

Энергии ионизации Cu-подобных ионов с $Z \leq 92$

© Е.П. Иванова, В.А. Панфилов

Институт спектроскопии РАН,
108840 Троицк, Москва, Россия
e-mail: eivanova@isan.troitsk.ru

Поступила в редакцию 08.04.2022 г.
В окончательной редакции 11.01.2023 г.
Принята к публикации 15.02.2023 г.

Выполнен обзор экспериментальных и теоретических значений энергий ионизации Cu-подобных ионов. В некоторых работах энергии ионизации получены интерполяцией и экстраполяцией модельных потенциалов уравнений Дирака. В других подходах функция зависимости энергии ионизации от Z (Z — заряд ядра) аппроксимируется полиномом со степенной зависимостью от Z с целью добиться минимальной разницы между теоретическими и экспериментальными данными. Компиляция энергий ионизации находится в базе данных Национального института стандартов и технологий (США), где типичная неопределенность составляет несколько единиц в четвертой значащей цифре. Это означает, что для тяжелых ионов погрешность может достигать нескольких десятков тысяч см^{-1} . В данной работе энергии ионизации Cu-подобных ионов уточняются с целью достижения точности до пятой значащей цифры. Разработаны два метода интерполяции и экстраполяции. Масштабирование энергий ионизации вдоль Z : масштабирование приводит функцию зависимости энергий ионизации от Z к виду квазипрямой, т.е. слабо меняющейся функции на интервале 10–15 значений Z . Это позволяет интерполировать функцию с точностью до пятой значащей цифры. Масштабированная уточненная функция зависимости энергии ионизации от Z аппроксимируется аналитическими функциями, которые допускают экстраполяцию с хорошей точностью в область $Z \sim 92$. Релятивистский модельный потенциал используется для интерполяции и экстраполяции энергий ионизации. Параметр релятивистского модельного потенциала для орбитали $4s_{1/2}$ оказался практически линейной функцией от Z для $Z > 70$, что позволило выполнить экстраполяцию с высокой точностью в область $Z \sim 92$. Результаты обеих методик хорошо согласуются вплоть до $Z \sim 92$.

Ключевые слова: атомная спектроскопия, энергия ионизации, Cu-подобная изоэлектронная последовательность, релятивистский модельный потенциал.

DOI: 10.21883/OS.2023.03.55381.3518-22

1. Введение

Энергия ионизации (ionization energy, IE) и спектры высокозарядных ионов представляют важную информацию для развития рентгеновских лазеров, для исследования термоядерной плазмы, а также для тестирования релятивистских расчетов атомных структур ионов с большим значением заряда ядра. Ионы изоэлектронной последовательности меди (Cu-подобные ионы) представляют особый интерес: эти ионы имеют один электрон nlj над плотно связанными заполненными оболочками $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$ (остов), а их спектры остаются простыми даже для ионов с очень высокой степенью ионизации. Поэтому интенсивные линии Cu-подобных ионов часто используются как опорные точки в исследованиях сложных спектров тяжелых ионов. Они также служат индикатором примесей в высокотемпературной плазме. Хотя структура Cu-подобных ионов в основном определяется одним электроном над остовом, их теоретическая интерпретация является весьма сложной для низших членов изоэлектронного ряда с зарядом ядра $Z < 36$ из-за сильного взаимодействия с более сложными конфигурациями, соответствующими возбуждению электрона из остова. Компиляции часто используются

для различных целей, важно установить ошибочные и неточные данные с целью их коррекции.

Спектры Cu-подобных ионов Mo XIV [1], Rb IX [2], Y XI [3], Zr XII [4], Nb XIII [5], Sr X [6] наблюдались в низкоиндуктивной искре и в лазерной плазме в диапазоне 70–630 Å на спектрографах скользящего падения 10.7 м. Уровни энергий Cu-подобных ионов включали серии ns ($n = 4 - 6$), np ($n = 4 - 6$), nd ($n = 4, 5$), nf ($n = 4 - 6$), ng ($n = 5 - 7$). Наблюдаемые уровни энергий сравнивались с хартри-фоковскими расчетами [7,8]. Энергии ионизации определялись с использованием серии ng . За энергию ионизации был принят предел ng -серии. Неопределенность предела оценивалась из неопределенностей измерения длин волн. Для вышеуказанных ионов она составила 200–300 см^{-1} . Спектры Cu-подобных ионов Ru^{15+} , Rh^{16+} , Pd^{17+} , Ag^{18+} , Cd^{19+} , In^{20+} и Sn^{21+} наблюдались в лазерной плазме с использованием спектрографа скользящего падения 10.7 м [9]. Длины волн, уровни энергий и энергии ионизации были установлены для каждого из этих ионов. Энергии ионизации для этих ионов были рассчитаны с использованием энергий конфигураций $5g$ и $6g$ и дирак-фоковского расчета квантового дефекта $\Delta n^*(6g - 5g)$. Энергия ионизации Cu-подобного ксенона была определена подобным обра-

зом в [10], однако здесь неопределенность составила $\sim 3000 \text{ cm}^{-1}$.

Спектры Cu-подобных ионов Ba^{27+} , La^{28+} , Nd^{31+} , Sm^{33+} , Gd^{35+} , Dy^{37+} , Er^{39+} , Yb^{41+} , Ta^{44+} , W^{45+} изучались в лазерной плазме на спектрографе скользящего падения 2.2 m [11]. Длины волн, уровни энергий и энергии ионизации определены для каждого из этих ионов. Хотя серии типа nf ($n = 4-6$) наблюдались для некоторых ионов, большая неопределенность в уровнях энергий с $n = 5, 6$ привела к большой неопределенности в пределах последовательностей. Поэтому значения энергий ионизации были получены с использованием теоретических энергий связи для конфигураций $4f$, $5g$ и $6h$, рассчитанных в [12]. Неопределенность возросла от $900, 1000 \text{ cm}^{-1}$ (для Ba^{27+} , La^{28+}) до 15000 cm^{-1} (для Ta^{44+} , W^{45+}). Спектры высокозарядных ионов Au , Pb , Bi , Th , U ($Z = 79-92$) наблюдались в лазерной плазме на установке OMEGA в университете Рочестера [13]. Идентификация линий в области $9-110 \text{ \AA}$ была выполнена для изоэлектронных последовательностей Fe I , Co I , Cu I , Zn I . Для этих ионов уровни энергии были рассчитаны многоконфигурационным методом Дирака–Фока с учетом брейтовских и квантово-электродинамических (КЭД) поправок по программам [14, 15]. Сопоставление экспериментальных и теоретических длин волн Cu-подобных ионов показало, что учет КЭД поправок значительно улучшает точность рассчитанных длин волн переходов $4s-4p$. Однако существенные различия между наблюдаемыми и расчетными значениями сохраняются. Для Cu-подобных ионов КЭД поправки оказывают заметное влияние только на переходы $4s-4p$ [13].

