

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ АТОМА ^{54}Xe ПО МЕТОДУ ДИРАКА—ФОКА—СЛЕТЕРА ДО ВЫСОКИХ СТЕПЕНЕЙ ИОНИЗАЦИИ

Х.-У. Зиберт, Д. Леманн, Г. Музиоль и Г. Шорнак

Расчетана с помощью программы типа Дирака—Фока—Слетера энергетическая структура атома ^{54}Xe в зависимости от степени ионизации. Получены значения сдвигов энергии рентгеновских переходов и сделаны выводы о многократной ионизации вследствие Костер—Крониг-переходов.

В в е д е н и е

Как в современной физике плазмы, так и при спектроскопических исследованиях степени ионизации электронно-ионных колец [1] требуются знания энергетической структуры оболочек атома в зависимости от его ионизационного состояния. С целью идентификации спутников и гиперспутников рентгеновских переходов, наблюдаемых в спектроскопических экспериментах на пучке тяжелых ионов, проводятся исследования энергетического положения атомных уровней в зависимости от распределений дырок в оболочках атома [2]. Знание энергетической структуры атома важно для расчета вероятностей многократной ионизации при электронно-атомных столкновениях [3].

В настоящей работе исследована энергетическая структура атома ксенона в зависимости от его ионизационного состояния. Для определения положений уровней атома использована релятивистская программа типа Дирака—Фока—Слетера [4].

1. Энергетическая структура атома ^{54}Xe в зависимости от ионизационного состояния

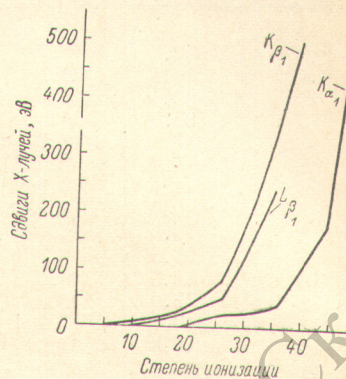
С помощью релятивистской программы типа Дирака—Фока—Слетера [4] рассчитаны энергетические положения атомных уровней с квантовыми числами (n, l, j) для всех возможных степеней ионизации атома ксенона. Принимается, что атом со степенью ионизации I образуется из атома со степенью ионизации $I-1$ вследствие обдирки внешнего электрона, т. е. с наибольшими значениями квантовых чисел.

Табл. 1 содержит рассчитанные энергии уровней атома ксенона, полученные при решении релятивистского уравнения типа Дирака—Фока—Слетера [4]. При этом приблизительно учтен вклад взаимодействия обмена между электронами с помощью потенциала обмена типа Слетера [5]

$$V_{\text{обм.}}(r) = -\frac{3}{2} \frac{e^2}{\pi} [3\pi^2 \rho(r)]^{1/3},$$

где $\rho(r)$ — локальная плотность заряда электронов. Для больших расстояний от ядра в асимптотическое поведение потенциала внесены поправки по методу, предложенному Латером [6].

Знание связи между величиной сдвигов рентгеновских энергий и ионизационным состоянием позволяет сделать выводы о степени ионизации атомов в электронно-ионных кольцах из экспериментально наблюдаемых сдвигов рентгеновских линий. Рассчитанные из энергий атомных уровней ксенона, приведенных в табл. 1, сдвиги некоторых рентгеновских переходов (K_{α_1} , K_{β_1} , L_{β_1}) в зависимости от степени ионизации атома представлены на рисунке. Заметим, что значения сдвигов для L_{α_1} и L_{β_1} лучей отклоняются друг от друга в пределах нескольких десятых электронвольт. Принимается, что как образование дырок, так и заполнение дырок электронами из вышерасположенных оболочек происходит за время, значительно меньшее времени релаксации атомных состояний. При этом условии возможно использовать для расчета сдвигов рентгеновских переходов определенных степеней ионизации энергию уровней атомных состояний, имеющих перед электронно-атомным столкновением. В табл. 2 сравниваются экспериментальные значения энергий рентгеновских линий [8] с расчетными для оценки точности рассчитанных энергий рентгеновских переходов нейтрального атома, по отношению к которым определяются сдвиги рентгеновских переходов. Это сравнение показывает, что энергии K -лучей, рассчитанные с помощью программы [4], совпадают с экспериментальными данными с точностью 0.02%. С другой стороны,



Значения энергетических сдвигов рентгеновских лучей (K_{α_1} , K_{β_1} и L_{β_1}) для разных степеней ионизации в случае ксенона, полученные при помощи релятивистской программы типа Дирака—Фока—Слетера [4].

