

# АТОМНЫЕ ПРОЦЕССЫ, СОПРОВОЖДАЮЩИЕ $\alpha$ -РАСПАД СВЕРХТЯЖЕЛЫХ ЯДЕР

© 2020 г. В. К. Никулин<sup>1)</sup>, М. Б. Тржасковская<sup>2)</sup>\*

Поступила в редакцию 20.01.2020 г.; после доработки 24.02.2020 г.; принята к публикации 24.02.2020 г.

Рассматриваются процессы ионизации атомных оболочек и рентгеновских переходов в дочерних атомах, сопровождающие  $\alpha$ -распад сверхтяжелых изотопов. Выполнены расчеты вероятности ионизации  $N$ -оболочек при распаде изотопов, входящих в цепочки  $\alpha$ -распадов теннессина  ${}_{117}^{294}\text{Ts}$  и оганесона  ${}_{118}^{294}\text{Og}$ . Использовался метод Дирака–Фока, учитывались все мультипольные переходы и туннелирование  $\alpha$ -частицы через кулоновский барьер атома. Результаты анализируются и сравниваются с вероятностями ионизации  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек. Вычислены энергии рентгеновских  $K_{\alpha 1,2}$ -линий для сверхтяжелых элементов, являющихся продуктами  $\alpha$ -распада в цепочках  ${}_{117}^{294}\text{Ts}$  и  ${}_{118}^{294}\text{Og}$ . Учитывалось взаимодействие Брейта и электродинамические поправки высших порядков. Получено, что энергия  $K_{\alpha 1}$ -линии изотопа мейтнерия  ${}_{109}^{268}\text{Mt}$  совпадает с точностью 0.01 кэВ с предыдущими расчетами. Это подтверждает, что наблюдаемая в лаборатории GSI (Дармштадт) линия, энергия которой выше теоретического значения на 3.2 кэВ, не может быть идентифицирована как  $K_{\alpha 1}$ -линия  ${}_{109}^{268}\text{Mt}$ .

DOI: 10.31857/S0044002720040169

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Изменение кулоновского потенциала ядра при  $\alpha$ -распаде, а также прохождение  $\alpha$ -частицы через атомные орбитали приводит к возмущению орбиталей, в результате чего  $\alpha$ -распад сопровождается излучением электронов дочернего атома с энергиями от 1 эВ до нескольких сотен кэВ. Электронная эмиссия может быть инициирована различными атомными процессами, например, ионизацией атомных оболочек, внутренней конверсией, перестройкой атомных оболочек и др. В настоящей работе рассматривается процесс ионизации внутренних атомных оболочек, сопровождающей  $\alpha$ -распад. Если излученная  $\alpha$ -частица заселяет возбужденный ядерный уровень продукта распада, последующая разрядка ядра происходит путем  $\gamma$ -излучения или процесса внутренней конверсии на  $K$ -оболочке. Дырка в  $K$ -оболочке после конверсии может заполняться рентгеновскими переходами электронов с  $L$ -оболочек. Теоретическое исследование как электронной эмиссии, так и рентгеновских переходов важно для интерпретации спектров, полученных при  $\alpha$ -распаде сверхтяжелых элементов.

История экспериментального и теоретического изучения вероятности ионизации атомных оболочек,

сопровождающей  $\alpha$ -распад в изотопах тяжелых атомов, начиная с работы Мигдала [1], подробно описана, например, в [2–4]. В работах [5–8] нами вычислялась и исследовалась вероятность ионизации  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек при  $\alpha$ -распаде изотопов тяжелых и сверхтяжелых элементов. Показано, что наши теоретические значения для ряда изотопов  ${}_{84}\text{Po}$  и изотопа  ${}_{86}^{222}\text{Rn}$  согласуются с имеющимися в литературе экспериментальными данными лучше, чем другие расчеты [9, 10]. В [8] показано также, что вероятность ионизации увеличивается с возрастанием главного квантового числа оболочки. Вероятность ионизации  $L$ -оболочки увеличивается на полтора–два порядка по сравнению с  $K$ -оболочкой, а вероятность ионизации  $M$ -оболочки — на порядок по сравнению с  $L$ -оболочкой.

Влияние  $\alpha$ -распада на внутренние и внешние оболочки атома различно из-за существенно различающихся орбитальных скоростей. Определим отношение

$$\tilde{v}_i = v_\alpha / v_{i \equiv n\ell j}, \quad (1)$$

где  $v_\alpha$  — скорость  $\alpha$ -частицы,  $v_{i \equiv n\ell j}$  — орбитальная скорость  $i$ -й оболочки,  $n$  — главное квантовое число,  $\ell$  и  $j$  — орбитальный и полный моменты электрона. Для внутренних оболочек орбитальная скорость значительно больше, чем скорость  $\alpha$ -частицы, т.е.  $\tilde{v}_i < 1$ . Поэтому внутренние электроны адиабатически приспособляются к внезапному изменению заряда ядра  $Z$ . Для внешних оболочек, наоборот,  $\tilde{v}_i > 1$ , поэтому внешние электроны,

<sup>1)</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия.

<sup>2)</sup>НИЦ “Курчатовский институт” — ПИЯФ, Гатчина, Россия.

\*E-mail: trzhask@thd.pnpi.spb.ru

замороженные в родительском атоме  $Z$ , медленно перестраиваются к орбиталим дочернего атома  $Z - 2$ .