Спектры Cu-подобных ионов в эксперименте [16] наблюдались в лазерной плазме с двухметровым спектрографом скользящего падения с решеткой 1152 grooves/mm . Длины волн переходов $4-5$ и $4-4$ были исследованы экспериментально для Cu-подобных ионов $\text{Ag}^{18+} - \text{Sn}^{21+}$ ($Z = 47-50$). Для экстраполяции и интерполяции уровней энергии $4lj$ и $5lj$ ($l = 0-3$) в диапазоне $Z = 36-80$ использовался метод релятивистского модельного потенциала (РМП). Было проведено два варианта расчетов. В первом варианте в качестве реперных точек использовались известные экспериментальные энергии для $Z = 36, 42, 56, 63$ [1,9,11]. Уровни энергий, полученные в результате интерполяции и экстраполяции методом РМП, хорошо согласуются с новыми экспериментальными результатами [16]. Во втором — новые экспериментальные уровни энергии [16] использовались для экстраполяции с целью получения более точных сглаженных значений для больших Z .

В эксперименте [17] в спектре лазерной плазмы золота в Cu-подобном ионе Au^{50+} идентифицированы переходы с уровней конфигураций $3d^{10} nf$ ($n = 7, 8$) на $3d^9 4d$, с $3d^{10} nd$ ($n = 6, 7$) и $3d^{10} 7s$ на $3d^{10} 4p$ и с $3d^{10} 6p$ на $3d^{10} 4s$. Полученная энергия ионизации хорошо согласуется с оценками *ab initio* с помощью метода интерполяции РМП [17]. Небольшие отклонения

между экспериментальными и теоретическими энергиями ионизации согласуются для всей последовательности меди и даются прогнозы для ненаблюдаемых элементов. Проверена точность энергий ионизации, полученных методом РМП. Эта модель центрального поля хорошо применима к Cu-подобным ионам, и благодаря новой идентификации верхних уровней в Au^{50+} была установлена согласованность отклонений $[\text{IE}(Z)_{\text{exp}} - [\text{IE}(Z)]_{\text{theor}}$ для широкого круга элементов.

Компиляция энергий возбуждения, энергий ионизации и дипольных поляризуемостей для всей изоэлектронной последовательности меди была выполнена в работе [18]. Расчетные времена жизни для уровней $4p$ и $4d$ в Cu-подобных ионах представлены для атомных номеров $Z = 29-92$. Эти расчеты хорошо согласуются с недавними качественными измерениями времен жизни. Отметим, что результаты для уровня $4d$ были получены простыми методами подгонки под кривую [19–22]. В рамках исследования авторы объединили полуэмпирические параметризации существующих баз данных с расчетами Дирака–Фока, чтобы получить набор значений IE и энергий возбуждения $4p$ и $4d$ для всех стабильных ионов в этой последовательности. Компиляция IE [18] полностью включена в базу данных Национального института стандартов и технологий (NIST) [23]. Энергии ионизации в квадратных скобках в [23] были получены из полуэмпирических (скорректированных) расчетов Дирака–Фока. Для каждого иона дается оценка неопределенности IE. Для некоторых тяжелых ионов заявленная погрешность составляет несколько десятков тысяч cm^{-1} .

Компиляция энергий ионизации NIST от He- до Xe-подобных ионов была пересмотрена в работах [24, 25]. В предварительных работах [26, 27] было показано, что данные NIST для IE атомарных ионов [23], а также корреляционные энергии атомарных ионов могут быть размещены на одной универсальной кривой. Была разработана простая модель, позволяющая идентифицировать проблемные значения IE в конкретной изоэлектронной последовательности [24]. Для каждой изоэлектронной последовательности строится регуляризованный ряд теории возмущений, основанный на поведении IE для $Z \gg N$ и $Z \sim N-1$ (N — количество электронов в атомной системе). Сравнение данных NIST с этой серией позволяет выявить проблемные значения в представленных данных.

В различных работах данные получают интерполяцией и экстраполяцией параметров модельных потенциалов для уравнений Дирака или аппроксимацией IE полиномом со степенной зависимостью от Z с целью достижения минимальной разницы между теоретическими и экспериментальными значениями. Модель [24] для IE представляет собой гладкую интерполяцию, которая соответствует областям как с большим Z (тяжелый ион), так и $Z \sim N-1$ (анион).

Заявленная погрешность в базе данных NIST составляет несколько единиц в четвертой значащей

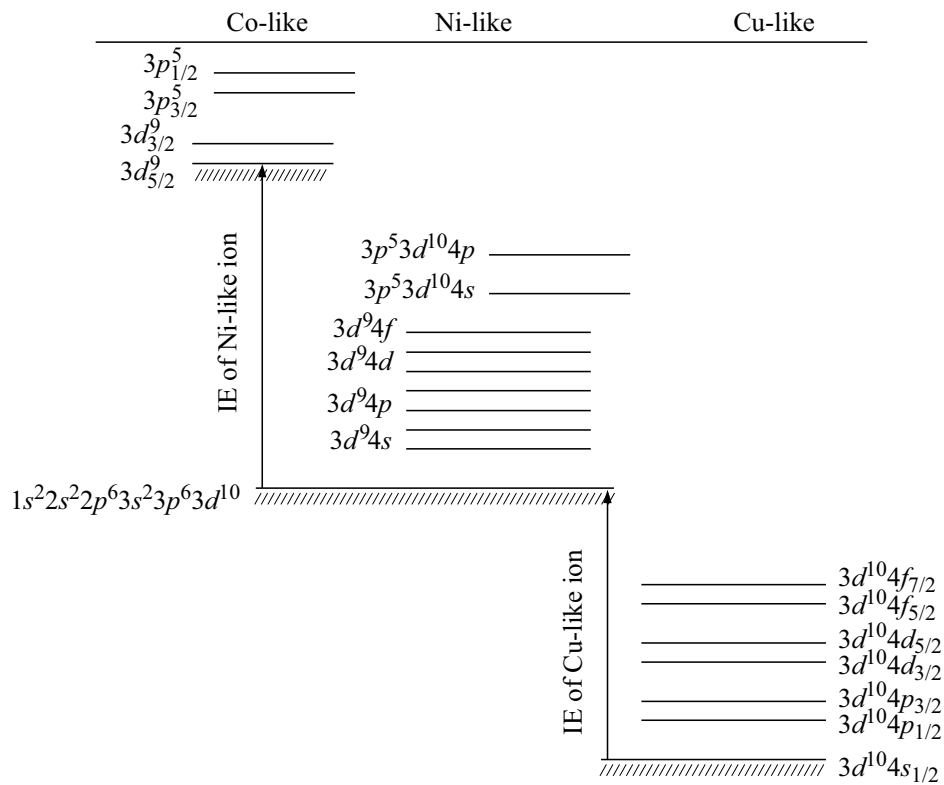


Рис. 1. Схема энергетических уровней Ni-подобного иона, а также ионов смежных стадий ионизации: Cu- и Co-подобной. Показаны первые потенциалы ионизации Cu- и Ni-подобного ионов.

