

УДК 537.531 : 535.3 : 546.74-128

ЭНЕРГИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ПЕРЕХОДОВ
В ТЯЖЕЛЫХ Ni ПОДОБНЫХ ИОНАХ

Гогава А. Л., Иванова Е. П.

Методом релятивистской теории возмущений с модельным нулевым приближением проведен расчет спектров в рентгеновской области ионов изоэлектронной последовательности Ni. Одночастичные энергии нулевого приближения: вакансии в остоле и электрона над остовом — составляют около 97 % всей энергии перехода из основного в возбужденное состояние. Наблюдается быстрая сходимость ряда теории возмущений. Расчет выполнен для зарядов ядер $Z=69-83$. Проводится критический анализ известных экспериментальных результатов для этой последовательности.

Рентгеновские спектры Ni подобных ионов являются важнейшей характеристикой высокотемпературной плазмы. Эти ионы в основном состоянии имеют заполненную $3d$ -оболочку; при переходе от ионов с заполняющейся оболочкой $n=4$ к ионам с оболочкой $n=3$ потенциал ионизации резко увеличивается, вследствие этого плотность Ni подобных ионов в плазме весьма велика, а их спектры характеризуются рядом интенсивных линий, соответствующим переходам в основное состояние с $\Delta J=1$. Спектры Ni подобных ионов с промежуточным зарядом ядра ($38 \leq Z \leq 50$) изучены достаточно подробно [1, 2]. Более поздние работы посвящены изучению тяжелых ионов: в [3] идентифицированы Ni подобные спектры HfXLV, TaXLVI, WXLVII и ReXLVIII ($Z=72-75$) и, кроме того, уточнены данные по спектрам SmXXXV, GdXXXVII и DyXXXIX ($Z=62, 64, 66$). В [4] исследовались спектры TmXLII и YbXLIII. Идентификация спектров, принадлежащих TaXLVI, была выполнена также в [5]. В [6] идентифицированы линии 6 переходов в Ni подобной платине ($Z=78$), это максимальный заряд ядра на сегодняшний день, для которого имеются спектральные характеристики Ni подобных ионов.

Изучение тяжелых Ni подобных ионов проводилось в основном на установках, генерирующих лазерную плазму. Однако возможно наблюдение таких спектров и на установках, использующих низкоиндуктивную вакуумную искру [7], на токамаках, на установках с взрывающимися проволочками [8].

Данные по спектрам Ni подобных ионов будут особенно полезны при исследовании плазмы очень тяжелых элементов с $Z > 80$. По мере увеличения заряда ядра исследуемого элемента быстро усложняется задача идентификации его спектров. Это объясняется увеличением числа ионов более низкой кратности ионизации, излучающих интенсивные линии в той же области спектра, что Ni подобный ион; другая причина — относительное уменьшение плотности Ni подобных ионов. Обычно идентификация Ni подобных спектров проводится на основе экстраполяции уровней энергии вдоль изоэлектронной последовательности, кроме того, используются традиционные «априорные» методы расчета [9]. Качество экстраполяции уровней энергии в значительной мере определяется точностью их измерений для предыдущих членов последовательности. Погрешность измерения энергий переходов в [1-6] оценивается авторами в среднем $\pm 0.005 \text{ \AA}$, что составляет $\approx 8000-10\,000 \text{ см}^{-1}$, т. е. несколько единиц в четвертой значащей цифре. Следует отметить, что качество измерения энергий нижних переходов ($3d^{10}-3d^9 4p$) обычно заметно выше, чем переходов более высоких. Энергии последних нуждаются в дополнительных критических оценках либо в повторных измерениях. При экстраполяции энергий вдоль Z неизбежна по-

теря точности, так что в лучшем случае экстраполяция энергий даст значения с погрешностью в несколько долей процента, что явно недостаточно для надежной идентификации спектров в области высоких Z .

Что касается расчетов, проводимых методом Хартри—Фока—Дирака на замороженном осто́ве с параметрическим потенциалом [9], то они дают расхождение с экспериментом на несколько миллиангстрем в области средних Z , причем расчеты для высоких зарядов [3] из-за неполного учета релятивистских эффектов в этом методе значительно уступают по точности расчетам, выполненным для более низких зарядов ядра. Обычно при использовании таких расчетов проводят экстраполяцию рассогласования расчетной энергии уровня с экспериментальной с тем, чтобы повысить точность предсказуемых положений уровней. Однако в рассматриваемом случае точность экспериментальных измерений слишком низка, чтобы проводить надежную экстраполяцию рассогласования.