Для тяжелых элементов, например, для  ${}_{84}^{222}\text{Po}$  и  ${}_{86}^{222}\text{Rn}$ , рассматриваемых в [5–7], внутренними являются  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочки ( $n \leq 3$ ), для которых  $\tilde{v}_i \lesssim 0.5$ . Для  $N$ -оболочек ( $n = 4$ ) этих элементов может оказаться, что  $\tilde{v}_i > 1$ . В частности, для  ${}_{84}^{210}\text{Po}$  при энергии  $\alpha$ -частицы  $Q_\alpha = 5.403$  МэВ отношение  $\tilde{v}_i = v_\alpha / \bar{v}_{4lj} = 1.2$ , где  $\bar{v}_{4lj}$  — средняя орбитальная скорость электрона  $N$ -оболочки. Для сверхтяжелых элементов скорости электронов  $N$ -оболочки больше, и отношение  $\tilde{v}_{4lj} < 1$ , несмотря на то, что энергии  $\alpha$ -частицы  $Q_\alpha$  при  $\alpha$ -распаде сверхтяжелых элементов обычно существенно выше. Например, для  ${}_{118}^{294}\text{Og}$  при энергии  $\alpha$ -частицы  $Q_\alpha = 11.65$  МэВ и для  ${}_{105}^{270}\text{Db}$  при энергии  $Q_\alpha = 7.9$  МэВ отношение (1) для  $N$ -оболочек  $\tilde{v}_{4lj} \approx 0.8$ . Средние значения радиуса  $\langle r \rangle_{nlj}$  для радиальных электронных волновых функций  $K$ -,  $L$ -,  $M$ - и  $N$ -оболочек сверхтяжелых атомов в 1.5–2 раза меньше, чем в тяжелых атомах. Следовательно,  $N$ -оболочки для сверхтяжелых элементов являются внутренними и вероятность их ионизации при  $\alpha$ -распаде может быть рассчитана в тех же приближениях, что и для более внутренних  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек.

Основной целью настоящей работы является расчет и теоретическое изучение вероятности ионизации  $N$ -оболочек элементов, входящих в цепочки  $\alpha$ -распадов изотопов теннессина:  ${}_{117}^{294}\text{Ts} \rightarrow {}_{115}^{290}\text{Mc} \rightarrow {}_{113}^{286}\text{Nh} \rightarrow {}_{111}^{282}\text{Rg} \rightarrow {}_{109}^{278}\text{Mt} \rightarrow {}_{107}^{274}\text{Bh} \rightarrow {}_{105}^{270}\text{Db}$  и оганесона:  ${}_{118}^{294}\text{Og} \rightarrow {}_{116}^{290}\text{Lv} \rightarrow {}_{114}^{286}\text{Fl}$ . Оба элемента были синтезированы в Институте ядерных исследований (Дубна) [11–13]. В настоящее время активно изучаются как сами эти элементы, так и продукты их  $\alpha$ -распада (см. [14–18] и ссылки там).

Сопоставление измеренных спектров дочернего атома с аккуратными теоретическими значениями энергий рентгеновских линий позволяет идентифицировать изотопы продуктов  $\alpha$ -распада сверхтяжелых элементов. В работе [16] была сделана попытка объяснить линию  $(155 \pm 0.8)$  кэВ в спектре мейтнерия  ${}_{109}^{268}\text{Mt}$ , дочернего ядра при  $\alpha$ -распаде изотопа  ${}_{111}^{272}\text{Rg}$ , как  $K_{\alpha_1}$  рентгеновскую линию. Спектр  ${}_{109}^{268}\text{Mt}$  исследовался в лаборатории GSI (Дармштадт) [18]. Однако теоретическое значение энергии  $K_{\alpha_1}$ -линии в нейтральном мейтнерии, полученное в [16], оказалось меньше экспериментального на 3.2 кэВ. В то же время расчеты [16] для более легких элементов из области  $27 \leq Z \leq 77$  совпадают с экспериментом с точностью  $\lesssim 0.015$  кэВ. В связи с такой ситуацией

была определена дополнительная цель этой работы — вычисление в наиболее современных предположениях энергий рентгеновских  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий для сверхтяжелых элементов, являющихся дочерними атомами в цепочках  $\alpha$ -распадов теннессина  ${}_{117}^{294}\text{Ts}$  и оганесона  ${}_{118}^{294}\text{Og}$ , и, в частности, энергии  $K_{\alpha_1}$ -линии для  ${}_{109}^{268}\text{Mt}$ . Все расчеты выполнены с использованием нашего пакета программ RAINE [19, 20].

В разд. 2 кратко описаны модель и формулы для расчета вероятности ионизации атомной оболочки при  $\alpha$ -распаде. Значения вероятности ионизации  $N$ -оболочек сверхтяжелых элементов, перечисленных выше, приводятся и обсуждаются в разд. 3. В разд. 4 описываются приближения, используемые в расчетах энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий. Полученные нами значения энергий для изотопов, являющихся продуктами  $\alpha$ -распада в цепочках теннессина  ${}_{117}^{294}\text{Ts}$  и оганесона  ${}_{118}^{294}\text{Og}$ , сравниваются с теоретическими значениями из [16] и с имеющимися экспериментальными данными.