цифре. Это означает, что для некоторых тяжелых ионов погрешность может достигать нескольких десятков тысяч см^{-1} . В настоящей работе предлагаются новые методики определения высокоточных спектроскопических данных вдоль изоэлектронных последовательностей. Разработаны два метода интерполяции и экстраполяции для достижения точности до пятого значащего знака в значениях ИЕ для Cu-подобных ионов.

2. Энергии ионизации для построения модельного потенциала атома

Многочарядные ионы с одним электроном над заполненной оболочкой, а также с одной вакансией в заполненной оболочке представляют интерес для построения одноквазичастичных базисных функций для расчетов спектроскопических характеристик атомных систем с одной, двумя и тремя квазичастицами (квазичастица — электрон или вакансия). Энергии одного электрона и одной вакансии отсчитываются от энергии заполненной оболочки (остова). В качестве примера на рис. 1 приведена диаграмма энергетической структуры Ni-подобных ионов. На диаграмме также показаны энергетические уровни ионов соседних стадий ионизации: Cu-подобного иона с одним электроном над остовом и Co-подобного иона с одной вакансией в остове. Матричный элемент

энергии возбужденного Ni-подобного иона с полным импульсом J и проекцией M_J представляется в виде ряда теории возмущений (ТВ) [28]:

$$E(n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2 [JM_J]) = E_{\text{el}}^0(n_1 l_1 j_1) + E_{\text{vac}}^0(n_2 l_2 j_2) + \Delta E^{(1)} + \Delta E^{(2)} + \dots \quad (1)$$

В расчетах Ni-подобных ионов $E_{\text{el}}^0(n_1 l_1 j_1)$ определяется первой энергией ионизации Cu-подобного иона и энергетической структурой этого иона (рис. 1), $E_{\text{vac}}^0(n_2 l_2 j_2)$ определяется первой энергией ионизации из заполненной оболочки Ni-подобного иона и энергетической структурой Co-подобного иона. Остов $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$ принимается за уровень отсчета энергий. Энергии нулевого приближения $E_{\text{el}}^0(n_1 l_1 j_1)$, $E_{\text{vac}}^0(n_2 l_2 j_2)$ представляют собой эмпирические высокоточные значения энергии электрона над остовом и вакансии в остове соответственно. $E_{\text{el}}^0(n_1 l_1 j_1)$, $E_{\text{vac}}^0(n_2 l_2 j_2)$ дают вклад только в диагональные матричные элементы. В Ni-подобных ионах практически для всех состояний их сумма составляет 80–95% от полной энергии перехода из основного состояния $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$ в возбужденное состояние $E(n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2 [JM_J])$.

Точно определенные одночастичные энергии позволяют учесть подавляющую часть корреляционных, релятивистских и электродинамических эффектов уже в