В настоящей работе на основе релятивистской теории возмущений с модельным нулевым приближением выполнен расчет первых 11 уровней энергии, соответствующих переходу с $\Delta J=1$, в Ni подобных ионах с зарядом ядра $Z=69\div83$. Характерной особенностью нашего расчета является то, что в нулевом порядке используется экспериментальная информация о структуре термов ионов с одним электроном над осто́вом 28 электронов или с одной вакансией над тем же осто́вом.

Результаты расчета

Энергия возбужденного состояния Ni подобного иона представляется в виде ряда

$$E(nlj; n'l'j') = E_{nlj}^{0эл} + E_{n'l'j'}^{0вак} + \Delta E_1 + \Delta E_2 + \dots$$

В качестве нулевого приближения мы принимаем сумму энергий одного электрона nlj над осто́вом и одной вакансии $n'l'j'$ в этом же осто́ве. Метод расчета поправок ΔE_1 , ΔE_2 достаточно подробно рассмотрен в [10, 11], в частности на примере расчета спектров Ne подобных ионов в [11, 12]. Уровни энергии

Таблица 1
Потенциалы ионизации Ni подобных ионов (энергия состояния вакансии $3d_{5/2}$ в осто́ве) и энергии уровней Co подобных ионов, отсчитанные от основного уровня $3d_{5/2}$ (см⁻¹)

Z	$3d_{5/2}$ (Пн)	$3d_{5/2}$	$3p_{3/2}$	$3p_{1/2}$
60	17259300	189228	2467908	3349164
61	18206700	205949	2540219	3496073
62	49172900	223750	2613730	3648914
63	20158400	242666	2688616	3808067
64	21155950	262752	2764642	3973508
65	22187750	284051	2842021	4145666
66	23250050	306610	2920990	4324998
67	24338100	330477	3001436	4511618
68	25454100	355700	3083550	4705947
69	26599700	382329	3167353	4908244
70	27779300	410451	3252951	5118857
71	28965700	440046	3340446	5338134
72	30177500	471201	3430301	5566793
73	31414900	503968	3520768	5803344
74	32680500	538400	3613400	6049604
75	33966400	574553	3710553	6308198
76	35280700	612480	3804380	6571556
77	36620700	652239	3902489	6847566
78	37989500	693885	4002885	7134521
79	39374600	737476	4116376	7443521
80	40788500	783071	4209771	7742132
81	42231500	830727	4316527	8063227
82	43696800	880506	4425606	8396511
83	45187800	932468	4536968	8742261

Конфигурация	Z						
	69 [°]	70 [°]	71	72 [°]	73 [°]	74 [°]	75 [°]
$3d_{3/2}4p_{1/2}$	8.7330 (8.734)	8.3765 (8.377)	8.0484	7.7396 (7.739)	7.4482 (7.447)	7.1722 (7.170)	6.9141 (6.914)
$3d_{3/2}4p_{3/2}$	8.5893 (8.591)	8.2323 (8.235)	7.9035	7.5936 (7.594)	7.3013 (7.301)	7.0244 (7.024)	6.7651 (6.765)
$3d_{5/2}4p_{3/2}$	8.3269 (8.326)	7.9733 (7.978)	7.6474	7.3404 (7.339)	7.0508 (7.051)	6.7765 (6.775)	6.5197 (6.518)
$3p_{3/2}4s_{1/2}$	7.3696 (7.370)	7.0938 (7.099)	6.8383	6.5966 (6.596)	6.3676 (6.370)	6.1497 (6.154)	5.9449 (5.943)
$3d_{3/2}4f_{5/2}$	7.1882 (7.184)	6.9072 (6.914)	6.6468	6.4005 (6.419)	6.1674 (6.176)	5.9457 (5.956)	5.7373 (5.740)
$3d_{3/2}4f_{7/2}$	7.0979 (7.099)	6.8195 (6.822)	6.5614	6.3174 (6.317)	6.0864 (6.092)	5.8669 (5.871)	5.6605 (5.663)
$3d_{3/2}4f_{3/2}$	6.8955 (6.890)	6.6222 (6.620)	6.3687	6.1291 (6.125)	5.9021 (5.907)	6.6863 (5.689)	5.4834 (5.484)
$3p_{1/2}4s_{1/2}$	6.5388 (6.528)	6.2719 (6.270)	6.0237	5.7888 (5.780)	5.5664 (5.551)	5.3551 (5.340)	5.1562 (5.139)
$3p_{3/2}4d_{3/2}$	6.3006 (6.296)	6.0650 (6.061)	5.8456	5.6376 (5.640)	5.4400 (5.434)	5.2518 (5.247)	5.0742 (5.070)
$3p_{3/2}4d_{5/2}$	6.2448 (6.245)	6.0095	5.7905	5.5827 (5.586)	5.3855 (5.380)	5.1976 (5.194)	5.0203 (5.017)
$3p_{1/2}4d_{3/2}$	5.6721 (5.655)	5.4434 (5.442)	5.2299	5.0275 (5.014)	4.8354 (4.820)	4.6527 (4.637)	4.4802 (4.464)

