

КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ДАННЫХ ПО ПОТЕНЦИАЛАМ ИОНИЗАЦИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ СВЕРХТЯЖЕЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

© 2023 г. Г. В. Шпатаковская*

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук, Москва, Россия

**e-mail: shpagalya@yandex.ru*

Поступила в редакцию 17.06.2023 г.

После доработки 24.07.2023 г.

Принята к публикации 30.07.2023 г.

Полуэмпирический квазиклассический метод аппроксимации потенциалов ионизации, используемый ранее для многозарядных ионов элементов со средними и высокими атомными номерами Z , применяется к ионам элементов с атомными номерами в диапазоне $85 \leq Z \leq 110$ и числом электронов $1 \leq N_e \leq 78$. Выявленные простые закономерности дают возможность полиномиальной, достаточно точной (в пределах одного-двух процентов) аппроксимации имеющихся и оценки недостающих данных по потенциалам ионизации в таблицах NIST для всех многозарядных ионов исследованного диапазона на основе двух небольших таблиц. Продемонстрировано улучшение условий применимости квазиклассического приближения с ростом атомного номера.

Ключевые слова: потенциал ионизации, многозарядный ион, сверхтяжелые элементы, квазиклассическое приближение

DOI: 10.31857/S0367292123600747, EDN: EGAONQ

1. ВВЕДЕНИЕ

Потенциалы (энергии) ионизации атомов и положительных ионов элементов Периодической системы Д.И. Менделеева являются важной характеристикой вещества, определяющей состав астрофизической и лабораторной плазмы. Многозарядные ионы, ионы с зарядом $q > 5$, присутствуют в высокотемпературной плазме Солнца и других космических объектов, их свойства необходимы для диагностики в рентгеновской астрономии, для исследования взаимодействия ионов с веществом, для расчетов в химических моделях плазмы и т.д.

В большинстве случаев потенциалы ионизации многозарядных ионов вычисляют в полуэмпирических или теоретических моделях, поскольку их экспериментальные измерения практически отсутствуют. Тем более это справедливо для ионов трансурановых, сверхтяжелых элементов, которые получают искусственным способом на ускорителях. Для них возможны только теоретические расчеты и оценки. Хотя вряд ли можно говорить о практическом значении таких ионов, их свойства представляют большой теоретический интерес, поскольку с увеличением атомного номера уменьшается параметр квазиклассичности ($\sim Z^{-1/3}$, Z – атомный номер элемента), а зна-

чит, улучшаются условия применимости квазиклассического приближения и статистической модели Томаса–Ферми. Проверка характерных для этого приближения зависимостей (см. ниже) является одной из задач настоящей работы.

Многочисленные теоретические работы по сверхтяжелым элементам в основном посвящены расчетам электронной структуры атомов, например, [1–4] и нескольких первых ионов, например, [5]. Существенно меньше работ по многозарядным ионам.

Влияние релятивистских и QED (квантовой электродинамики) эффектов как функции атомного номера элементов Z было исследовано для атомных систем с разным числом электронов с помощью релятивистской теории возмущения в работе [6]. Учтены поправки до второго порядка включительно, численные результаты представлены для нескольких возбужденных состояний части ионов В-подобной изоэлектронной последовательности.

Приближенный способ вычисления орбитальных энергий связи электронов в ионах для всех элементов до лоуренсия ($Z = 103$) включительно был предложен в давней работе [7] на основе рассчитанных по модели самосогласованного поля Хартри–Фока орбитальных энергий и средних

радиусов оболочек в соответствующих нейтральных атомах. Средняя погрешность результатов этого метода для потенциалов ионизации ионов оценивается в ± 5 процентов.

Потенциалы ионизации ионов в He-подобной изоэлектронной последовательности вычислены в [8] с релятивистскими и квантовыми электродинамическими поправками для элементов с $Z = 2-100$.

Вычисление методом самосогласованного поля Дирака–Фока в [9] полных электронных энергий связи в изоэлектронных последовательностях от Li- ($N_e = 3$) до Db-подобной ($N_e = 105$) для элементов от лития до оганесона ($Z = 118$) дает наиболее полную информацию о потенциалах ионизации многозарядных ионов. Здесь N_e – число электронов в ионе, $q = Z - N_e$.

