

ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ

УДК 541.124.7

НОВЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ
ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ И ИОНОВ
СО СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ТОЧНОСТЬЮ

Глушков А. В., Иванова Е. П.

Потенциалы ионизации (ПИ) — одна из важнейших характеристик атомной системы. Они необходимы при построении кинетических моделей плазменных процессов, изучении спектров звездных атмосфер, создании ионных источников. Как известно, ПИ является пределом определенной серийной последовательности: если предел известен с высокой точностью, то намного упрощается задача отождествления членов серии, т. е. отдельных линий, соответствующих переходам с высоколежащих уровней. Обычно задача решается как раз наоборот: ПИ определяются экспериментально как предел некоторой спектральной серии. Достоверность имеющихся в справочной литературе данных [1, 2] оценивать трудно. Наиболее качественные данные получены, по-видимому, для ионов с одним электроном сверх заполненной оболочки (для таких систем ПИ могут быть надежно экстраполированы вдоль изoelekтронной последовательности (ИП)). По мере заполнения электронной оболочки, а также для систем, обладающих в основном состоянии замкнутой оболочкой, задача определения ПИ быстро усложняется. Современные априорные теоретические методы приемлемы при расчетах энергий переходов, расщеплений термов и т. п., однако расчет ПИ представляет весьма сложную процедуру, а более распространенные методы расчета ПИ по упрощенным моделям [3] из-за невысокой точности ($\approx 5-10\%$) не всегда удовлетворяют требованиям, возникающим в различных приложениях.

В настоящем сообщении предлагается эффективный подход к определению ПИ атомов и ионов со спектроскопической точностью, в основе которого лежит метод модельного потенциала (МП) [4]. Для определенности рассмотрим энергии связи электрона в неоподобной ИП. Характеристики именно такой системы особенно важны, поскольку неоподобные ионы существуют в плазме в наиболее широком интервале температур и плотностей по сравнению с другими ионами (это обусловлено скачкообразным увеличением ПИ при переходе к оболочке с $n=2$). Энергия возбужденного состояния Ne-подобного иона в рамках релятивистской теории возмущений (ТВ) с модельным нулевым приближением [4, 5] представляется в виде

$$E(nl; n'l'j') = E_{\text{вак}}^0(nlj) + E_{\text{эл}}^0(n'l'j') + \Delta E^{(1)} + \Delta E^{(2)} + \dots,$$

где $E_{\text{вак}}^0(nlj)$, $E_{\text{эл}}^0(n'l'j')$ — одночастичные энергии вакансии в остоле и электрона над остовом (отсчет производится от полной энергии остова). Если в качестве $E_{\text{вак}}^0(nlj)$, $E_{\text{эл}}^0(n'l'j')$ взяты точные (экспериментальные) значения одночастичных энергий, то нулевой порядок ТВ уже содержит подавляющую часть релятивистских и большую часть корреляционных эффектов. Для вакансии $E_{\text{вак}}^0(nlj)$ определяется ПИ из Ne-подобного иона и расщеплением $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ во F -образном ионе. Это расщепление весьма тщательно изучено экспериментально [6], имеются также теоретические данные [7, 8]. Для электрона $E_{\text{эл}}^0(nlj)$ определяется первым ПИ Na-подобного иона и структурой спектра одного электрона над остовом. Эти состояния также достаточно подробно и надежно

