, модифицированных с учетом изотопического сдвига (треугольники).

Как упоминалось выше, в качестве модели распределения заряда ядра в работе была использована модель Ферми, определяемая плотностью

$$\rho(r, R) = \frac{N}{1 + \exp[(r - c)/a]}, \tag{9}$$

где параметр $a = 2.3/(4\ln 3)$, а параметры N и c получаются из значений среднеквадратичного радиуса ядра $R = \langle r^2 \rangle^{1/2}$ и из условия нормировки $\int d\mathbf{r}\rho(r, R) = 1$. Для вычисления этих параметров были использованы приближенные аналитические формулы [34,35]:

$$N = \frac{3}{4\pi c^3}\left(1 + \frac{\pi^2 a^2}{c^2}\right)^{-1}, \tag{10}$$

$$c = \sqrt{\frac{5}{3}\langle r^2 \rangle - \frac{7}{3}\pi^2 a^2}. \tag{11}$$

Потенциал, создаваемый плотностью $\rho(r, R)$, определяется следующим выражением:

$$V_N(r, R) = -4\pi Z \int_0^\infty dr'\, r'^2 \rho\,(r', R)\,\frac{1}{r_>}, \tag{12}$$

где $r_> = \max(r, r')$. Коэффициенты изотопических сдвигов вычисляются по формуле

$$F_{FS} = \frac{dE}{dR} \approx \frac{E_{\text{tot}}\,(R + \delta R) - E_{\text{tot}}\,(R - \delta R)}{2\delta R}, \tag{13}$$

где R — среднеквадратичные радиусы СТЭ, представленные в табл. 1, а $E_{\text{tot}}\,(R \pm \delta R)$ — полные электронные энергии. Значение параметра δR было выбрано равным 0.01 fm.

Вычисленные коэффициенты полевого сдвига представлены в табл. 7. Полученные значения были использованы для сравнения наших результатов с наиболее точными энергиями $K\alpha_1$- и $K\alpha_2$-линий, представленными в литературе для $104 \le Z \le 116$ [15]. Для этой цели мы пересчитали значения энергий для среднеквадратичных радиусов из работы [15], где также была использована модель Ферми. Разность энергий, полученных в настоящей работе, и результатов работы [15] представлена на рисунке. Различия между парами кривых наглядно демонстрирует типичные изменения в энергиях рентгеновских линий при возможных вариациях среднеквадратичных радиусов, которые могут составлять несколько десятков электронвольт. Кроме того, из графиков видно, что переход к параметрам, близким к используемым в работе [15], приводит к тому, что отклонение результатов принимает почти систематический характер. Итоговое расхождение находится на уровне 0.02–0.04 keV для $K\alpha_1$ и 0.04–0.06 keV для $K\alpha_2$. Такая разница в первую очередь может быть связана с тем, что в работе [15] было выбрано другое значением параметра a в формуле (9), а также с различным способом учета КЭД-поправок.

6. Выводы

В настоящей работе выполнены систематические *ab initio* расчеты энергий рентгеновских переходов $K\alpha_1$, $K\alpha_2$, $K\beta_1$ и $K\beta_3$ для сверхтяжелых элементов с атомными номерами $104 \le Z \le 126$. Вычисления были проведены релятивистским методом CI-DFS с последовательным учетом вкладов взаимодействия Брейта, КЭД-поправок и электронной корреляции.

Показано, что поправки за рамками приближения Дирака–Фока играют существенную роль и достигают величин порядка 1 keV для взаимодействия Брейта и КЭД-эффектов. Частотнозависимая часть брейтовского взаимодействия дает сравнительно малый, но систематический вклад. Вклад электронной корреляции существенно зависит от типа перехода и может достигать 16 eV. Установлено, что значительную долю корреляционного вклада составляет эффект Оже.

Проведено сравнение с ранее опубликованными теоретическими данными, которое выявило расхождения на уровне нескольких десятков электронвольт. Вычислены коэффициенты полевого сдвига, позволяющие учитывать изотопические эффекты и пересчитывать энергии переходов при изменении среднеквадратичных радиусов. Продемонстрировано, что вариации последних могут объяснять значительную часть расхождений, наблюдаемых между различными теоретическими результатами.