Расчеты из первых принципов с учетом квантовых электродинамических поправок электронных уровней для $n = 1$ и $n = 2$ состояний проведены для He-подобных ионов элементов с ядерными зарядами в диапазоне $Z = 12-100$ в работе [10]. Учет поправок существенно улучшил точность теоретических результатов, особенно для высоких атомных номеров. Менее затратный метод функционала плотности использован в работе [11] для расчета орбитальных энергий связи в ионах Li-подобной изоэлектронной последовательности элементов от неона до фермия ($Z = 100$) с учетом эффектов квантовой электродинамики.

Для отдельных, практически важных элементов проведены расчеты энергий ионизации всех ионов. Например, в работе [12] методом Дирака–Фока с учетом релятивистских и других эффектов рассчитана электронная структура атома и всех ионов урана в основном состоянии. В работе [13] для оценки энергий ионизации многозарядных ионов вольфрама использовался полуэмпирический метод, основанный на вычисленных по модели Хартри–Фока электронных энергиях связи и их масштабирования в соответствии с экспериментальными данными.

Имеющиеся экспериментальные и расчетные данные по энергиям ионизации атомов и ионов $I_{N_e}(Z)$ в электрон-вольтах представлены в постоянно обновляемых таблицах NIST [14] для элементов с атомными номерами $Z \leq 110$. Потенциалы ионизации приведены со ссылками на источники, проходят критическую экспертную проверку. Однако не все помещенные в [14] данные обладают одинаковой точностью, а например, для He-подобных ионов ($N_e = 2$) элементов с $Z > 100$, Li-подобных ионов ($N_e = 3$) и ионов с числом электронов $47 \leq N_e \leq 68$ элементов с $Z > 103$ вовсе отсутствуют.

Для оценки правильности приведенных в таблицах [14] данных в некоторых работах исследовались закономерности в зависимости потенциалов ионизации ионов от атомного номера в изоэлектронных последовательностях. Так, в работе [15] проанализирована разность между потенциалами ионизации, рассчитанными многоконфигурационным методом Дирака–Фока (MCDF) и доступными в базе [14]. Построенные для этой разности аналитические зависимости от $Z_c = Z - N_e + 1$ в виде суммы четырех членов с нулевой, первой, второй и первой отрицательной степенью Z_c позволили оценить недостающие и исправить имеющиеся данные в каждой из изоэлектронных последовательностей ионов с числом электронов от 3 до 18 в элементах от лития до олова ($Z = 50$).

В работе [16] аналитические выражения для потенциалов ионизации ионов в изоэлектронных последовательностях с числом электронов от 2 до 54, построенные как плавная интерполяция между результатами для тяжелых ионов ($Z \gg 1$) и области $Z = N_e - 1$, имеют вид полиномов по атомному номеру Z с квадратичным, линейным, нулевого и первого отрицательного порядка членами. Эти выражения также использовались для обнаружения и исправления ненадежных данных в [14].

Потенциалы ионизации свободных ионов в изоэлектронных последовательностях с числом электронов $3 \leq N_e \leq 10$ вычислялись в [17] методом MCDF для элементов с атомными номерами $37 \leq Z \leq 82$. Учитывались релятивистские поправки, эффекты квантовой электродинамики и Брейта. Предложенные аналитические выражения для аппроксимации рассчитанных потенциалов ионизации в каждой изоэлектронной серии имеют вид суммы четырех членов: с нулевой, первой, второй и четвертой степенью Z .

Таким образом можно констатировать неоднозначность и произвол в выборе вида зависимости потенциалов ионизации от атомного номера в изоэлектронных последовательностях. Поиск однозначной такой зависимости также входит в круг задач нашей работы.

Большая часть данных для многозарядных ионов в базе NIST [14] базируется на результатах работы [9], в которой полные энергии связи электронов приводятся в отдельных таблицах для каждой изоэлектронной серии. По этим таблицам для элемента с атомным номером Z энергия ионизации его иона с числом электронов N_e вычисляется как разность полных энергий связи этого и соседнего иона с $N_e - 1$.