изучены экспериментально (результаты экстраполяции приведены в [9]). Таким образом, недостающая исходная информация о нулевом приближении — это ПИ из замкнутой оболочки, а именно величина $E_{\text{вак}}^0(nlj) = E_{\text{вак}}^{0(\text{точн})}(nlj) \pm \pm \epsilon_{\text{вак}}(nlj)$ определена «затравочно» с точностью до константы $\pm \epsilon_{\text{вак}}(nlj)$. Если известна экспериментальная энергия 2—3 перехода $E(nlj; n'l'j')$, тогда ошибка $\pm \epsilon_{\text{вак}}$ «затравочного» ПИ может быть легко найдена из сопоставления теоретических и экспериментальных энергий перехода $2p^6-2p^53l$. Мы провели расчет Ne-подобных спектров для $Z=16-80$; расчет свелся к вычислению поправки первого порядка ΔE^1 ТВ (методику расчета см. в [4, 5]). Качество расчета проверялось на малых $Z \leq 19$, для которых ПИ из [1] для $E_{\text{вак}}^0(nlj)$ можно считать надежными. Сравнение с последними экспериментами [10] показало, что все энергии нижних переходов $2p^6-2p^53s$ найдены с весьма высокой $\approx 0.1\%$ точностью, т. е. абсолютная величина ошибки 1—2 тыс. см⁻¹. Эта ошибка связана главным образом с корреляционными эффектами высших порядков ТВ, которые с ростом Z остаются практически неизменными, в то время как энергия перехода $\sim Z^2$ (поэтому относительная погрешность расчета, очевидно, с ростом Z падает). Допустим, что энергия вакансии над остовом взята с погрешностью 1—2 %. В результате теоретический спектр окажется сдвинут относительно экспериментального на величину $\pm \epsilon(nlj|Z)$ ошибки в определении $E_{\text{вак}}^0(nlj|Z)$. Используя экспериментально измеренные энергии переходов $2p^6-2p^53l$, определяем $E_{\text{вак}}^{0(\text{точн})}(nlj|Z)$ (заметим, что для нахождения $E_{\text{вак}}^0(nlj)$ достаточно всего лишь одной экспериментальной линии). Точность найденного таким образом ПИ определяется точностью измерения энергии $E(nlj, n'l'j'|Z)$ (0.001—0.003 Å), а также точностью расчета теоретического спектра, т. е. поправок $\Delta E^{(1)}$. Данные о ПИ для $Z \leq 30$ имеются в [1, 2]. Оказалось, что лишь для $Z \leq 24$ справочные данные совпадают с нашими, далее наблюдается резкое рассогласование результатов нашей работы и [1, 2], что продемонстрировано в таблице. Как показал анализ ПИ из [1, 2] на гладкость как функцию Z , в точке $Z=24$ вторая производная справочных ПИ испытывает резкий скачок. Такая сингулярность в поведении ПИ как функции Z могла бы свидетельствовать о резкой перестройке типа коллапса в электронной оболочке остова.

Потенциалы ионизации и их вторые разности для ионов ИП неона в единицах 10³ см⁻¹

Z	ПИ [1, 2]	Вторые разности ПИ [1, 2]	ПИ на- стоящая работа	Вто- рые разности ПИ	Z	ПИ на- стоящая работа	Вто- рые разности ПИ	Z	ПИ на- стоящая работа	Вторые разности ПИ
11	381				31	16195	57	56	67204	56
12	646				32	17565	55	57	69974	57
13	968	56			33	18987	53	58	72797	53
14	1345	57			34	20466	56	59	75678	58
15	1778	55			35	22004	58	60	78614	55
16	2266	55	2266	55	36	23597	54	61	81606	56
17	2809	55	2809	55	37	25245	55	62	84655	57
18	3407	55	3407	55	38	26948	55	63	87759	55
19	4061	56	4061	56	39	28709	57	64	90917	54
20	4769	54	4769	54	40	30526	56	65	94132	56
21	5532	55	5532	55	41	32399	57	66	97404	57
22	6350	55	6350	55	42	34326	54	67	100733	57
23	7224	56	7224	56	43	36310	56	68	104115	53
24	8152	54	8152	54	44	38350	56	69	107554	57
25	9164	84	9134	54	45	40447	57	70	111049	57
26	10212	36	10173	57	46	42599	55	71	114602	57
27	11316	56	11267	54	47	44808	57	72	118209	54
28	12477	57	12416	55	48	47071	54	73	121870	54
29	13695	57	13621	56	49	49392	58	74	125587	56
30	14969	56	14880	55	50	51768	55	75	129361	57
					51	54200	56	76	133192	57
					52	56689	57	77	137078	55
					53	59234	56	78	141021	57
					54	61834	55	79	145019	55
					55	64491	57	80	149074	57