одного электрона над остовом (Си подобная последовательность) тщательно изучены экспериментально [13-15]. Высокая точность экспериментальных результатов позволила провести сглаживание и экстраполяцию потенциалов ионизации и уровней энергии до $Z=80$ [16]; точность приводимых в [16] данных лучше 0.01 %.

Обзор экспериментальных энергий переходов в ионах с одной вакансией в остоле дан в [17]. Последней изученной точкой в Со подобной изоэлектронной последовательности было значение $Z=68$. Мы провели сглаживание этих результатов и проэкстраполировали их до значений $Z=83$ (табл. 1). Погрешность измерений, представленных в [17], не превышает 100—200 см⁻¹. Сглаживание результатов уменьшает погрешность ~2 раза. Как обычно, мы экстраполируем не непосредственные расстояния между уровнями Со подобных ионов, а величины, образованные выделением главной зависимости от Z (эти величины — гладкие функции, зависящие от Z в четвертой—пятой значащей цифре). Негладкость может возникнуть в случае «пересечения» Z -функций рассматриваемых уровней Со подобного иона с одним из уровней, соответствующих возбуждению электрона из внутренней оболочки. В области $Z > 50$ таких «пересечений» не происходит. Погрешность приведенных в табл. 1 значений мы оцениваем следующим образом: для расщепления $3d_{3/2}-3d_{5/2}$ она составляет несколько сот обратных сантиметров; для расстояния $3d_{3/2}-3p_{3/2}$ — 1000—2000 см⁻¹; для расщепления $3p_{3/2}-3p_{1/2}$ ошибка в области $Z > 80$ может составить до ~5000 см⁻¹. Последней недостающей информацией являются потенциалы ионизации Ni подобных ионов, т. е. энергии вакансии $3d_{3/2}$ в остоле. Если известны с высокой точностью потенциалы ионизации Си подобных ионов, то, так же как в [18], энергия $3d_{3/2}$ может быть определена с использованием экспериментальных энергий нижних переходов в Ni подобных ионах. Данные,

Z

76	77	78 [°]	79	80	81	82	83
6.6687	6.4365	6.2155 (6.214)	6.0095	5.8127	5.6252	5.4479	5.2794
6.5185	6.2850	6.0626 (6.062)	5.8550	5.6566	5.4673	5.2883	5.1178
6.2755	6.0445	5.8245 (5.824)	5.6190	5.4227	5.2356	5.0585	4.8900
5.7495	5.5639	5.3865	5.2203	5.0611	4.9089	4.7644	4.6266
5.5386	5.3499	5.1696 (5.179)	5.0006	4.8387	4.6838	4.5368	4.3966
5.5637	5.2768	5.0983 (5.098)	4.9309	4.7707	4.6174	4.4719	4.3330
5.2899	5.1061	4.9306 (4.932)	4.7658	4.6081	4.4572	4.3140	4.1773
4.9668	4.7871	4.6160	4.4562	4.2950	4.1499	4.0107	3.8778
4.9044	4.7426	4.5875	4.4405	4.3079	4.1719	4.0439	3.9219
4.8508	4.6895	4.5351	4.3897	4.2502	4.1165	3.9891	3.8670
4.3156	4.1592	4.0097	3.8687	3.7338	3.6047	3.4817	3.3642

приведенные в табл. 1, получены в результате сглаживания и экстраполяции по Z.