Однако для ионов с числом электронов $47 \leq N_e \leq 68$ элементов с $Z \leq 103$ в базе данных [14] вместо [9] используются результаты довольно

грубой оболочечной модели [7] полувековой давности. Причина этого в том, что для этих ионов результаты вычислений по таблицам [9] обнаруживают нефизические зависимости потенциалов ионизации от заряда иона, что по всей вероятности является следствием неправильного выбора электронной конфигурации основного состояния ионов. В этом диапазоне числа электронов внешние электронные оболочки ионов заполняются водородоподобным образом, т.е. последовательно $4f$, $5s$ и $5p$. Именно такой порядок заполнения использовался в [7]. Такая же электронная конфигурация для всех ионов урана с числом электронов $N_e < 79$ применялась и в работе [12]. В отличие от этого в [9] здесь использовался иной порядок: $5s$, $5p$, $4f$.

Таким образом необходим расчет потенциалов ионизации в этой области по высокоточной модели, что является отдельной задачей. Цель же настоящей работы состоит в аппроксимации имеющихся в базе NIST [14] и оценке отсутствующих потенциалов ионизации многозарядных ионов элементов со сверхвысокими Z .

Водородоподобный порядок заполнения внешних оболочек в основном состоянии многозарядных ионов делает однозначной зависимость потенциалов ионизации ионов элемента Z от числа электронов в них N_e , так как уже не требуется дополнительная информация об электронной конфигурации иона. Поиск таких зависимостей для свободных ионов элементов с высокими ($55 \leq Z \leq 95$) и средними ($18 \leq Z \leq 54$) атомными номерами был осуществлен в работах [18] и [19] соответственно. Обнаруженные закономерности позволили аппроксимировать потенциалы ионизации ионов из базы NIST [14] с точностью в пределах одного процента, что существенно упрощает практическое использование большого массива данных из этих таблиц.

Настоящее исследование посвящено поиску подобных зависимостей для многозарядных ионов сверхтяжелых элементов на основе анализа данных NIST [14]. В разделе 2 кратко излагается используемый метод и анализируются ионы с числом электронов в диапазоне $1 \leq N_e \leq 46$, в разделе 3 рассмотрены потенциалы ионизации ионов с числом электронов $47 \leq N_e \leq 78$. В заключении подводятся итоги исследований, проведенных в [18, 19] и в настоящей работе, по данной теме. Приведены таблицы полиномиальных коэффициентов и таблицы 2, 4, 5 сравнения аналитических оценок с данными NIST [14]. В таблицах и в тексте наибольшее внимание уделяется многозарядным ионам урана, как представляющего практический интерес.

2. ПОТЕНЦИАЛЫ ИОНИЗАЦИИ В СПЕЦИАЛЬНЫХ КООРДИНАТАХ

Для анализа потенциалов ионизации свободных многозарядных ионов используется, как и в работах [18, 19], квазиклассический полуэмпирический метод [20], позволяющий выделить зависимость энергии ионизации $I_{N_e}(Z)$, взятой из базы [14], от атомного номера элемента Z в следующем виде:

$$e_{N_e}^{(Z)}(\sigma) = [I_{N_e}(Z)/E_h]Z^{-4/3}, \quad \sigma = \pi Z^{-1/3}, \quad (1)$$

где $E_h = 27.211386$ эВ – атомная единица энергии. Этот вид подсказан (подробнее см. в [20]) применением квазиклассического условия квантования Бора–Зоммерфельда к вычислению орбитальных энергий связи электронов в атомной (или ионной) системе в модели Томаса–Ферми.

Вид функции $e_{N_e}^{(Z)}(\sigma)$ в форме изоэлектронных последовательностей в полулогарифмическом масштабе для нескольких элементов (символы) из всего исследуемого диапазона представлен на рис. 1а. Очевидно, что такую сложную зависимость (1) от атомного номера Z невозможно было бы угадать без “квазиклассической подсказки”.

На рис. 1а видны выше указанные пробелы для He- и Li-подобных ионов, а также для ионов с числом электронов $47 \leq N_e \leq 68$. Рисунок демонстрирует также очень гладкие монотонные зависимости, которые для чисел электронов в диапазоне $1 \leq N_e \leq 46$ хорошо аппроксимируются линейными полиномами. В общем виде эта зависимость имеет вид

$$\lg e_{N_e}^{(Z)}(\sigma) = \sum_{i=0}^{i_{\max}} a_i^{(N_e)} \sigma^i, \quad (2)$$

где $i_{\max} = 1$ для линейного полинома.