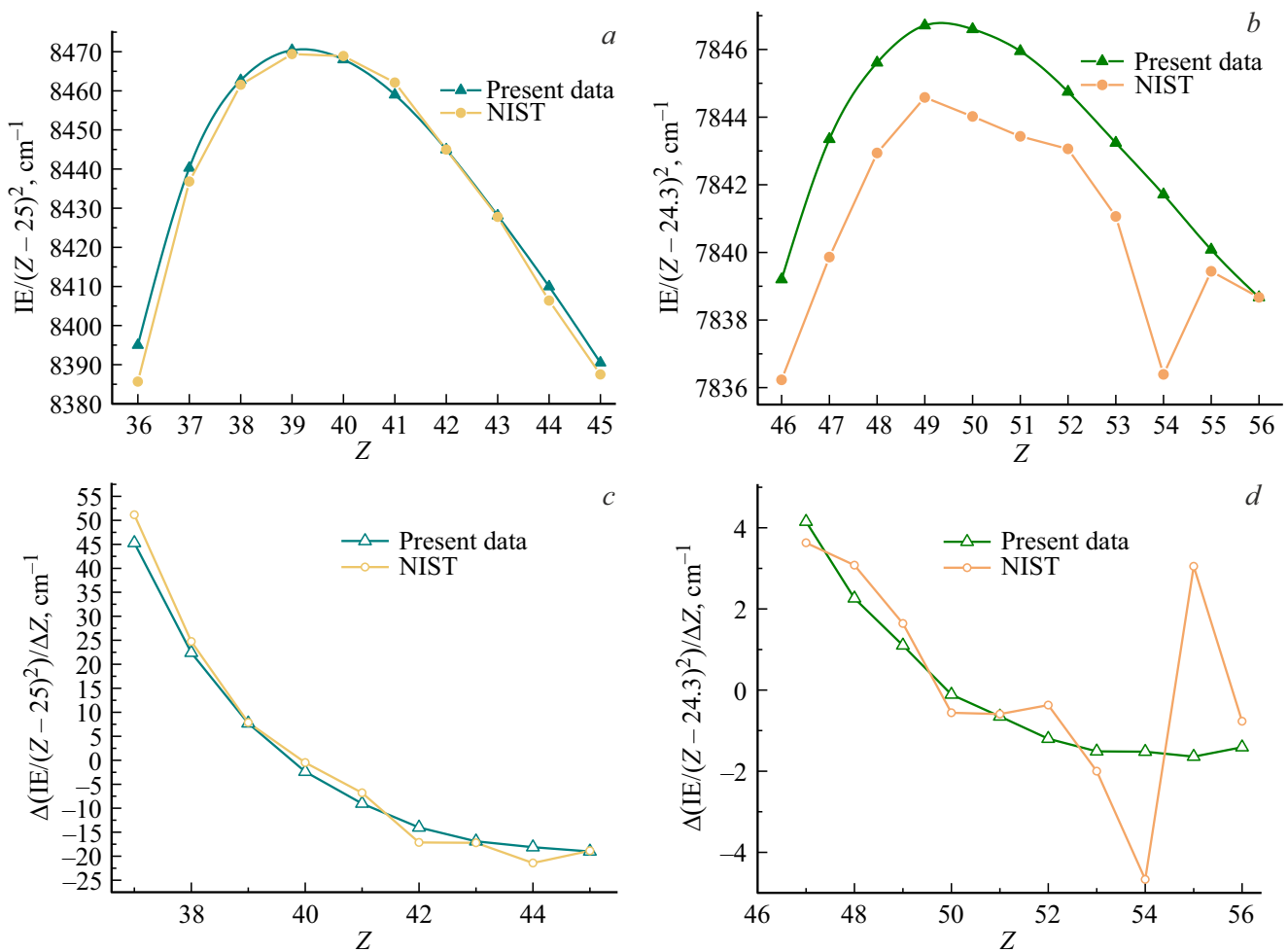


Рис. 2. Масштабированные функции $IE(Z)$ Cu-подобных ионов; (a) $Z = 36 - 45$, (b) $Z = 46 - 56$. Дифференциалы масштабированных функций $IE(Z)$ Cu-подобных ионов: (c) $Z = 37 - 45$, (d) $Z = 47 - 56$.

нулевом порядке ТВ. В рамках ТВ первого порядка необходимо вычислить только матричные элементы взаимодействия электрон-вакансия $\Delta E^{(1)}$ [28]. Базис одночастичных волновых функций находится решением уравнения Дирака с использованием одночастичных энергий $E_{cl}^0(n_1 l_1 j_1)$, $E_{vac}^0(n_2 l_2 j_2)$. Высокая точность базиса волновых функций обуславливает достаточно высокую точность расчета вероятностей радиационных переходов, а также вероятностей переходов, обусловленных электрон-ионными столкновениями. Эти величины являются скоростными коэффициентами в кинетических уравнениях для расчета коэффициентов усиления рентгеновских лазеров. В наших расчетах мы учитываем большую часть $\Delta E^{(2)}$ и частично поправки более высокого порядка ТВ способом, изложенным в [29,30].

В настоящей работе мы анализируем и уточняем энергии ионизации Cu-подобных ионов с $Z \leq 92$ с целью достижения точности в одну-две единицы в пятой значащей цифре, т. е. $1000-2000 \text{ cm}^{-1}$ для тяжелых ионов.

3. Масштабирование энергий ионизации

Значения IE известны с высокой точностью для Cu-подобных ионов, начиная с $Z \leq 53$ [16,23]. Функция $IE(Z)$ для $36 \leq Z \leq 53$ Cu-подобных ионов является плавной кривой с точностью до пятой значащей цифры. Это видно из рис. 2, *a, b*, которые демонстрируют масштабированные IE Cu-подобных ионов для $Z = 36 - 56$, полученные в настоящей работе, и данные NIST [23]. Масштабированные функции $IE(Z)$ на интервале 10–15 значений Z проявляют плавность вплоть до четвертой-пятой значащих цифр.

Различие между данными, полученными в настоящей работе, и данными NIST составляет $\sim 1000-1500 \text{ cm}^{-1}$. Столь хорошее совпадение свидетельствует о высокой точности обеих компиляций. Для демонстрации гладкости кривых на рис. 2, *c, d* приведены дифференциалы масштабированных функций $IE(Z)$. Негладкость можно наблюдать при $Z = 54$ как для масштабированной функ-