## 2. МЕТОД РАСЧЕТА ВЕРОЯТНОСТИ ИОНИЗАЦИИ ПРИ $\alpha$ -РАСПАДЕ

Подробно методы вычисления вероятности ионизации оболочки при  $\alpha$ -распаде описаны в [5, 6]. Здесь мы кратко перечислим приближения, в которых выполнены расчеты, и приведем основные формулы. В соответствии с работами [9, 21] вероятность ионизации оболочки при  $\alpha$ -распаде рассматривается в приближении объединенного атома. Вылетающая  $\alpha$ -частица записывается в виде расходящейся волны, которая сшивается с волновой функцией внутри ядра на расстоянии, равном радиусу ядра  $R_{\text{ядр}}$ . Затем  $\alpha$ -частица туннелирует через кулоновский барьер атома и далее проходит путь от кулоновского барьера радиуса  $R_0$  до бесконечности по классической траектории. Полная амплитуда ионизации записывается как сумма стандартной полуклассической амплитуды процесса ионизации и квантовой амплитуды туннелирования  $\alpha$ -частицы через кулоновский барьер [9]. Эта квантово-полуклассическая амплитуда вычисляется, используя теорию внезапного возмущения.

Дифференциальная вероятность ионизации  $i$ -й подоболочки дочернего атома при  $\alpha$ -распаде ядра с зарядом  $Z$  может быть записана в виде

$$\frac{dP_i(E_f)}{dE_f} = (Z_1\alpha)^2(2j_i + 1)(2l_i + 1) \times \quad (2)$$

$$\times \sum_L \sum_{\kappa_f} \frac{(2j_f + 1)(2l_f + 1)}{(2L + 1)^2} (C_{l_i 0 l_f 0}^{L 0})^2 \times$$

$$\times W^2[l_i j_i l_f j_f; 1/2L] \left| \tilde{H}_{if}^{(L)} \right|^2.$$

В (2)  $Z_1$  — заряд  $\alpha$ -частицы,  $\ell$  и  $j$  — орбитальный и полный моменты электрона, участвующего в ионизации,  $L$  — мультипольность перехода,  $\alpha = e^2/\hbar c$  — постоянная тонкой структуры,  $\kappa = (\ell - j)(2j + 1)$  — релятивистское квантовое число,  $C_{i_0 l_f 0}^{L0}$  — коэффициент Клебша–Гордана,  $W[l_i j_i l_f j_f; 1/2L]$  — коэффициент Рака. Индексы  $i$  и  $f$  относятся соответственно к начальному (связанному) состоянию электрона и конечному (свободному) состоянию,  $E_f$  — энергия вылетающего электрона. Матричный элемент  $\tilde{H}_{if}^{(L)} = H_{if}^{(L)}/Z_1$ . Формулы записаны в релятивистской системе единиц, где  $\hbar = m_0 = c = 1$ .

Интегрируя дифференциальную вероятность  $dP_i(E_f)/dE_f$  по энергиям конечного состояния электрона  $E_f$ , мы получаем полную вероятность  $P_i(Q_\alpha)$  ионизации  $i$ -й подоболочки атома при энергии  $\alpha$ -частицы  $Q_\alpha$ . Матричный элемент  $H_{if}^{(L)}$  без учета туннелирования  $\alpha$ -частицы через кулоновский барьер имеет вид

$$\begin{aligned} H_{if}^{(L)} = & Z_1 \left[ \frac{1}{\omega} \int_0^\infty \sin(\omega t) \dot{R}(t) \frac{d\Phi_{if}^{(L)}(R)}{dR} dt - \right. & (3) \\ & \left. - \delta_{L,1} \frac{Z_2}{M_2} I_{if}^{(1)} \int_0^\infty \cos(\omega t) \frac{1}{R^2(t)} dt \right] + \\ & + i Z_1 \left\{ \frac{1}{\omega} \int_0^\infty \cos(\omega t) \dot{R}(t) \frac{d\Phi_{if}^{(L)}(R)}{dR} dt + \right. \\ & \left. + \delta_{L,1} \frac{Z_2}{M_2} I_{if}^{(1)} \int_0^\infty \sin(\omega t) \frac{1}{R^2(t)} dt + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\omega} \left[ \Phi_{if}^{(L)}(R_0) - \delta_{L,0} I_{if}^{(-1)} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Здесь  $\omega = E_f + \varepsilon_i$  — энергия электронного перехода  $i \rightarrow f$  и  $\varepsilon_i$  — собственное значение энергии ионизируемой оболочки. Функция  $\dot{R}(t)$  связана с траекторией  $R(t)$  движения  $\alpha$ -частицы от кулоновского барьера атома  $R_0$  до бесконечности:

$$\dot{R}(t) = v \left[ 1 - \frac{R_0}{R(t)} \right]^{1/2}, \quad (4)$$

где  $v$  — конечная скорость  $\alpha$ -частицы,  $R_0 = Z_1 Z_2 \alpha / (Q_\alpha - \omega)$  — радиус кулоновского барьера,  $Z_2 = Z - Z_1$ . В начальный момент времени  $R(0) = R_0$  и  $\dot{R}(0) = 0$ .

Релятивистский формфактор  $\Phi_{if}^{(L)}(R)$ , входящий в матричный элемент (3), имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi_{if}^{(L)}(R) = & & (5) \\ = & \frac{1}{R^{L+1}} \int_0^R r^L \left[ G_i(r) G_f(r) + F_i(r) F_f(r) \right] dr + \\ & + R^L \int_R^\infty \frac{1}{r^{L+1}} \left[ G_i(r) G_f(r) + F_i(r) F_f(r) \right] dr. \end{aligned}$$

Производная формфактора записывается:

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi_{if}^{(L)}(R)}{dR} = & & (6) \\ = & \frac{1}{R} \left\{ L \Phi_{if}^{(L)}(R) - (2L + 1) R^{-(L+1)} \times \right. \\ & \left. \times \int_0^R r^L \left[ G_i(r) G_f(r) + F_i(r) F_f(r) \right] dr \right\}. \end{aligned}$$

Интегралы  $I_{if}^{(1)}$  и  $I_{if}^{(-1)}$  имеют следующий вид:

$$I_{if}^{(1)} = \int_0^\infty r \left[ G_i(r) G_f(r) + F_i(r) F_f(r) \right] dr, \quad (7)$$

$$I_{if}^{(-1)} = \int_0^\infty \frac{1}{r} \left[ G_i(r) G_f(r) + F_i(r) F_f(r) \right] dr. \quad (8)$$

Функции  $G(r) = r g(r)$  и  $F(r) = r f(r)$  представляют собой большую и малую компоненты релятивистской электронной волновой функции Дирака.