Применение выражения (2) к оценке потенциалов ионизации ионов данного диапазона N_e в электрон-вольтах для других элементов по формуле, обратной (1)

$$I_{N_e}(Z) = Z^{4/3} 10^{\lg e_{N_e}^{(Z)}(\sigma)} E_h, \quad (3)$$

и сравнение с данными NIST [14] показывает точность интерполяции в доли процента, что позволяет во многих случаях использовать ее вместо табличных данных.

Однако на практике требуется знать потенциалы ионизации ионов элемента с фиксированным значением атомного номера Z в зависимости от числа электронов в них N_e . Поэтому более удобным оказывается другое представление функции $e_{N_e}^{(Z)}(\sigma)$. Его можно получить, аппрокси-

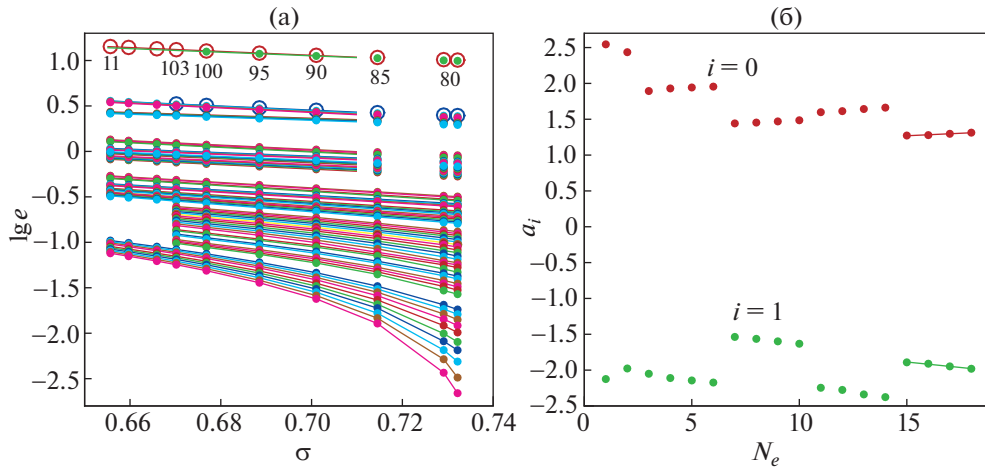


Рис. 1. (а) Зависимости $e_{N_e}^{(Z)}(\sigma)$, вычисленные по формуле (1) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 80, 85, 90, 95, 100, 103, 110$ по данным из базы NIST [14] (символы). Числа под символами отмечают атомный номер элемента. Разные цвета соответствуют разным изоэлектронным последовательностям. Числа справа от линий указывают число электронов N_e в ионе. (б) Зависимость коэффициентов линейной интерполяции $a_i^{(N_e)}$ от числа электронов N_e в области $1 \leq N_e \leq 18$ для элементов с атомными номерами $85 \leq Z \leq 110$.

мируя полиномами кусочно монотонные зависимости коэффициентов a_i от числа электронов N_e

$$a_i^{(N_e)} = \sum_{k=0}^{k_{\max}} b_{ik} N_e^k. \quad (4)$$

Здесь k_{\max} — степень соответствующего полинома. Монотонные части в кусочно монотонной зависимости коэффициентов a_i от N_e , для $1 \leq N_e \leq 18$ представленной на рис. 1б, последовательно соответствуют 2 электронам в $1s^1$ и $1s^2$ состояниях, затем 4 электронам в $2s^1, 2s^2, 2p^1, 2p^2$ состояниях, затем 4 электронам в состояниях

$2p^3-2p^6$ и так далее до 6 электронов в состояниях $4d^5-4d^{10}$, что явно отражено в табл. 1. В ней представлены соответствующие полиномиальные коэффициенты b_{ik} для диапазона чисел электронов $1 \leq N_e \leq 46$.