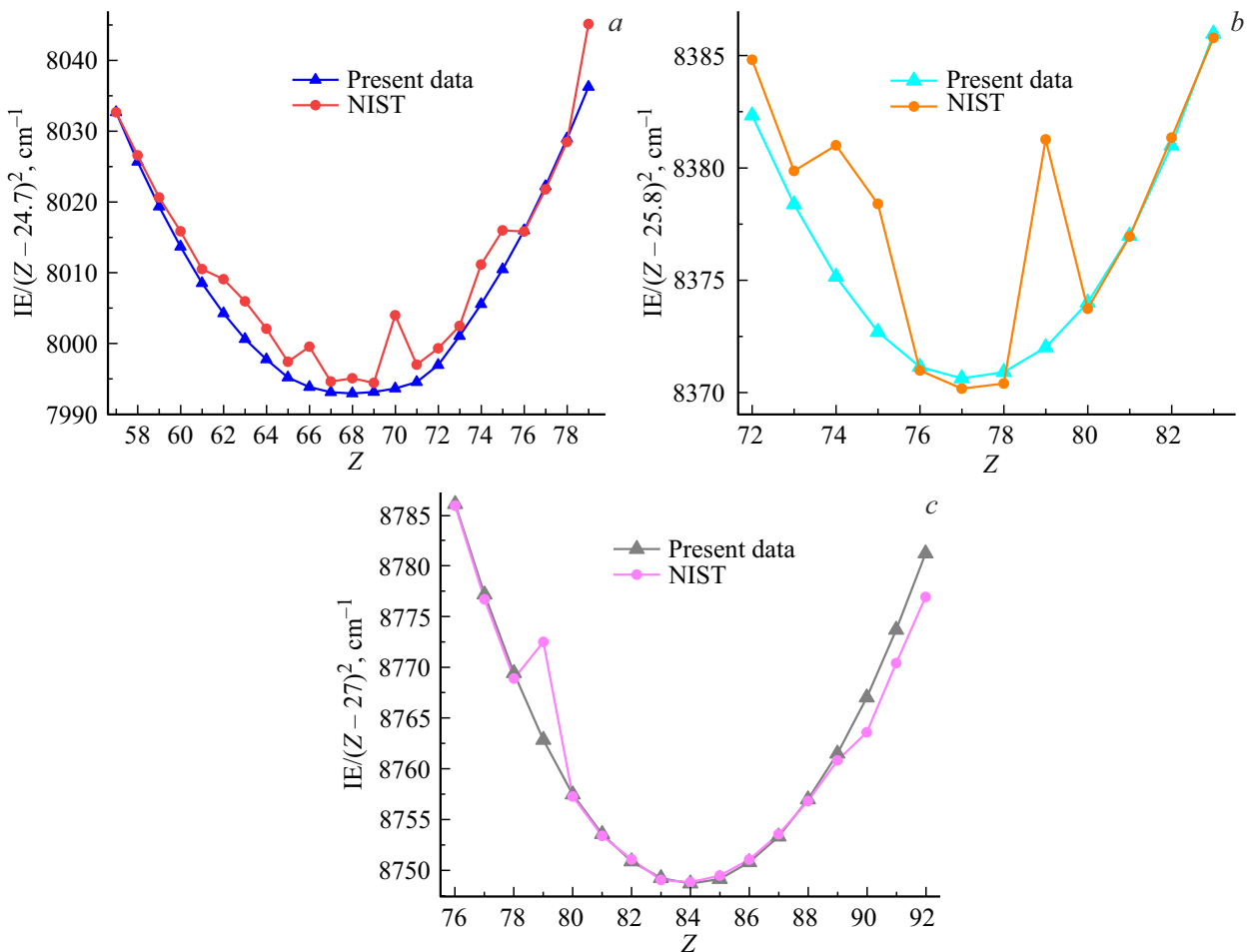


Рис. 3. Масштабированные энергии ионизации Си-подобных ионов: (a) $Z = 57 - 79$, (b) $Z = 72 - 83$, (c) $Z = 76 - 92$.

ции, построенной по данным NIST [23], так и для ее дифференциала (рис. 2, b, d).

Для интерполяции и экстраполяции известных энергий ионизации разработана двухэтапная методика:

— масштабирование функции $IE(Z)$ с целью приведения ее к виду медленно меняющейся функции,

— полиномиальная аппроксимация масштабированной функции, которая позволяет проводить высокоточную интерполяцию и экстраполяцию масштабированной $IE(Z)$.

На рис. 3a, b показана масштабированная сглаженная $IE(Z)$ для интервалов $Z = 57 - 79$, $Z = 72 - 83$. На рис. 3, c показана экстраполяция масштабированной $IE(Z)$ на интервале $Z = 76 - 92$.

Масштабированные функции $IE(Z)$ из компиляции [16] имели небольшие изломы. Здесь они подгоняются под гладкую кривую так же, как это делается, например, в работах [21,22]. На рис. 3, a–c также показаны соответствующие масштабированные значения IE из базы данных NIST [23], для которых наблюдаются существенные изломы. Гладкость проверяется первыми дифференциалами масштабированных функций $IE(Z)$. Дифференциалы масштабированных функций $IE(Z)$ показаны на рис. 4, a–c.

4. Параметр модельного потенциала $b(nlj|Z)$ для интерполяции и экстраполяции $IE(Z)$

Основные положения релятивистской теории возмущений с модельным потенциалом нулевого приближения (РТВМП) изложены в [28]. Одночастичные волновые функции определяются путем решения уравнений Дирака. Модельный потенциал остова $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$ включает потенциал ядра и потенциалы оболочек с $n = 1, 2, 3$:

$$V(r|b(Z)) = - \left(\frac{1}{Zr} \right) \left\{ Z - 2[1 - \exp(-2r)(1+r)] - 8 \left[1 - \exp(-b_2 r) \left(1 + \frac{3}{4} b_2 r + \frac{1}{4} b_2^2 r^2 + \frac{1}{16} b_2^3 r^3 \right) \right] - 18 \left[1 - \exp(-b_3 r) \left(1 + \frac{5}{6} b_3 r + \frac{1}{3} b_3^2 r^2 + \frac{5}{54} b_3^3 r^3 \right) \right] \right\}. \quad (2)$$

Первый член представляет собой кулоновский потенциал точечного ядра. Второе и третье слагаемые —