Для учета туннелирования  $\alpha$ -частицы через кулоновский барьер атома в мнимую часть матричного элемента  $H_{if}^{(L)}$  должен быть включен дополнительный член  $a_{if}^{(L)}(E_f)$ , для которого нами было получено точное выражение в работе [5]:

$$\begin{aligned} a_{if}^{(L)}(E_f) = & -i \frac{R_0}{v} \int_{x_0}^1 \frac{x dx}{\sqrt{x - x^2}} b_{if}^{(L)}(x R_0) \times & (9) \\ & \times \exp \left\{ -\omega \frac{R_0}{v} \left[ \frac{\pi}{4} + \sqrt{x - x^2} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{2} \arcsin(1 - 2x) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Здесь

$$x_0 = R_{\text{nucl}}/R_0, \quad (10)$$

$$b_{if}^{(L=0)}(R) = \Phi_{if}^{(L=0)}(R) - I_{if}^{(-1)}, \quad (11)$$

**Таблица 1.** Сравнение наших расчетов вероятностей ионизации  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек при  $\alpha$ -распаде изотопа  $^{210}_{84}\text{Po}$  с экспериментальными значениями

Оболочка	$Q_\alpha$ , МэВ	Наш расчет	Эксперимент
$P_K(Q_\alpha)$	5.305	$3.00 \times 10^{-6}$ [5]	$(2.58 \pm 0.08) \times 10^{-6}$ [3]
$P_L^{(\text{tot})}(Q_\alpha)$	5.403	$6.42 \times 10^{-4}$ [7]	$(7.25 \pm 1.18) \times 10^{-4}$ [24]
$P_M^{(\text{tot})}(Q_\alpha)$	5.403	$1.75 \times 10^{-2}$ [8]	$(1.84 \pm 0.37) \times 10^{-2}$ [24]

$$b_{if}^{(L=1)}(R) = \Phi_{if}^{(L=1)}(R) + I_{if}^{(1)} \omega^2 R \left( \frac{1}{Z_2} - \frac{\mu}{M_2 Z_1} \right), \quad (12)$$

где  $\mu$  — приведенная масса для массы  $\alpha$ -частицы  $M_1$  и массы дочернего ядра  $M_2$ . Как было показано в [5–8], учет туннелирования существен при вычислении вероятности ионизации  $K$ -оболочек и заметен для  $L_1$ - и  $M_1$ -оболочек. Так как для  $s$ -оболочек только мультипольности  $L = 0$  и  $L = 1$  вносят значимые вклады в вероятность ионизации, формулы (11), (12) приведены для  $L = 0, 1$ .

В расчетах используются электронные волновые функции начального и конечного состояний, вычисленные методом Дирака–Фока (ДФ) с точным учетом экранирования ядра атомными электронами и обменного взаимодействия как между связанными электронами, так и между связанными и свободными электронами [19, 22]. Волновая функция начального состояния вычислялась в самосогласованном методом ДФ поле нейтрального атома, а волновая функция конечного состояния — в поле иона с вакансией в  $i$ -й подоболочке. При вычислении волновых функций учитывались конечные размеры ядра в предположении, что заряд равномерно распределен по сфере с радиусом  $R_{\text{nucl}}$  [23].

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ВЕРОЯТНОСТИ ИОНИЗАЦИИ $N$ -ОБОЛОЧЕК

Ниже мы рассмотрим результаты вычислений вероятности ионизации  $N$ -оболочек сверхтяжелых элементов, входящих в цепочки  $\alpha$ -распадов теннессина:  $^{294}_{117}\text{Ts}$ ,  $^{290}_{115}\text{Mc}$ ,  $^{286}_{113}\text{Nh}$ ,  $^{282}_{111}\text{Rg}$ ,  $^{278}_{109}\text{Mt}$ ,  $^{274}_{107}\text{Bh}$ ,  $^{270}_{105}\text{Db}$  и оганесона:  $^{294}_{118}\text{Og}$ ,  $^{290}_{116}\text{Lv}$ ,  $^{286}_{114}\text{Fl}$ , и сравним их с вероятностями ионизации более внутренних оболочек. Все расчеты выполнены в модели, описанной выше. Учитывалось туннелирование  $\alpha$ -частицы через кулоновский барьер атома. В выражении (2) сумма по мультипольностям  $L$  включает все члены, вносящие значимый вклад в вероятность ионизации. Электронные волновые функции вычислялись методом ДФ. Вычислительная точность

расчета вероятности ионизации  $P_i(Q_\alpha)$  составляет  $\lesssim 1\%$ .