Выражение для $\lg e_{N_e}(\sigma)$ тогда приобретает следующий вид:

$$\lg e_{N_e}^{(Z)}(\sigma) = \sum_{i=0}^{i_{\max}} \sum_{k=0}^{k_{\max}} b_{ik} N_e^k \sigma^i. \quad (5)$$

Покажем, как оценить потенциал ионизации многозарядного иона в рассмотренном диапазоне, используя формулы (3), (5) и табл. 1, и срав-

Таблица 1. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (5) для $N_e = 1-46$

N_e	b_{00}	b_{01}	b_{10}	b_{11}
1–2	2.653844E+0	–1.090877E–1	–2.272032E+0	1.473614E–1
3–6	1.937777E+0	4.085245E–2	–2.080834E+0	–7.100875E–2
7–10	1.337436E+0	1.474132E–2	–1.311177E+0	–3.197792E–2
11–14	1.354637E+0	2.195594E–2	–1.742224E+0	–4.539132E–2
15–18	1.060913E+0	1.391145E–2	–1.429574E+0	–3.050224E–2
19–22	9.422327E–1	2.284358E–2	–1.229820E+0	–4.607527E–2
23–28	7.629575E–1	2.730979E–2	–9.672357E–1	–5.338793E–2
29–32	5.544008E–1	3.905318E–2	–7.853982E–1	–7.572772E–2
33–36	4.927931E–1	3.090433E–2	–9.593434E–1	–5.734172E–2
37–40	8.046128E–2	4.439645E–2	–3.096957E–1	–7.939479E–2
41–46	–2.652153E–1	5.121426E–2	2.287430E–1	–9.051447E–2

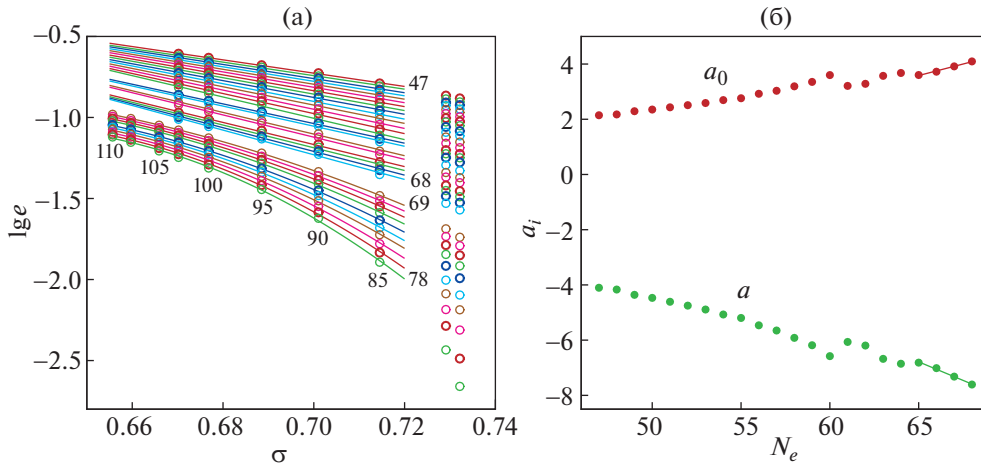


Рис. 2. (а) Зависимости $e_{N_e}^{(Z)}(\sigma)$, вычисленные по формуле (1) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 80, 85, 90, 95, 100, 103, 110$ (символы) по данным из [7] для чисел электронов $47 \leq N_e \leq 68$ и из [9] для $69 \leq N_e \leq 78$; (б) зависимость коэффициентов линейной интерполяции $a_i^{(N_e)}$ от числа электронов N_e в области $47 \leq N_e \leq 68$ для элементов с атомными номерами $85 \leq Z \leq 110$. Линия – линейная интерполяция.

ним оценку с табличным значением из [14]. В качестве примера найдем энергии ионизации четырех ионов урана ($Z = 92$) с числом электронов $N_e = 19-22$. Для этого сначала вычисляем величину $\sigma = \pi Z^{-1/3} = 0.695911$. Затем в строке 6 табл. 1, в которой находится информация для этих чисел электронов, находим необходимые

4 коэффициента b_{ik} . Подставляя их в формулу (5) последовательно для $N_e = 19, 20, 21, 22$, получаем значения $\lg e_{N_e}(\sigma) = -0.088806, -0.098027, -0.107250, -0.116470$ соответственно. Подстановка затем этих чисел в выражение (3) дает для энергий ионизации I_{N_e} в эВ соответственно: $9211.0 (9210 \pm 90), 9017.5 (9030 \pm 70), 8828.1 (8830 \pm 60),$

Таблица 2. Потенциалы ионизации (эВ) He- и Li-подобных ионов элементов $92, 99 \leq Z \leq 110$. Сравнение полуэмпирической интерполяции (3), (5) (b_{ik} из первых двух строк табл. 1) с имеющимися данными NIST [14] (со ссылками на источник) и их экстраполяция в область отсутствующих данных