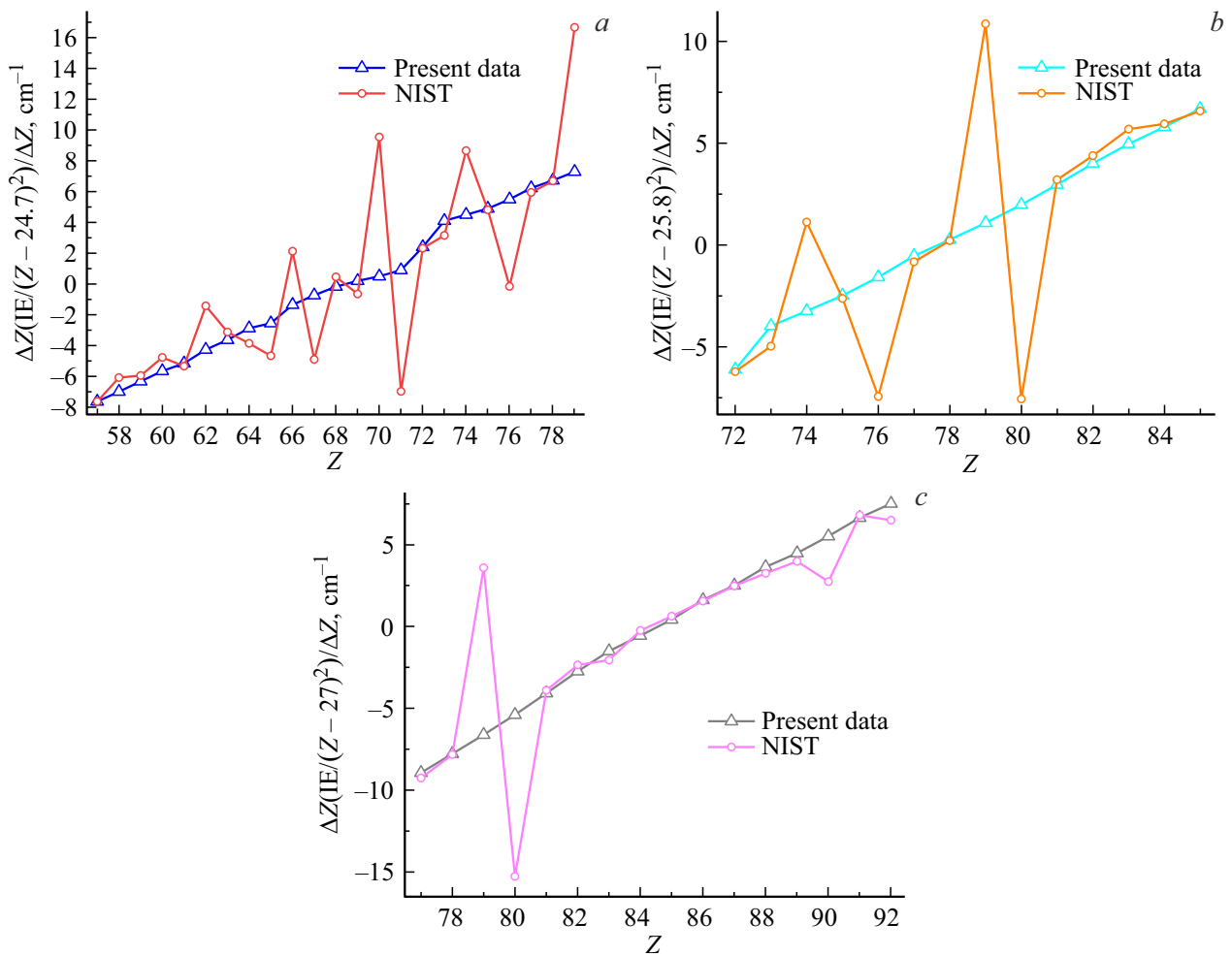


Рис. 4. Дифференциалы масштабированных $IE(Z)$ Cu-подобных ионов: (a) $\Delta Z(IE/(Z - 24.7)^2)/\Delta Z$ для $Z = 57 - 79$, (b) $\Delta Z(IE/(Z - 25.8)^2)/\Delta Z$ для $Z = 72 - 83$, (c) $\Delta Z(IE/(Z - 27)^2)/\Delta Z$ для $Z = 76 - 92$.

потенциалы оболочек остова K и L . Последнее слагаемое — потенциал оболочки M , для которой введен один общий параметр $b_3(nlj|Z)$. Параметр $b_2(nlj|Z)$ был определен ранее при расчетах энергий изоэлектронной последовательности неона [31]. Таким образом, модельный потенциал нулевого приближения (1) является более разработанным, чем тот, что использовался в [16]. Параметр $b_3(nlj|Z)$ описывает состояние орбитали $4lj$, в дальнейшем мы будем обозначать его как $b(nlj|Z)$. Потенциалы оболочек K , L и M остаются неизменными при расчете ионов с возбуждением оболочки N как, например, для Rf-подобных ионов, расчет спектроскопических констант которых выполнен в [32]. Здесь, так же как и во всех предыдущих расчетах методом РТВМП (см., например, [28], а также ссылки в [28] на основополагающие работы [11,12]), вместо атомных единиц (AU) введены кулоновские (CU) единицы длины и энергии: для длины $1 CU = 1 AU \times Z$; для энергии $1 CU = 2 Ry \times Z^2$, для постоянной Ридберга используем $Ry = 109743 \text{ cm}^{-1}$.

Параметр $b(4s_{1/2}|Z)$ подгоняется так, чтобы путем решения уравнения Дирака воспроизвести значение из-

вестной эмпирической энергии $E(4s_{1/2}|Z)$, т.е. первого потенциала ионизации Cu-подобного иона. Аналогичная (обратная) процедура используется для воспроизведения параметра $b(4s_{1/2}|Z)$; а именно энергия $E(4s_{1/2}|Z)$ подгоняется так, чтобы путем решения уравнения Дирака воспроизвести значение экстраполированного параметра $b(4s_{1/2}|Z)$. В обоих случаях подгонка проводится до стабилизации пятой значащей цифры. На рис. 5 показана зависимость параметра $b(4s_{1/2}|Z)$ от Z вдоль изоэлектронной последовательности. Параметры $b(4s_{1/2}|Z)$ для $Z = 36 - 80$ находятся с помощью откорректированных (сглаженных) значений $IE(Z)$ из работы [16]; параметры $b(4s_{1/2}|Z)$ для $Z = 81 - 92$ находятся экстраполяцией. Из рис. 5, c видно, что функция $b(4s_{1/2}|Z)$ практически прямолинейна; параметр $b(4s_{1/2}|Z)$ можно экстраполировать с точностью до четвертой-пятой значащей цифры до $Z = 92$. Подчеркнем, что если значение $b(4s_{1/2}|Z)$ определено с точностью до четвертой значащей цифры, то значение $E(4s_{1/2}|Z)$ может быть определено с точностью до четвертой-пятой значащей цифры.

Таблица 1. Откорректированные и экстраполированные энергии ионизации Си-подобных ионов (cm^{-1}) (PRESENT) по сравнению с базой данных NIST [23]

Z	Ион	PRESENT	NIST	Z	Ion	PRESENT	NIST
36	Kr VIII	1015800	1014665	65	Tb XXXVII	12985600	12988600
37	Rb IX	1215400	1214900	66	Dy XXXVIII	13635100	13644800
38	Sr X	1430200	1430000	67	Ho XXXXIX	14302100	14304800
39	Y XI	1660200	1660000	68	Er XL	14986000	14990000
40	Zr XII	1905300	1905500	69	Tm XLI	15686600	15689100
41	Nb XIII	2165500	2166300	70	Yb XLII	16403800	16425000 **
42	Mb XIV	2440600	2440600	71	Lu XLIII	17137900	17143200 *
43	Tc XV	2730700	[2730600]	72	Hf XLIV	17891600	17896900 *
44	Ru XVI	3036000	3034700	73	Ta XLV	18665700	18669000
45	Rh XVII	3356200	3355000	74	W XLVI	19457500	19471100 **
46	Pd XVIII	3691400	3690000	75	Re XLVII	20267300	20281100 **
47	Ag XIX	4041600	4039800	76	Os XLVIII	21095600	21095200
48	Cd XX	4406800	4405300	77	Ir XLIX	21942000	21941900
49	In XXI	4787200	4785900	78	Pt L	22809400	22808000
50	Sn XXII	5182600	5180900	79	Au LI	23694800	23721000 **
51	Sb XXIII	5593300	5591500	80	Hg LII	24599800	24599000
52	Te XXIV	6019200	6017900	81	Tl LIII	25525400	25524900
53	I XXV	6460400	6458600	82	Pb LIV	26471400	26472000
54	Xe XXVI	6917100	6912400 *	83	Bi LV	27437600	27437000
55	Cs XXVII	7389200	7388600	84	Po LVI	28425500	28424900
56	Ba XXVIII	7877000	7877000	85	At LVII	29432100	29433200
57	La XXIX	8380400	8380800	86	Rn LVIII	30461500	30462400
58	Ce XXX	8899600	8900600	87	Fr LIX	31512000	31512800
59	Pr XXXI	9434700	9436200	88	Ra LX	32584800	32584200 *
60	Nd XXXII	9985800	9988500	89	Ac LXI	33679300	33676700 *
61	Pm XXXIII	10552800	1055400	90	Th LXII	34796500	34782800 **
62	Sm XXXIV	11136300	11143000 *	91	Pa LXIII	35937300	35923800 **
63	Eu XXXV	11736100	11743900 *	92	U LXIV	37101000	37082800 **
64	Gd XXXVI	12352600	12359200 *				