Всесторонний анализ точности уровней энергий «одночастичных» состояний весьма важен, поскольку энергии этих состояний в значительной мере определяют качество расчета состояний Ni подобных ионов. Заметим, что если при расчете Ne подобных ионов [11] энергия нулевого приближения составляла ~95 % от полной энергии возбужденного уровня, то здесь энергия нулевого приближения составляет ~97 % от полной энергии. Подчеркнем, что экспериментальные одночастичные энергии уже в нулевом порядке включают в себя подавляющую часть всех релятивистских и корреляционных эффектов. Сходимость ряда теории возмущений также улучшается по сравнению с соответствующим рядом для Ne подобных ионов. Поправка первого порядка составляет ~3 % от энергии нулевого приближения, учет наложения конфигураций — не более одной десятой доли процента. Второй порядок теории возмущений здесь не играет такой существенной роли, как в расчете Ne подобных ионов, учет его сказывается лишь в пятой значащей цифре в окончательном результате, который представлен в табл. 2. В скобках указаны соответствующие экспериментальные результаты. Теоретические данные представляют собой плавные зависимости от Z, по разбросу экспериментальных точек можно судить о качестве эксперимента. Из табл. 2 нетрудно заметить, что состояние $3d_{3/2}4f_{5/2}$ для $Z=70-75$ измерено с очень большой погрешностью ($50\,000\text{ см}^{-1}$, линия блендирована [3]). То же можно сказать и о состояниях $3p_{1/2}4s$, $3p_{1/2}4d_{3/2}$ для $Z=69$ [4]. Очевидно, что результаты для этих состояний в принципе не могут быть использованы для прогнозирования новых данных вдоль Z-последовательности. О нашем расчете можно сказать, что все состояния, за исключением $3p_{1/2}4s$, $3p_{1/2}4d_{3/2}$, рассчитаны с точностью нескольких единиц в пятой значащей

цифре. Ошибка в энергиях двух указанных состояний может составить несколько миллиангстрем.

Мы полагаем, что эти результаты могут быть непосредственно использованы при идентификации экспериментальных спектров в области $Z > 80$.

Литература

- [1] Burkhalter P. G., Feldman U., Cowan R. D. — JOSA, 1974, v. 64, p. 1058.
- [2] Alexander E., Even-Zohar M., Fraenkel B.S., Goldsmith S. — JOSA, 1971, v. 61, p. 508.
- [3] Zigler A., Zmora H., Spector N., Klapisch M., Schwob J. L., Bar-Shalom A. — JOSA, 1980, v. 70, p. 129.
- [4] Klapisch M., Bar-Shalom A., Mandelbaum P., Schwob J. L., Zigler A., Zmora H., Jackel S. — Phys. Lett., 1980, v. 79A, p. 67.
- [5] Boiko V. A., Faenov A. Ya., Pikuz S. A. — JQSRT, 1978, v. 19, p. 11.
- [6] Zigler A., Zmora H., Spector N., Klapisch M., Schwob J. L., Bar-Shalom A. — Phys. Lett., 1980, v. 75A, p. 343.
- [7] Aglit'skii E. V., Antsiferov P. S., Panin A. M., Mandel'stam S. L. — Can. J. Phys., 1984, v. 62, p. 1924.
- [8] Burkhalter P. G., Dozier C. M., Nagel D. G. — Phys. Rev., 1977, v. A15, p. 700.
- [9] Klapisch M., Schwob J. L., Fraenkel B. S., Oreg J. — JOSA, 1977, v. 67, p. 148.
- [10] Ivanova E. P., Gurchmumelya A. D., Ivanov L. N., Tsirekidze M. A., Tsirekidze T. A. — J. Phys. B, 1985, v. 18, p. 1467.
- [11] Ivanova E. P., Ivanov L. N., Kramida A. E., Glushkov A. V. — Phys. Scr., 1985, v. 32, N 4.
- [12] Глушков А. В., Иванова Е. П. — В кн.: Актуальные проблемы спектроскопии. М., 1985, с. 286.
- [13] Reader J., Luther G., Acqista N. — JOSA, 1979, v. 69, p. 144.
- [14] Livingston A. E., Curtis L. J., Schectman R. M., Berry M. A. — Phys. Rev., 1980, v. A21, p. 771.
- [15] Reader J., Luther G. — Phys. Scr., 1981, v. 24, p. 732.
- [16] Гурчумелия А. Д., Иванова Е. П., Пирекидзе М. А. — Сообщения АН СССР, 1985, т. 118, в. 3, с. 610.
- [17] Reader J. — JOSA, 1983, v. 73, p. 63.
- [18] Глушков А. В., Иванова Е. П. — Опт. и спектр., 1985, т. 58, в. 5, с. 961.

Поступило в Редакцию
22 мая 1985 г.