Таблица 2

Сравнение значений экспериментальной и рассчитанной энергии рентгеновских лучей для нейтрального атома ксенона

Рентгеновский переход	$E_{\text{эксп.}}$, эВ	$E_{\text{ДФС}}$, эВ	$\left \frac{E_{\text{эксп.}} - E_{\text{ДФС}}}{E_{\text{эксп.}}} \right $
K_{α_1}	29779 ± 1.4	29785.1	0.00020
K_{β_1}	33624 ± 1.8	33633.2	0.00027
L_{α_1}	4109.9 ± 2.7	4097.2	0.00309

расчеты с помощью нерелятивистской программы типа Хартри—Фока—Слетера [9] дают энергии рентгеновских переходов, отклоняющиеся от экспериментальных на ~4.5%.

3. Обсуждение

3.1 Энергии уровней атома. Рассчитанные собственные значения энергии атома получены при учете эффектов обмена и пренебрежении мультиконфигурационными эффектами. В табл. 3 приведены экспериментальные и рассчитанные энергии уровней нейтрального атома ксенона. Отклонения рассчитанных от экспериментальных данных составляют меньше 1%. Особенно хорошее согласие получается в случае энергии K -уровня, где отклонение достигает значения 0.005%. В свою очередь нерелятивистские расчеты типа Хартри—Фока—Слетера [9]

Рассчитанные энергии уровней атома ксенона в зависимости от степени ионизации,

Степень ионизации	Энергии атом							
	1s1/2	2s1/2	2p1/2	2p3/2	3s1/2	3p1/2	3p3/2	3d3/2
0	34559.7	5417.7	5104.3	4774.6	1122.3	989.7	926.5	690.9
1	34570.5	5428.5	5115.1	4785.4	1133.1	1000.5	937.3	701.6
2	34582.6	5440.6	5127.1	4797.5	1145.0	1012.5	949.2	713.6
3	34595.9	5453.6	5140.2	4810.6	1158.0	1025.5	962.2	726.6
4	34610.1	5467.6	5154.3	4824.6	1171.9	1039.4	976.1	740.5
5	34625.7	5482.9	5169.6	4839.9	1187.1	1054.5	991.3	755.7
6	34642.1	5499.1	5185.8	4856.1	1203.0	1070.5	1007.2	771.6
7	34660.4	5517.0	5203.8	4874.0	1220.7	1088.2	1024.9	789.3
8	34679.5	5535.7	5222.5	4892.8	1239.2	1106.7	1043.4	807.8
9	34710.3	5566.7	5253.6	4923.8	1269.1	1136.6	1073.2	837.9
10	34742.5	5599.1	5286.0	4956.2	1300.1	1167.7	1104.3	869.2
11	34776.0	5632.8	5319.7	4990.0	1332.2	1199.9	1136.4	901.6
12	34810.7	5667.8	5354.8	5025.0	1365.5	1233.3	1169.6	935.2
13	34846.8	5704.0	5391.1	5061.3	1399.8	1267.7	1203.9	969.8
14	34884.2	5741.5	5428.7	5098.9	1435.1	1303.1	1239.2	1005.5
15	34923.2	5780.6	5467.9	5138.0	1471.7	1339.8	1275.8	1042.5
16	34963.4	5820.8	5508.3	5178.7	1509.3	1377.5	1313.4	1080.6
17	35004.9	5862.3	5550.0	5220.0	1547.9	1416.2	1351.9	1119.7
18	35047.6	5905.1	5592.9	5262.9	1587.4	1455.9	1391.4	1159.7
19	35094.4	5949.2	5637.5	5307.3	1628.3	1497.0	1432.3	1201.1
20	35142.2	5994.3	5683.0	5352.7	1669.9	1538.9	1474.0	1243.2
21	35191.0	6040.2	5729.5	5399.0	1712.8	1581.4	1516.3	1286.0
22	35240.9	6087.1	5776.8	5446.2	1753.3	1624.6	1559.3	1329.5
23	35293.3	6135.8	5826.2	5495.4	1799.8	1669.4	1603.8	1374.7
24	35346.8	6185.5	5876.5	5545.4	1845.0	1714.9	1649.0	1420.5
25	35400.3	6235.6	5927.1	5595.9	1891.0	1761.1	1694.9	1467.0
26	35454.9	6286.7	5978.6	5647.3	1937.6	1808.0	1741.6	1514.4
27	35555.1	6385.4	6078.4	5746.7	2014.5	1886.3	1818.6	1596.0
28	35657.7	6486.4	6180.4	5848.4	2092.5	1965.9	1896.8	1679.2
29	35762.6	6589.4	6284.5	5952.2	2171.7	2046.7	1976.2	1763.8
30	35869.8	6694.4	6390.8	6058.1	2251.9	2128.6	2056.7	1849.9
31	35979.5	6801.4	6499.2	6166.2	2333.2	2211.7	2138.4	1937.4
32	36091.5	6910.5	6609.8	6276.3	2415.5	2296.0	2221.3	2026.2
33	36207.4	7022.6	6723.7	6389.7	2499.2	2381.8	2305.5	2116.9
34	36325.7	7136.7	6839.8	6505.2	2584.0	2468.7	2391.0	2209.0
35	36446.3	7252.7	6957.9	6622.7	2669.6	2556.6	2477.4	2302.3
36	36569.4	7370.6	7078.1	6742.3	2756.3	2645.6	2564.9	
37	36695.0	7479.2	7189.9	6853.1	2838.5	2730.0	2648.0	
38	36822.4	7589.0	7303.1	6965.2	2921.2	2814.9	2731.6	
39	36951.6	7700.0	7417.6	7078.6	3004.3	2900.3	2815.8	
40	37082.6	7812.3	7533.5	7193.4	3087.8	2986.2		
41	37220.7	7928.6	7653.9	7312.4	3172.7	3073.6		
42	37360.7	8046.1	7775.5	7432.7	3258.3			
43	37491.9	8158.6	7891.2	7547.3	3346.7			
44	37625.4	8274.2	8009.4	7664.7				
45	37942.2	8490.5	8246.9	7896.0				
46	38262.9	8708.2	8486.2	8129.0				
47	38587.4	8926.9	8726.7	8363.3				
48	38915.4	9146.6	8968.2					
49	39267.3	9372.4	9216.8					
50	39621.6	9598.7						
51	39931.9	9833.2						
52	40315.3							
53	41347.5							