Таблица 2. Сопоставление данных компиляции [18] с базой данных NIST (cm^{-1})

Z	Ион	[18]	NIST
62	Sm XXXIV	11138200	11143000
63	Eu XXXV	11736000	11743900
64	Gd XXXVI	12352400	12359200
70	Yb XLII	16396000	16425000
74	W XLVI	19460000	19471100
75	Re XLVII	20267630	20281100
79	Au LI	23697500	23721000

5. Энергии ионизации Си-подобных ионов

В табл. 1 приведены результаты интерполированных и экстраполированных IE для Си-подобных ионов с $Z = 36 - 92$, которые сопоставляются с базой данных NIST [23]. Из рис. 2–4 следует, что масштабированные функции IE(Z) являются гладкими кривыми. В основном данные двух компиляций различаются на

1000–3000 cm^{-1} , что является признаком высокой точности, особенно для ионов с зарядов $Z \geq 80$. Значок * обозначает ионы, для которых расхождение составляет 5000–8000 cm^{-1} . Значок ** обозначает ионы, для которых расхождение составляет более 14000 cm^{-1} . База данных NIST содержит IE для полной Си-подобной изоэлектронной последовательности из компиляции [18], за исключением 7 ионов, показанных в табл. 2.

Заключение

При теоретическом моделировании рентгеновских лазеров методом РТВМП знание IE с высокой точностью является определяющим для достижения достаточно точных значений коэффициентов усиления [33,34]. Представленный анализ IE для Си-подобных ионов основан на предположении, что состояния иона с электроном над остовом замкнутой оболочки $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s$ достаточно слабо взаимодействуют с состояниями, соответствующими возбуждению электрона из замкнутой оболочки. Это утверждение справедливо для ионов с $Z \geq 36$, что следует из рис. 2, а, б, 3, на которых показана

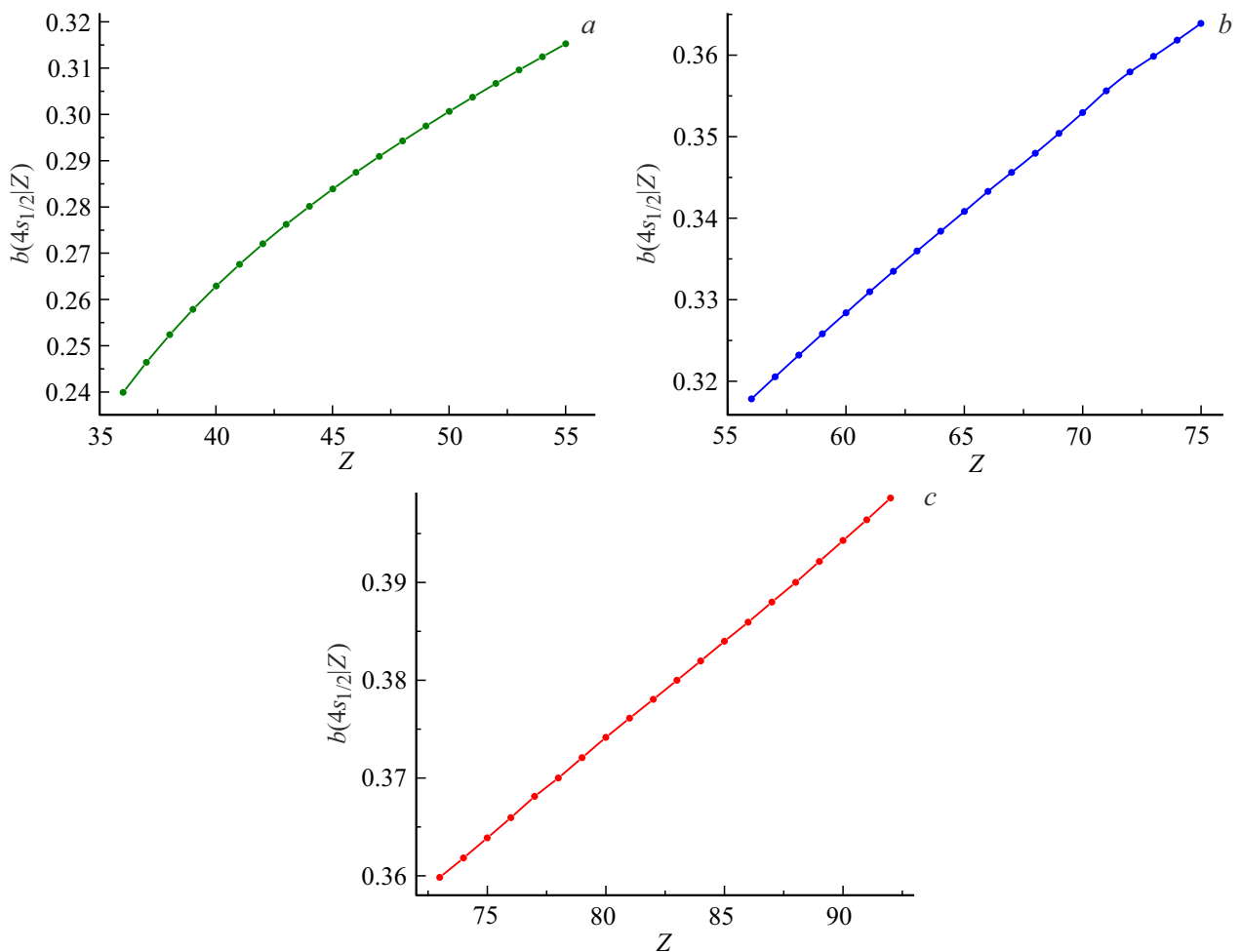


Рис. 5. Параметр модельного потенциала $b(4s_{1/2}|Z)$ для $4s_{1/2}$ -орбитали Cu-подобных ионов (безразмерный): (a) $Z = 36-55$, (b) $Z = 56-75$, (c) $Z = 73-92$.

гладкость $IE(Z)$ для Cu-подобных ионов с $Z \geq 36$ до пятой значащей цифры.

Проведенный здесь анализ показал, что ошибки значений IE из базы данных NIST значительно меньше, чем это указано в самой базе NIST. На графиках масштабированных функций $IE(Z)$ и их дифференциалов, построенных по данным NIST, есть несколько изломов, которые показаны на рис. 2–4.