N_e	2	2	3	3
Z	NIST	Интерполяция	NIST	Интерполяция
92	$129\,570.3 \pm 0.6$ [10]	129 640	$32\,836.5 \pm 0.6$ [11]	32 895
99	$154\,328.1 \pm 1.5$ [8]	154 330	$39\,451.4 \pm 1.5$ [11]	39 640
100	$158\,152.0 \pm 1.5$ [8]	158 030	$40\,482.2 \pm 1.1$ [11]	40 660
101	–	161 790	$41\,548 \pm 6$ [7]*	41 693
102	–	165 590	$42\,632 \pm 6$ [7]*	42 741
103	–	169 430	$43\,759 \pm 6$ [7]*	43 803
104	–	173 320	–	44 879
105	–	177 250	–	45 969
106	–	181 230	–	47 073
107	–	185 260	–	48 191
108	–	189 330	–	49 323
109	–	193 440	–	50 470
110	–	197 600	–	51 630

*Получено экстраполяцией разности результатов [7] и [11] в изоэлектронной последовательности

Таблица 3. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (5) для $N_e = 47-78, 85 \leq Z \leq 110$

N_e	$i \setminus k$	0	1	2
47–60	0	1.203924E+1	–4.572828E–1	5.260881E–3
	1	–1.878315E+1	6.977231E–1	–8.214733E–3
61–64	0	–7.155683E+0	1.694544E–1	0
	1	1.136405E+1	–2.850030E–1	0
65–68	0	–7.257781E+0	1.667945E–1	0
	1	1.067290E+1	–2.686046E–1	0
69–78	0	–1.143278E+3	3.382327E+1	–2.536748E–1
	1	3.444124E+3	–1.018772E+2	7.646889E–1
	2	–2.593805E+3	7.668411E+1	–5.763370E–1

8642.6 (8650 ± 60). Здесь в скобках приводятся табличные значения энергий ионизации из [14] (данные источника [9] согласуются с результатами [12]) с оценкой неопределенности этих данных. Все наши оценки находятся внутри “коридора” погрешности.

В табл. 2 представлены результаты использования формулы (3) с интерполяционным выражением функции $\lg e_{N_e}^{(Z)}(\sigma)$ (5) для оценки потенциалов ионизации He- и Li-подобных ионов. Коэффициенты b_{ik} взяты из табл. 1 для $N_e = 2, 3$. Приведенные для сравнения данные базы NIST [14] со ссылками на источники показывают погрешность аппроксимации в четвертом знаке для He-подобных ионов и в третьем-четвертом знаке – для Li-подобных. Линейная экстраполяция на область больших атомных номеров позволяет оценить и таким образом восполнить отсутствующие данные для He-подобных ионов элементов с $Z > 100$ и Li-подобных ионов элементов с $Z > 103$.

3. ИОНЫ С ЧИСЛОМ ЭЛЕКТРОНОВ $47 \leq N_e \leq 78$

На рис. 2а представлен вид функции $e_{N_e}^{(Z)}(\sigma)$ отдельно для диапазона $47 \leq N_e \leq 78$. Как отмечалось во Введении, в этой области для чисел электронов $47 \leq N_e \leq 68$ в таблицах [14] используются данные работы [7] вместо [9]. На рисунке показаны также интерполяционные полиномиальные кривые вида (2) с экстраполяцией на область отсутствующих данных. Здесь линейные ($i_{\max} = 1$) интерполяции используются для диапазона $47 \leq N_e \leq 68$ и квадратичные ($i_{\max} = 2$) – для $69 \leq N_e \leq 78$.

Удобный для практического применения вид зависимости потенциалов ионизации ионов элемента Z от числа электронов в них N_e получаем, анализируя зависимость коэффициентов a_i от N_e , изображенную на рис. 2б для проблемного диапазона $47 \leq N_e \leq 68$. На рисунке наглядно представлено последовательное заполнение 14 состояний $4f$ оболочки для чисел электронов $47 \leq N_e \leq 60$ – первый монотонный отрезок, хорошо аппроксимируемый квадратичным полиномом ($k_{\max} = 2$). Второй монотонный кусок, почти линейный, соответствует следующим 4 заполняемым состояниям: $5s^1, 5s^2, 5p^1, 5p^2$, затем заполняются 4 состояния $5p^3-5p^6$ также с линейной зависимостью ($k_{\max} = 1$). Соответствующие коэффициенты b_{ik} для всей рассматриваемой области приведены в табл. 3.