Тогда это явление было бы отражено и в спектрах, однако анализ спектров Ne-подобных ионов вдоль ИП показал, что все энергии переходов являются гладкими функциями Z . Следовательно, справочные данные для $Z=25-30$ следует считать ошибочными. Такая ошибка возникла, по-видимому, в результате экстраполяции энергии связи вдоль Z (энергия связи электрона в заполненной оболочке является довольно сложной функцией Z). Для нахождения ПИ мы использовали многочисленные данные по переходам в Ne-подобных ионах (компиляция в [11]). Максимальные значения зарядов ядра, для которых зарегистрированы переходы в Ne-подобных ионах, равны $Z=56-59$ [12]. Значения ПИ, помещенные в таблицу, получены в результате сглаживания и экстраполяции по Z . В таблице даны также вторые разности ПИ как функции Z ; эта величина является практически постоянной, отклонения свидетельствуют о точности приводимых данных. Постоянство второй производной ПИ по Z говорит о том, что члены высоких степеней, ответственные за описание релятивистских и радиационных эффектов $\sim Z^3$ и $\sim Z^4$, полностью компенсируют друг друга вдоль всей ИП. Роль указанных эффектов тем не менее очень велика, она полностью определяется членами более низких степеней Z . В расщеплении Ne-подобных спектров проявилась также сильная компенсация между собой различных корреляционных поправок. Подобные явления компенсации различных членов ТВ вообще характерны для атомных систем с вакансиями в остовах, что и обуславливает значительные трудности в расчетах их спектров. В заключение укажем, что метод модельного потенциала, использующий в качестве нулевого приближения экспериментальные (или надежно экстраполированные) энергии одной частицы над остовом, дает энергию двух и более частиц, также отсчитанную от энергии остова, поэтому при последовательном переходе от расчетов простых к расчетам более сложных систем этот метод может эффективно применяться для определения ПИ атомных систем из состояний с двумя и более частицами над остовом.

Литература

- [1] Moore C. E. Ionization potentials and ionization limit derived from the analyses of optical spectra, NSRDS-NBS, 1970.
- [2] Moore C. E. Atomic Energy Levels, NSRDS-NBS, 1971, v. I—III, p. 35.
- [3] Carlson T. A., Nestor C. W., Wasserman J. N., McDowell J. D. — Atom. Data a. Nucl. Data Tables, 1970, v. 2, p. 63.
- [4] Ivanov L. N., Podobedova L. I. — J. Phys. B, 1977, v. 10, p. 1001.
- [5] Иванова Е. П. — В кн.: Автоионизационные явления в атомах: Тр. II науч. семинара. М., 1981.
- [6] Edlen B. — Phys. Scr., 1983, v. 28, p. 51.
- [7] Draker M. N., Ivanova E. P., Ivanov L. N., Shestakov A. F. — JQSRT, 1982, v. 28, p. 531.
- [8] Cheng K. T., Kim Y. K., Desclaux J. P. — Atom. Data a. Nucl. Data Tables, 1979, v. 24, p. 111.
- [9] Ivanov L. N., Ivanova E. P. — Atom. Data a. Nucl. Data Tables, 1979, v. 23, p. 95.
- [10] Крамида А. Е. — Автореф. канд. дис., М., 1983.
- [11] Аглицкий Е. В., Сафронова У. И., Шляпцева А. С. — В кн.: Релятивистские и радиационные явления в атомах и ионах. М., 1983.
- [12] Аглицкий Е. В., Анциферов П. С., Панин А. М., Мандельштам С. Л. — Can. J. Phys., 1984, v. 62, N 12.

Поступило в Редакцию 30 октября 1984 г.