дают отклонения экспериментальной и рассчитанной энергии K -уровня ксенона на величину, равную 4,2%. Так как значения энергий KX -лучей сильно зависят от энергетического положения K -уровня, точный расчет энергии K -уровня имеет особенное значение для определения энергий KX -лучей. Сравнение полученных энергий уровней для внешнего электрона с рассчитанными потенциалами ионизации атома ксенона [11] показывает отклонения между энергиями ионизации меньше 5% для ионов зарядностью $I > 5$.

3s _{1/2}	4s _{1/2}	4p _{1/2}	4p _{3/2}	4d _{3/2}	4d _{5/2}	5s _{1/2}	5p _{1/2}	5p _{3/2}
677.4	208.5	160.8	148.0	69.8	67.7	23.6		
688.1	219.2	171.5	158.6	80.5	78.3	33.4	12.4	11.0
700.1	231.0	183.3	170.4	92.2	90.1	44.0	21.7	20.1
713.1	243.8	196.1	183.2	105.0	102.8	55.2	31.8	30.1
727.0	257.5	209.7	196.8	118.4	116.3	67.0	42.6	40.7
742.1	272.3	224.5	211.6	133.0	130.8	79.5	53.9	
758.1	287.8	239.9	227.0	148.3	146.1	92.6	66.0	
775.8	304.9	257.0	244.1	165.1	162.9	106.7		
794.3	322.7	274.8	261.7	182.6	180.3			
824.4	349.5	301.2	287.9	208.0	205.6			
855.6	376.9	328.4	314.8	234.1	231.7			
888.0	405.1	356.3	342.4	261.0	258.5			
921.5	434.0	384.9	370.7	288.7	286.0			
956.1	463.6	414.2	399.6	317.0	314.3			
991.8	493.7	444.1	429.2	346.0				
1028.8	524.7	474.8	459.5	375.8				
1066.8	556.2	506.1	490.3	406.2				
1105.8	588.2	537.9	521.8	437.3				
1145.8	620.8	570.3	553.8					
1187.1	654.3	603.5	586.6					
1229.1	688.1	637.1	619.8					
1271.9	722.2	671.1	653.3					
1315.3	756.6	705.4						
1360.4	791.8	740.5						
1406.1	827.5							
1452.6	864.4							
1499.9								
1581.1								
1663.8								
1748.0								
1833.6								
1920.7								

3.2 Энергетические ограничения для Костер—Крониг-переходов. Знание энергетической структуры оболочек атома в зависимости от его ионизационного состояния позволяет сделать выводы о возможностях многократной ионизации в ионизационных процессах вследствие электронно-атомных столкновений. При низких степенях ионизации ионизационные процессы, возникающие при Костер—Крониг-переходах, дают заметный вклад в сечение многократной ионизации. Костер—Крониг-переходами называют переходы типа $X \rightarrow YZ$