Полученные данные представляют собой согласованный и систематический набор теоретических значений энергий характеристических рентгеновских $K\alpha_1$-, $K\alpha_2$-, $K\beta_1$- и $K\beta_3$-линий СТЭ. Эти результаты могут быть использованы для интерпретации существующих экспериментальных данных и планирования будущих экспериментов, направленных на спектроскопическую идентификацию сверхтяжелых атомов.

Финансирование работы

Настоящая работа была выполнена при финансовой поддержке Фонда развития теоретической физики и математики „БАЗИС“ (проект № 24-1-5-111-1).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Y. Oganessian. The European Physical Journal A, **60** (11), 227 (2024).
[2] R.G. Egdell, E. Bruton. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, **378** (2180) (2020).
[3] C. Bemis Jr, R. Silva, D. Hensley, O. Keller Jr, J. Tarrant, L. Hunt, P. Dittner, R. Hahn, C. Goodman. Physical Review Letters, **31** (10), 647 (1973).
[4] F. Heßberger, S. Hofmann, B. Streicher, B. Sulignano, S. Antalic, D. Ackermann, S. Heinz, B. Kindler, I. Kojouharov, P. Kuusiniemi, M. Leino, B. Lommel, R. Mann, A. Popeko, Š. Šáro, J. Uusitalo, A. Yeremin. The European Physical Journal A, **41** (2), 145 (2009).
[5] B. Streicher, F. Heßberger, S. Antalic, S. Hofmann, D. Ackermann, S. Heinz, B. Kindler, J. Khuyagbaatar, I. Kojouharov, P. Kuusiniemi, M. Leino, B. Lommel, R. Mann, Š. Šáro, B. Sulignano, J. Uusitalo, M. Venhart. The European Physical Journal A, **45** (3), 275 (2010).
[6] F. Heßberger, S. Antalic, D. Ackermann, B. Andel, M. Block, Z. Kalaninova, B. Kindler, I. Kojouharov, M. Laatiaoui, B. Lommel, A. Mistry, J. Piot, M. Vostinar. The European Physical Journal A, **52** (11), 328 (2016).
[7] S. Hofmann, F. Heßberger, D. Ackermann, G. Münzenberg, S. Antalic, P. Cagarda, B. Kindler, J. Kojouharova, M. Leino, B. Lommel, R. Mann, A. Popeko, S. Reshitko, Š. Šáro, J. Uusitalo, A. Yeremin. The European Physical Journal A, **14** (2), 147 (2002).
[8] D. Rudolph, U. Forsberg, P. Golubev, L. Sarmiento, A. Yakushev, L.L. Andersson, A. Di Nitto, C.E. Düllmann, J. Gates, K. Gregorich, C. Gross, F. Heßberger, R.D. Herzberg, J. Khuyagbaatar, J. Kratz, K. Rykaczewski, M. Schädel, S. Åberg, D. Ackermann, M. Block, H. Brand, B. Carlsson, D. Cox, X. Derkx, K. Eberhardt, J. Even, C. Fahlander, J. Gerl, E. Jäger, B. Kindler, J. Krier, I. Kojouharov, N. Kurz, B. Lommel, A. Mistry, C. Mokry, H. Nitsche, J. Omtvedt, P. Papadakis, I. Ragnarsson, J. Runke, H. Schaffner, B. Schausten, P. Thörle-Pospiech, T. Torres, T. Traut, N. Trautmann, A. Tüler, A. Ward, D. Ward, N. Wiehl. Physical Review Letters, **111** (11), 112502 (2013).
[9] D. Rudolph, U. Forsberg, P. Golubev, L. Sarmiento, A. Yakushev, L.L. Andersson, A. Di Nitto, C.E. Düllmann, J. Gates, K. Gregorich, C. Gross, R.D. Herzberg, F. Heßberger, J. Khuyagbaatar, J. Kratz, K. Rykaczewski, M. Schädel, S. Åberg, D. Ackermann, M. Block, H. Brand, G. Carlsson, D. Cox, X. Derkx, K. Eberhardt, J. Even, C. Fahlander, J. Gerl, E. Jäger, B. Kindler, J. Krier, I. Kojouharov, N. Kurz, B. Lommel, A. Mistry, C. Mokry, H. Nitsche, J. Omtvedt, P. Papadakis, I. Ragnarsson, J. Runke, H. Schaffner, B. Schausten, P. Thörle-Pospiech, T. Torres, T. Traut, N. Trautmann, A. Tüler, A. Ward, D. Ward. Acta Physica Polonica B, **45**, 263 (2014).
[10] J. Gates, K. Gregorich, O. Gothe, E. Uribe, G. Pang, D. Bleuel, M. Block, R. Clark, C. Campbell, H. Crawford, M. Cromaz, A. Di Nitto, C.E. Düllmann, N. Esker, C. Fahlander, P. Fallon, R. Farjadi, U. Forsberg, J. Khuyagbaatar, W. Loveland, A. Macchiavelli, E. May, P. Mudder, D. Olive, A. Rice, J. Rissanen, D. Rudolph, L. Sarmiento, J. Shusterman, M. Stoyer, A. Wiens, A. Yakushev, H. Nitsche. Physical Review C, **92** (2), 021301 (2015).
[11] T.A. Carlson, C. Nestor Jr., F. Malik, T.C. Tucker. Nuclear Physics A, **135** (1), 57 (1969).
[12] C. Lu, F. Malik, T.A. Carlson. Nuclear Physics A, **175** (2), 289 (1971).
[13] T.A. Carlson, C. Nestor Jr. Atomic Data and Nuclear Data Tables, **19** (2), 153 (1977).
[14] C. Thierfelder, P. Schwerdtfeger, F.P. Heßberger, S. Hofmann. The European Physical Journal A, **36** (2), 227 (2008).
[15] В.К. Никулин, М.Б. Тржасковская. Ядерная физика, **83** (5), 402 (2020).
[16] I.I. Tupitsyn, V.M. Shabaev, J.R. Crespo López-Urrutia, I. Draganić, R. Soria Orts, J. Ullrich. Physical Review A, **68** (2), 022511 (2003).
[17] I.I. Tupitsyn, A.V. Volotka, D.A. Glazov, V.M. Shabaev, G. Plunien, J.R. Crespo López-Urrutia, A. Lapierre, J. Ullrich. Physical Review A, **72** (6), 062503 (2005).
[18] I.I. Tupitsyn, N.A. Zubova, V.M. Shabaev, G. Plunien, T. Stöhlker. Physical Review A, **98** (2), 022517 (2018).
[19] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin. Physical Review A, **88** (1), 012513 (2013).
[20] V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin. Computer Physics Communications **189**, 175 (2015); **223**, 69 (2018).
[21] I.I. Tupitsyn, M.G. Kozlov, M.S. Safronova, V.M. Shabaev, V.A. Dzuba. Physical Review Letters, **117** (25), 253001 (2016).
[22] A.V. Malyshev, D.A. Glazov, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, V.A. Yerokhin, V.A. Zaytsev. Physical Review A, **106** (1), 012806 (2022).
[23] W. Pieper, W. Greiner. Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei, **218** (4), 327 (1969).
[24] P. Indelicato, E. Lindroth. Physical Review A, **46** (5), 2426 (1992).