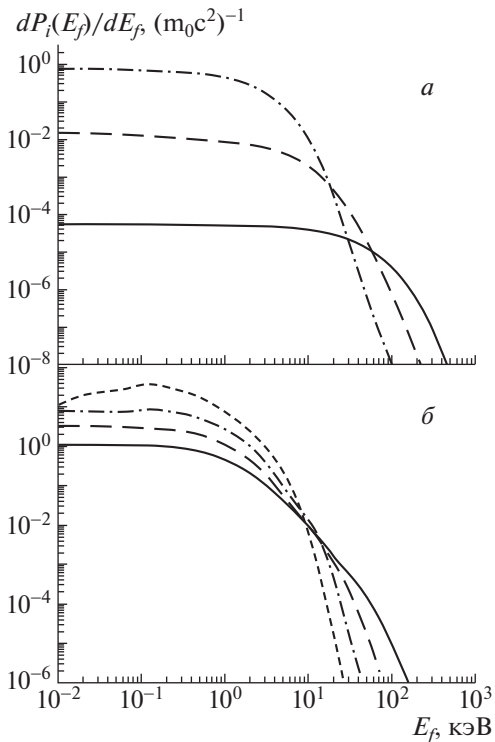
Как было упомянуто во Введении, наши предыдущие расчеты вероятностей ионизации внутренних  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек тяжелых элементов удовлетворительно согласуются с имеющимися в литературе экспериментальными значениями. В качестве примера в табл. 1 приведено сравнение с экспериментальными данными [3, 24] вероятностей ионизации  $K$ -оболочки и полной ионизации  $L$ - и  $M$ -оболочек  $P_{L,M}^{(\text{tot})}(Q_\alpha)$  при  $\alpha$ -распаде изотопа  $^{210}_{84}\text{Po}$ , где

$$P_L^{(\text{tot})}(Q_\alpha) = \sum_{\kappa_i} P_{2\kappa_i}(Q_\alpha), \quad (13)$$

$$P_M^{(\text{tot})}(Q_\alpha) = \sum_{\kappa_i} P_{3\kappa_i}(Q_\alpha).$$

Как видно, значения вероятности ионизации  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек при  $\alpha$ -распаде изотопа  $^{210}_{84}\text{Po}$  согласуются с экспериментальными значениями с точностью 16%, 11% и 5% соответственно. Согласие с экспериментом позволило использовать описанный метод расчета для  $K$ - [6],  $L$ - [7] и  $M$ -оболочек [8] сверхтяжелых элементов. Выше показано, что для сверхтяжелых элементов  $N$ -оболочки также являются внутренними, поэтому вероятность их ионизации при  $\alpha$ -распаде вычислялась тем же методом.

Рассмотрим особенности поведения вероятности ионизации  $N$ -подоболочек в сверхтяжелых элементах. На рис. 1 приведены дифференциальные вероятности  $\frac{dP_i(E_f)}{dE_f}$  ионизации  $N_1$ -,  $N_3$ -,  $N_5$ - и  $N_7$ -подоболочек (рис. 1б), а также ионизации  $K$ -,  $L_3$ - и  $M_5$ -подоболочек (рис. 1а), при  $\alpha$ -распаде изотопа  $^{270}_{105}\text{Db}$ . Как видно из сравнения этих рисунков, дифференциальные вероятности ионизации  $N$ -подоболочек при низких энергиях  $E_f \lesssim 1$  кэВ, в отличие от  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -подоболочек, не являются гладкими кривыми, особенно для  $N$ -подоболочек с большими квантовыми числами  $\ell$  и  $j$ . Немонотонность зависимости  $\frac{dP_i(E_f)}{dE_f}(E_f)$  ясно видна для  $N_5$ - и  $N_7$ -подоболочек. Поэтому, чтобы получить



**Рис. 1.** Дифференциальная вероятность ионизации  $dP_i(E_f)/dE_f$  при  $\alpha$ -распаде изотопа дубния  $^{270}_{105}\text{Db}$ ,  $Q_\alpha = 7.9$  МэВ. Кривые на рис. (а): сплошная —  $K$ -оболочка, штриховая —  $L_3$ -подоболочка, штрихпунктирная —  $M_5$ -подоболочка. Кривые на рис. (б): сплошная —  $N_1$ -подоболочка, штриховая —  $N_3$ -подоболочка, штрихпунктирная —  $N_5$ -подоболочка, штриховая с короткими штрихами —  $N_7$ -подоболочка.

достаточно аккуратное значение полной вероятности ионизации  $P_i(Q_\alpha)$ , при расчете этих оболочек должен быть выбран достаточно малый шаг интегрирования по  $E_f$  в области низких энергий. Для расчета  $P_{N_{6,7}}(Q_\alpha)$  с точностью  $\sim 1\%$  выбирался шаг  $h_E = 0.005$  кэВ, в то время как для  $K$ - и  $L$ -подоболочек в этой области достаточно было выбрать  $h_E = 5$  кэВ.

При более высоких энергиях зависимости  $\frac{dP_i(E_f)}{dE_f}(E_f)$  для всех  $N$ -подоболочек становятся гладкими (рис. 1б) и падают значительно быстрее, чем для  $K$ -,  $L_3$ - и  $M_5$ -подоболочек. Дифференциальная вероятность для  $N$ -подоболочек падает практически на шесть порядков величины при энергии  $E_f \approx 100$  кэВ, причем тем быстрее, чем больше орбитальное квантовое число  $\ell$  данной оболочка. В связи с этим дифференциальная вероятность для  $N$ -оболочек при энергиях  $E_f \gtrsim 10$  кэВ может вычисляться с большим шагом. Расчет может быть выполнен до более низких энергий  $E_f$ , чем в случае  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек.