В табл. 4 представлены в качестве примера результаты аналитической аппроксимации потенциалов ионизации для ионов 14 элементов с числом электронов $N_e = 47, 58, 68$ из проблемной области $47 \leq N_e \leq 68$ в сравнении с имеющимися данными [7], средняя погрешность которых порядка $\pm 5\%$. Наши аналитические оценки хорошо воспроизводят табличные данные, но точность их экстраполяции на область ионов более тяжелых элементов с атомными номерами $Z > 103$ не может быть лучше тех же $\pm 5\%$.

В табл. 5 наша аппроксимация, построенная по одним элементам, сравнивается с табличными результатами модели [9] для ионов других элементов с числом электронов $N_e = 70, 74, 78$ из диапазона $69 \leq N_e \leq 78$. В основном погрешность аппроксимации лежит в пределах одного процента, лишь в трех случаях для $N_e = 78$ она оказывается порядка двух процентов.

Таблица 4. Потенциалы ионизации (эВ) ионов с числом электронов $N_e = 47, 58, 68$ некоторых элементов из диапазона $86 \leq Z \leq 110$. Оценка по полуэмпирической интерполяции (3), (5) с коэффициентами b_{ik} из табл. 3. Сравнение с данными из NIST [14] (источник [7]) и их экстраполяция в область отсутствующих данных

N_e	47	47	58	58	68	68
Z	NIST	Интерполяция	NIST	Интерполяция	NIST	Интерполяция
86	1720 ± 90	1731	980 ± 50	986	488 ± 25	495
92	2220 ± 110	2201	1370 ± 70	1340	730 ± 40	714
98	2750 ± 140	2750	1790 ± 90	1778	1010 ± 50	1001
100	2950 ± 150	2950	1940 ± 100	1945	1110 ± 50	1114
101	3050 ± 150	3054	2020 ± 100	2033	1160 ± 60	1174
102	3140 ± 160	3161	2110 ± 110	2123	1220 ± 60	1237
103	3250 ± 160	3269	2190 ± 110	2216	1280 ± 60	1302
104	—	3380	—	2312	—	1369
105	—	3494	—	2411	—	1439
106	—	3610	—	2513	—	1512
107	—	3728	—	2618	—	1588
108	—	3849	—	2726	—	1666
109	—	3973	—	2837	—	1747
110	—	4099	—	2952	—	1832

Таблица 5. Потенциалы ионизации (эВ) ионов с числом электронов $N_e = 70, 74, 78$ некоторых элементов из диапазона $85 \leq Z \leq 110$. Оценка по полуэмпирической интерполяции (3), (5) с коэффициентами b_{ik} из табл. 3. Сравнение с данными из NIST [14] (источник [9])

N_e	70	70	74	74	78	78
Z	NIST	Интерполяция	NIST	Интерполяция	NIST	Интерполяция
85	311 ± 3	312.51	212.0 ± 2.5	215.48	130.1 ± 2.1	132.73
92	557 ± 4	551.08	431 ± 3	425.44	323 ± 3	313.43
98	814 ± 4	813.10	662 ± 4	666.67	536 ± 4	538.11
100	909 ± 4	910.38	749 ± 4	756.89	616 ± 4	623.29
101	958 ± 4	960.59	794 ± 4	803.38	659 ± 4	667.07
102	1010 ± 4	1011.7	840 ± 4	850.65	701 ± 4	711.41
103	1061 ± 5	1063.8	888 ± 4	898.58	745 ± 4	756.10
104	1114 ± 5	1116.6	936 ± 4	947.04	791 ± 4	800.96
105	1168 ± 5	1170.2	985 ± 4	995.92	838 ± 4	845.77
106	1223 ± 5	1224.4	1036 ± 4	1045.1	885 ± 4	890.35
107	1280 ± 4	1279.2	1088 ± 5	1094.4	934 ± 4	934.49
108	1338 ± 4	1334.4	1140 ± 5	1143.8	984 ± 4	978.01
109	1397 ± 4	1397.0	1195 ± 5	1193.1	1035 ± 4	1020.7
110	1457 ± 4	1446.0	1250 ± 5	1242.2	1087 ± 4	1062.4

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Этим исследованием завершается цикл работ [18, 19] по анализу представленных в таблицах NIST [14] потенциалов ионизации многозарядных ионов в основном состоянии элементов с

атомными номерами $18 \leq Z \leq 110$. Для анализа применялся предложенный ранее в [20] квазиклассический метод выделения зависимости электронных энергий связи в атомах и ионах от атомного номера Z .