Таблица 3

Сравнение экспериментальных и рассчитанных энергий уровней нейтрального атома ксенона

Уровень	$E_{уров.}, \text{эВ}$		$\frac{E_{уров.}, \text{экс.} - E_{уров.}, \text{ДФС}}{E_{уров.}, \text{экс.}}$
	эксперимент [10]	ДФС	
K	34561.4 ± 1.1	34559.7	0.00005
L_I	5452.8 ± 0.4	5417.7	0.0064
L_{II}	5103.7 ± 0.4	5104.3	0.0001
L_{III}	4782.2 ± 0.4	4774.6	0.0016
M_{II}	999.0 ± 2.1	989.6	0.0093
M_{III}	937.0 ± 2.1	926.5	0.0112
M_V	672.3 ± 0.5	677.4	0.0076
N_{III}	146.7 ± 3.1	148.0	0.0089

между двумя подоболочками X и Y , которые характеризуются одним и тем же главным квантовым числом. При таких переходах первоначально образованная дырка из подоболочки X переходит в более высоко расположенную подоболочку Y . При этом освобождаемая энергия, равняю-

Таблица 4

Выходы флуоресценции $\omega_{L_{ij}}$ и выходы Костер—Крониг-переходов $f_{L_{ij}}$ на L -оболочках [12]

ω_{L_I}	$\omega_{L_{II}}$	$\omega_{L_{III}}$	$f_{L_I, II}$	$f_{L_I, III}$	$f_{L_{II}, III}$
0.058	0.091	0.097	0.179	0.274	0.173

щаяся разнице между энергиями этих двух подоболочек (X , Y), используется для ионизации дополнительного слабосвязанного электрона из подоболочки Z . Из табл. 4, где приводятся выходы флуоресценции $\omega_{L_{ij}}$ и выходы Костер—Крониг-переходов $f_{L_{ij}}$ на L -оболочках [12], вытекает

Таблица 5

Граничные степени ионизации для возникновения Костер—Крониг-переходов в случае ксенона

$X \rightarrow YZ$	Степень ионизации	$X \rightarrow YZ$	Степень ионизации	$X \rightarrow YZ$	Степень ионизации
$L_I \rightarrow L_{II}O$	7	$L_I \rightarrow L_{II}N_{IV}$	12	$L_{II} \rightarrow L_{III}O$	7
$L_I \rightarrow L_{II}N_I$	7	$L_I \rightarrow L_{II}N_V$	12	$L_{II} \rightarrow L_{III}M$	Запрещен 13
$L_I \rightarrow L_{II}N_{II}$	9	$L_I \rightarrow L_{II}M$	Запрещен	$L_{II} \rightarrow L_{III}N$	
$L_I \rightarrow L_{II}N_{III}$	9	$L_I \rightarrow L_{III}M$	Запрещен		

важность учета Костер—Крониг-переходов для расчетов сечений ионизации. С помощью приведенных в табл. 1 результатов расчета энергетической структуры атомных уровней ионов ксенона можно на основе энергетических соображений определить энергетические ограничения для возможных Костер—Крониг-переходов в зависимости от степени ионизации (табл. 5). При переходе приведенных границ степени ионизации Оже-каскады оказываются важнейшим членом процессов многократной ионизации.

Литература

- [1] Х.-У. Зиберт, Д. Леманн, Г. Музиоль, Г. Щорнак. Сообщение ОИЯИ, Р9-9366, Дубна, 1975.
- [2] J. D. Garcia, R. J. Fortner, T. M. Karanagh. Rev. Mod. Phys. 45, 111, 1973.
- [3] A. Salop. Phys. Rev., 48, 3032, 1973.
- [4] D. A. Liberman, D. T. Cromer, J. T. Waber. Comp. Phys. Comm., 2, 107, 1971.
- [5] J. C. Slater. Phys. Rev., 81, 385, 1951.
- [6] R. Latter. Phys. Rev., 99, 510, 1955.
- [7] I. P. Grant. Adv. Phys., 19, 747, 1970.
- [8] J. Bearden. Rev. Mod. Phys., 39, 78, 1967.
- [9] F. Herman, S. Skillman. Atomic structure Calculations. Prentice—Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey, 1963.
- [10] J. A. Bearden, A. F. Burr. Rev. Mod. Phys., 39, 125, 1967.
- [11] T. A. Carlson, C. W. Nestor Jr., N. Wasserman. Atomic Data, 2, 63, 1970.
- [12] E. J. McGuire. Phys. Rev., 43, 587, 1971.

Поступило в Редакцию 11 мая 1976 г.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скоринны