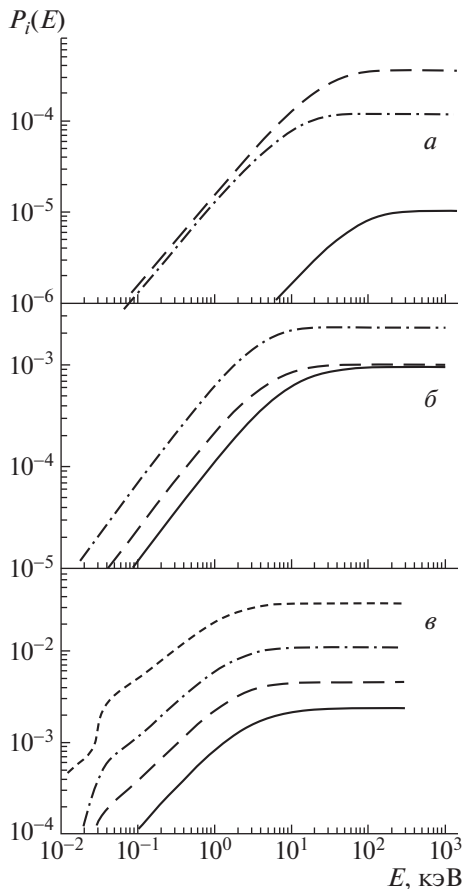
Величина промежутка интегрирования дифференциальной вероятности  $\frac{dP_i(E_f)}{dE_f}$  для различных оболочек показана на рис. 2, где приведен интеграл с переменным верхним пределом  $E$  вида

$$P_i(E) = \int_0^E \frac{dP_i(E_f)}{dE_f} \times dE_f. \quad (14)$$

Значение энергии  $E$ , где интеграл (14) достигает своего асимптотического значения, определяет область формирования процесса и, следовательно, необходимый промежуток интегрирования дифференциальной вероятности  $\frac{dP_i(E_f)}{dE_f}$  для подоболочки  $i$ . На рис. 2а приведена область формирования процесса ионизации  $K$ -,  $L_1$ - и  $L_3$ -подоболочек, на рис. 2б — ионизации  $M_1$ -,  $M_3$ - и  $M_5$ -подоболочек, на рис. 2в — ионизации  $N_1$ -,  $N_3$ -,  $N_5$ - и  $N_7$ -подоболочек при  $\alpha$ -распаде изотопа оганесона  $^{294}_{118}\text{Og}$ ,  $Q_\alpha = 11.65$  МэВ. Видно, что область формирования для ионизации  $K$ - и  $L$ -оболочек составляет несколько сотен кэВ, для  $M$ -оболочек ограничена  $\sim 100$  кэВ, а для  $N$ -оболочек составляет несколько десятков кэВ.

Как указывалось ранее [5–8], в некоторых теоретических работах при вычислении ионизации после  $\alpha$ -распада не учитывались вклады всех необходимых мультипольных переходов. Так, например, расчеты [1, 25] выполнены для  $K$ - и  $L$ -оболочек при  $\alpha$ -распаде  $^{210}_{84}\text{Po}$  в дипольном приближении ( $L = 1$ ). Однако в наших работах было показано, что основной вклад в вероятность ионизации тяжелых элементов дают монопольные переходы ( $L = 0$ ):  $\gtrsim 80\%$  для  $K$ -оболочки,  $\sim 70\%$  для  $L_1$ -подоболочки и  $\sim 20\%$  для  $L_{2,3}$ -подоболочек. Для сверхтяжелых изотопов доля монопольного вклада, как правило, возрастает. Существенные вклады,  $\sim 30\%$ , в вероятность ионизации  $L_{2,3}$ -подоболочек вносят также квадрупольные переходы ( $L = 2$ ) [7]. Для  $M$ -подоболочек важны вклады всех мультипольностей  $L \leq 4$  [8]. При этом в вероятности ионизации различных подоболочек значительные вклады вносят различные мультипольности, например, для  $M_2$ -подоболочки монопольный вклад вносит  $\gtrsim 60\%$ , а для  $M_3$ -подоболочки только  $\sim 20\%$ . Для  $M_{4,5}$ -подоболочек дипольные переходы дают  $\sim 35\%$ , а суммарный вклад квадрупольных и октупольных ( $L = 3$ ) переходов составляет  $\gtrsim 30\%$ .

Рассмотрим, как распределяются мультипольные вклады при ионизации  $N$ -подоболочек. Эти вклады приведены в табл. 2 для изотопов  $^{270}_{105}\text{Db}$  и  $^{294}_{118}\text{Og}$ . Видно, что для  $N$ -подоболочек вклады размазаны по мультипольностям  $0 \leq L \leq 6$ . Однако, если в случае  $L$ - и  $M$ -оболочек вклады



**Рис. 2.** Область формирования процесса ионизации различных подоболочек при  $\alpha$ -распаде изотопа оганесона  $^{294}_{118}\text{Og}$ ,  $Q_\alpha = 11.65$  МэВ. Кривые на рис. (а): сплошная —  $K$ -оболочка, штриховая —  $L_1$ -подоболочка, штрихпунктирная —  $L_3$ -подоболочка. Кривые на рис. (б): сплошная —  $M_1$ -подоболочка, штриховая —  $M_3$ -подоболочка, штрихпунктирная —  $M_5$ -подоболочка. Кривые на рис. (в): сплошная —  $N_1$ -подоболочка, штриховая —  $N_3$ -подоболочка, штрихпунктирная —  $N_5$ -подоболочка, штриховая с короткими штрихами —  $N_7$ -подоболочка.