Компиляции [17,18,24–26] проверяют точность путем аппроксимации функции $IE(Z)$ различными полиномами для всей последовательности. Рисунки 2, a–c показывают, что функциональные зависимости $IE(Z)$ для трех интервалов Z сильно различаются. Отсюда следует, что на всем интервале $Z = 30-92$ функцию $IE(Z)$ можно представить в виде степенного полинома с достаточно большой ошибкой в четвертой значащей цифре. Наш подход исследует гладкость функции $IE(Z)$, аппроксимированной квадратичным полиномом на отрезках из 10–15 значений Z . Масштабированная функция $IE(Z)$ изменяется на отрезке 0–15 значений Z в четвертом значащем знаке, что позволяет уверенно

проводить интерполяцию с точностью до пятого значащего знака. Масштабированная функция $IE(Z)$ может быть экстраполирована с высокой точностью в область $Z = 92$. Качество экстраполяции контролируется поведением дифференциала функции $IE(Z)$. В другом методе нашей работы модельный потенциал уравнения Дирака использовался для интерполяции и экстраполяции IE в диапазоне $Z = 36-92$. Параметр модельного потенциала $b(4s_{1/2}|Z)$ для орбитали $4s_{1/2}$ оказался практически линейной функцией в области $Z > 70$, а экстраполяция параметра релятивистского модельного потенциала оказалась эффективным методом определения IE в области $Z \sim 92$. Результаты экстраполяции по обоим методикам совпадают до пятой значащей цифры.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках проекта Госзадания FFUU-2022-0005.

Конфликт интересов

В данной работе отсутствуют какие-либо конфликты интересов.

Список литературы

- [1] J. Reader, G. Luther, N. Acquista. *J. Opt. Soc. Am.*, **69** (1) 144 (1979).
- [2] S. Goldsmith, J. Reader, N. Acquista. *J. Opt. Soc. Am.*, **B**, **1** (4) 631 (1984).
- [3] J. Reader, N. Aquista. *J. Opt. Soc. Am.*, **69**, (9) 1285 (1979).
- [4] J. Reader, N. Acquista. *J. Opt. Soc. Am.*, **69** (12) 1659 (1979).
- [5] J. Reader, N. Acquista. *J. Opt. Soc. Am.*, **70** (3) 317 (1980).
- [6] N. Acquista, J. Reader. *J. Opt. Soc. Am.*, **71** (5) 569 (1981).
- [7] T. Cheng, Y.-K. Kim. *At. Data Nucl. Data Tables.*, **22**, 547 (1978).
- [8] G.C. Rodrigues, P. Indelicato, J.P. Santos, P. Patté P., F. Parrente. *At. Data and Nuclear Data Tables*, **86**, 117 (2004).
- [9] J. Reader, N. Acquista, D. Cooper. *J. Opt. Soc. Am.*, **73** (12), 1765 (1983).
- [10] V. Kaufman, J. Sugar, W.L. Rowan. *J. Opt. Soc. Am.*, **5** (6), 1273 (1988).
- [11] J. Reader, G. Luther. *Physica Scripta*, **24**, 732 (1981).
- [12] K.T. Cheng, Y.-K. Kim. Private communication (1980).
- [13] J.F. Seely, J.O. Ekberg, C.M. Brown, U. Feldman, W.E. Behring, J. Reader, M.C. Richardson. *Phys. Rev. Lett.*, **57** (23), 2924 (1986).
- [14] I.P. Grant, B.J. McKenzie, P.H. Norrington, D.F. Mayers, M.C. Pyper. *Comput. Phys. Commun.*, **21**, 207 (1980).
- [15] B.J. McKenzie, I.P. Grant, P.H. Norrington. *Comput. Phys. Commun.*, **21**, 233 (1980).
- [16] L.N. Ivanov, E.P. Ivanova, E.Ya. Kononov, S.S. Churilov, M.A. Tsirekidze. *Physica Scripta*, **33**, 401 (1986).
- [17] N. Tragin, J.-P. Geindre, C. Chenais-Popovich, J.-C. Gauthier, J.-F. Wyart, E. Luc-Koenig. *Phys. Rev. A*, **39** (4), 2085 (1989).
- [18] L.J. Curtis, C.E. Theodosiou. *Phys. Rev. A*, **39** (2), 605 (1989).
- [19] I. Martinson, L.J. Curtis, S. Huldt, U. Litzen, L. Liljeby, S. Mannervik, B. Jelenkovic. *Physica Scripta*, **19**, 17 (1979).
- [20] E.H. Pinnington, J.L. Bahr, D.J.G. Irwin. *Phys. Lett. A*, **84** (5), 247 (1981).
- [21] J.L. Bahr, E.H. Pinnington, J.A. Kernahan, J.A. O'Neill. *Can. J. Phys.*, **60**, 1108 (1982).
- [22] L.J. Curtis, B. Engman, I. Martinson. *Physica Scripta*, **13**, 109 (1976).
- [23] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team (2012). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0), Online. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2013, March 4]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. Access date: August, 2013.
- [24] G. Gil, A. González. *Can. J. Phys.*, **95** (2), 184 (2016).
- [25] G. Gil, A. González. *Can. J. Phys.*, **95** (3), 479 (2017).
- [26] R. Carcasses, A. González. *Phys. Rev. A*, **80**, 024502 (2009).
- [27] A. Odriazola, A. González, E. Räsänen. *Phys. Rev. A*, **90**, 052510 (2014).
- [28] Е.П. Иванова. *Опт. и спектр.*, **117** (2), 179 (2014). [E.P. Ivanova. *Opt. Spectrosc.*, **117** (2), 167 (2014)].
- [29] E.P. Ivanova, L.N. Ivanov, A.E. Kramida, A.E. Glushkov. *Physica Scripta*, **32**, 513 (1985).
- [30] E.P. Ivanova. *At. Data Nucl. Data Tables*, **139**, 101413 (2021).
- [31] E.P. Ivanova, A.V. Gulov. *At. Data Nucl. Data Tables*, **49**, 1 (1991).
- [32] Е.П. Иванова. *Опт. и спектр.*, **94** (2), 181 (2003). [E.P. Ivanova. *Opt. Spectrosc.*, **94** (2), 151 (2003)].
- [33] E.P. Ivanova. *Laser Phys. Lett.*, **15**, 095803 (2018).
- [34] Е.П. Иванова. *Опт. и спектр.*, **127** (1), 74 (2019). [E.P. Ivanova. *Opt. Spectrosc.*, **127** (1) 69 (2019)].