[25] R.D. Deslattes, E.G. Kessler Jr, P. Indelicato, L. De Billy, E. Lindroth, J. Anton. Reviews of Modern Physics, **75** (1), 35 (2003).
[26] NIST X-ray Transition Energies Database, 1999. https://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayTrans/Html/search.html
[27] G. Plunien, G. Soff. Physical Review A, **51** (2), 1119 (1995).
[28] A.V. Nefiodov, L.N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff. Physics Letters A, **222** (4), 227 (1996).
[29] A.V. Volotka, G. Plunien. Physical Review Letters, **113** (2), 023002 (2014).
[30] И.И. Тупицын, А.М. Саетгараев, Д.П. Усов, И.М. Савельев, А.В. Малышев, В.М. Шабаев. Оптика и спектроскопия, **134** (1), 5 (2026).
[31] P.L. Altick, E.N. Moore. Physical Review, **147** (1), 59 (1966).
[32] M.H. Chen, B. Crasemann, H. Mark. Physical Review A, **24** (2), 1158 (1981).
[33] I.M. Savelyev, M.Y. Kaygorodov, Y.S. Kozhedub, A.V. Malyshev, I.I. Tupitsyn, V.M. Shabaev. Physical Review A,**107** (4), 042803 (2023).
[34] Л. Элтон. *Размеры ядер* (ИЛ, Москва, 1962).
[35] V.M. Shabaev. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, **26** (6), 1103 (1993).