высоких мультипольностей  $L$  возрастают для подоболочек с большими орбитальными квантовыми числами  $\ell$ , то, как видно из табл. 2, для  $N_6, N_7$ -подоболочек с самым большим значением  $\ell = 3$  основной вклад вносят монопольные и дипольные переходы, и только  $\sim 20\%$  вносят мультиполи  $2 \leq L \leq 6$ . Следовательно, для  $N$ -оболочки  $p$ - и  $d$ -электроны размазаны по мультиполям сильнее, чем  $f$ -электроны. Отметим также, что хотя обычно распределения по мультиполям для разных элементов подобны, но для  $N_1$ - и  $N_2$ -подоболочек более тяжелого  $^{294}_{118}\text{Og}$  монопольный вклад значительно больше, чем для этих же оболочек более легкого  $^{270}_{105}\text{Db}$ . Еще раз подчеркнем, что в наших вычислениях учитывались все мультипольные переходы

$L \geq 0$ , вносящие значимый вклад в вероятность ионизации данной оболочки.

Что касается вклада туннелирования  $\alpha$ -частицы через кулоновский барьер атома, данные расчеты подтвердили вывод работ [5–8], что учет туннелирования существен для расчета ионизации  $K$ -оболочки и мало изменяет значение вероятности для более высоких  $s$ -оболочек. Так, например, в случае  $\alpha$ -распада изотопа  $^{274}_{107}\text{Bh}$ ,  $Q_\alpha = 8.7$  МэВ учет туннелирования уменьшает вероятность ионизации  $K$ -оболочки на 31%,  $L_1$ -оболочки — на 1.5%,  $M_1$ -оболочки — на 0.8% и  $N_1$ -оболочки — на 0.4%. Следовательно, вероятности ионизации всех оболочек, кроме  $K$ , изменяются практически в пределах точности расчетов.

Вероятности ионизации  $N$ -подоболочек, сопровождающей  $\alpha$ -распад изотопов из цепочек  $\alpha$ -распадов теннессина и оганесона, приведены в табл. 3 и 4 соответственно. Сравнение этих значений с вероятностями ионизации  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек показало, что вероятность ионизации увеличивается для каждой подоболочки с теми же квантовыми числами  $\ell$  и  $j$ , но с большим главным квантовым числом  $n$ , а также увеличивается для полной ионизации оболочки с большим главным квантовым числом  $n$ . В табл. 5 приведены отношения вероятностей полной ионизации оболочек  $A_{(n+1)n}$  для всех рассматриваемых сверхтяжелых изотопов:

$$A_{LK} = P_L^{(\text{tot})}(Q_\alpha) / P_K(Q_\alpha), \quad (15)$$

$$A_{ML} = P_M^{(\text{tot})}(Q_\alpha) / P_L^{(\text{tot})}(Q_\alpha),$$

$$A_{NM} = P_N^{(\text{tot})}(Q_\alpha) / P_M^{(\text{tot})}(Q_\alpha).$$

Таблица 5 показывает, что вероятности ионизации при  $\alpha$ -распаде увеличиваются для оболочек с большим главным квантовым числом  $n$ , так как все отношения  $A_{(n+1)n} \gg 1$ . Вероятности ионизации  $L$ -оболочек на полтора–два порядка превышают вероятности  $K$ -оболочек, а вероятности  $M$ -оболочек по сравнению с  $L$ -оболочками и вероятности  $N$ -оболочек по сравнению с  $M$ -оболочками увеличиваются более, чем на порядок величины. Увеличение связано как с возрастанием вероятности ионизации каждой из  $(n+1)\ell j$ -подоболочек по сравнению с соответствующей  $n\ell j$ -подоболочкой, так и с увеличением числа электронов на оболочке  $(n+1)$  по сравнению с оболочкой  $n$ .

Возрастание вероятности ионизации оболочек с увеличением главного квантового числа может быть качественно объяснено, если рассматривать ионизацию внутренних атомных оболочек при  $\alpha$ -распаде как результат прямого столкновения  $\alpha$ -частицы с электроном  $i$ -й оболочки [26]. Отношение  $\tilde{v}_i$  скорости  $\alpha$ -частицы к орбитальной скорости

**Таблица 2.** Относительные вклады (в %) переходов различной мультипольности  $L$  в вероятность ионизации  $N$ -подоболочек, сопровождающей  $\alpha$ -распад изотопов  $^{270}_{105}\text{Db}$  и  $^{294}_{118}\text{Og}$

Изотоп	$^{270}_{105}\text{Db}, Q_\alpha = 7.9 \text{ МэВ}$							$^{294}_{118}\text{Og}, Q_\alpha = 11.65 \text{ МэВ}$							
	Оболочка/ $L$	0	1	2	3	4	5	$\geq 6$	0	1	2	3	4	5	$\geq 6$
$N_1$	36.8	27.3	16.1	7.7	10.8	1.3			51.5	19.2	12.4	6.8	9.0	1.1	
$N_2$	35.4	31.6	11.7	13.7	3.7	3.5	0.4		47.3	25.5	9.6	11.1	3.3	2.9	0.3
$N_3$	32.8	25.4	9.9	20.6	3.8	6.3	1.2		32.8	22.3	8.9	22.9	4.2	7.3	1.6
$N_4$	43.4	10.3	28.9	6.0	6.6	1.7	3.1		39.4	9.1	32.8	6.2	7.3	1.8	3.3
$N_5$	43.5	9.9	29.5	5.9	6.7	1.7	2.8		37.9	9.3	33.4	6.3	7.4	1.8	3.9
$N_6$	42.6	40.4	6.6	5.2	1.8	1.7	1.7		35.0	46.3	7.2	5.8	1.9	1.9	1.9
$N_7$	41.3	41.4	6.8	5.2	1.8	1.7	1.8		33.9	47.5	7.2	5.8	1.9	1.8	1.9