Показано, что все исследованные данные NIST [14] по потенциалам ионизации многозарядных ионов в квазиклассических координатах (1) ложатся на очень гладкие изоэлектронные кривые типа изображенных на рис. 1а, которые с хорошей точностью аппроксимируются простыми полиномами. Полученные результаты отражают основную зависимость потенциалов ионизации многозарядных ионов от атомного номера Z и числа электронов N_e для диапазона $18 \leq Z \leq 110$, а предложенные оценки воспроизводят данные таблиц NIST с точностью 1–2%.

Сравнение результатов настоящей работы для сверхвысоких атомных номеров Z с результатами для высоких [18] и средних [19] показывает, что общая картина с ростом Z становится более простой и прозрачной: во-первых, уменьшается степень интерполяционных полиномов в изоэлектронных сериях с 3-2 до 2-1, во-вторых, становится более явной водородоподобное заполнение внешней электронной оболочки, в-третьих, сокращается число таблиц полиномиальных коэффициентов с пяти для средних до двух для сверхвысоких, хотя число электронов увеличивается. Тем самым подтверждается улучшение условий применимости квазиклассического приближения с ростом Z .

В работе также обращено внимание на необходимость расчета по более точной модели потенциалов ионизации ионов с числом электронов $47 \leq N_e \leq 68$ для элементов с высокими и сверхвысокими Z с учетом последовательного заполнения $4f$, $5s$, $5p$ оболочек в основном состоянии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Borschevsky A., Eliav E., Vilkas M.J., Ishikawa Y., Kaldor U. // Phys. Rev. A. 2007. V. 75. P. 042514.
2. Dzuba V.A., Safronova M.S., Safronova U.I. // Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys. 2014. V. 90. P. 012504.
3. Dzuba V.A. // Phys. Rev. A. 2016. V. 93. P. 032519.
4. Porsev S.G., Safronova M.S., Safronova U.I., Dzuba V.A., Flambaum V.V. // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. P. 052512.
5. Dzuba V.A., Safronova M.S., Safronova U.I. // Phys. Rev. A. 2016. V. 94. P. 042503.
6. Safronova U.I., Rudzikas Z.B. // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1976. V. 9. P. 1989.
7. Carlson T. A., Nestor C.W., Jr., Wasserman N., McDowell J.D. // Calculated ionization potentials for multiply charged ions. At. Data Nucl. Data Tables. 1970. V. 2. P. 63.
8. Drake G.W.F. // Canadian J. Phys. 1988. V. 66. P. 586.
9. Rodrigues G.C., Indelicato P., Santos J.P., Patte P., Parente F. // At. Data Nucl. Data Tables. 2004. V. 86. P. 117.
10. Artemyev A.N., Shabaev V.M., Yerokhin V.A., Plunien G., Soff G. // Phys. Rev. A. 2005. V. 71. P. 062104.
11. Sapirstein J., Cheng K.T. // Phys. Rev. A. 2011. V. 83. P. 012504.
12. Rashid K., Saadi M.Z., Yasin M. // At. Data Nucl. Data Tables. 1988. V. 40. P. 365.
13. Kramida A.E., Reader J. // At. Data Nucl. Data Tables. 2006. V. 92. P. 457.
14. Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J. and NIST ASD Team. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.10), 2020 [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2023, July 12].
15. Biémont E., Frémat Y., Quinet P. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1999. V. 71. P. 117.
16. Gil G., Gonzalez A. // Can. J. Phys. 2017. V. 95. P. 479.
17. Huang J., Jiang G., Zhao Q. // Chin. Phys. Lett. 2006. V. 23. P. 69.
18. Шпатаковская Г.В. // Письма ЖЭТФ. 2021. Т. 114. С. 798.
19. Шпатаковская Г.В. // ЖЭТФ. 2022. Т. 162. С. 205.
20. Шпатаковская Г.В. // УФН. 2019. Т. 189. С. 195.