**Таблица 3.** Вероятность  $P_{N_i}(Q_\alpha)$  ионизации  $N_i$ -подоболочек, сопровождающей  $\alpha$ -распад изотопов из цепочки распадов теннессина;  $N^{(\text{tot})} = \sum_i P_{N_i}$

Изотоп	$^{294}_{117}\text{Ts}$	$^{290}_{115}\text{Mc}$	$^{286}_{113}\text{Nh}$	$^{282}_{111}\text{Rg}$	$^{278}_{109}\text{Mt}$	$^{274}_{107}\text{Bh}$	$^{270}_{105}\text{Db}$
$Q_\alpha, \text{ МэВ}$	11.0	10.2	9.5	9.2	9.0	8.7	7.9
Оболочка							
$N_1$	$2.38 \times 10^{-3}$	$2.43 \times 10^{-3}$	$2.50 \times 10^{-3}$	$2.63 \times 10^{-3}$	$2.78 \times 10^{-3}$	$2.94 \times 10^{-3}$	$3.04 \times 10^{-3}$
$N_2$	$2.71 \times 10^{-3}$	$2.77 \times 10^{-3}$	$2.86 \times 10^{-3}$	$3.02 \times 10^{-3}$	$3.22 \times 10^{-3}$	$3.43 \times 10^{-3}$	$3.56 \times 10^{-3}$
$N_3$	$4.62 \times 10^{-3}$	$4.89 \times 10^{-3}$	$5.17 \times 10^{-3}$	$5.56 \times 10^{-3}$	$5.98 \times 10^{-3}$	$6.43 \times 10^{-3}$	$6.79 \times 10^{-3}$
$N_4$	$6.98 \times 10^{-3}$	$7.44 \times 10^{-3}$	$7.86 \times 10^{-3}$	$8.57 \times 10^{-3}$	$9.17 \times 10^{-3}$	$9.92 \times 10^{-3}$	$1.06 \times 10^{-2}$
$N_5$	$1.12 \times 10^{-2}$	$1.19 \times 10^{-2}$	$1.26 \times 10^{-2}$	$1.37 \times 10^{-2}$	$1.46 \times 10^{-2}$	$1.58 \times 10^{-2}$	$1.68 \times 10^{-2}$
$N_6$	$2.45 \times 10^{-2}$	$2.64 \times 10^{-2}$	$2.77 \times 10^{-2}$	$3.09 \times 10^{-2}$	$3.27 \times 10^{-2}$	$3.59 \times 10^{-2}$	$3.85 \times 10^{-2}$
$N_7$	$3.36 \times 10^{-2}$	$3.62 \times 10^{-2}$	$3.80 \times 10^{-2}$	$4.23 \times 10^{-2}$	$4.48 \times 10^{-2}$	$4.90 \times 10^{-2}$	$5.41 \times 10^{-2}$
$N^{(\text{tot})}$	$8.60 \times 10^{-2}$	$9.20 \times 10^{-2}$	$9.66 \times 10^{-2}$	$1.07 \times 10^{-1}$	$1.13 \times 10^{-1}$	$1.23 \times 10^{-1}$	$1.33 \times 10^{-1}$

электрона [см. (1)] для внутренних оболочек сверхтяжелых атомов можно приближенно оценить следующим образом:

$$\tilde{v}_K \approx 0.1, \quad \tilde{v}_L \approx 0.2, \quad \tilde{v}_M \approx 0.4, \quad \tilde{v}_N \approx 0.8. \tag{16}$$

Сечение столкновения  $\alpha$ -частицы с электроном такой оболочки может быть записано в виде простого аналитического выражения [27]:

$$\begin{aligned} \sigma(i, \tilde{v}_i) &= \tag{17} \\ &= \pi a_0 \frac{E_0^2 Z_1^2}{I_i^2 \tilde{v}_i^2} [0.283 \ln(\tilde{v}_i^2 + 1) + 1.26] \times \\ &\quad \times \exp \left[ - \frac{1.95}{\tilde{v}_i (1 + 1.2 \tilde{v}_i^2)} \right], \end{aligned}$$

где  $a_0 = \hbar^2/m_0 e^2$ ,  $E_0 = m_0 v_0^2$ ,  $I_i$  — потенциал ионизации  $i$ -й оболочки. Уравнение (17) получено в приближении плоской волны с помощью подгонки.

Как утверждается в [27], сечения ионизации, вычисленные с использованием (17), согласуются с точным расчетом в пределах 20%, если  $0.2 \lesssim \tilde{v}_i \lesssim 1$ .

Множитель  $1/(I_i^2 \tilde{v}_i^2)$  в (17) увеличивает сечение  $\sigma(i, \tilde{v}_i)$  для каждой оболочки с большим главным квантовым числом  $n$  в несколько раз. Множитель  $[0.283 \ln(\tilde{v}_i^2 + 1) + 1.26]$  не изменяет существенно величину сечения. Наибольшее увеличение сечения, до нескольких порядков величины, происходит за счет экспоненциального множителя  $\exp\{-1.95/[\tilde{v}_i(1 + 1.2\tilde{v}_i^2)]\}$ , который растет с увеличением  $\tilde{v}_i$ . Следовательно, поперечное сечение ионизации  $\sigma(i, \tilde{v}_i)$  увеличивается для каждой более высокой оболочки. Однако, как видно из (16), (17), само увеличение экспоненциального множителя уменьшается при переходе к отношению более высоких оболочек. Это уменьшение особенно су-

**Таблица 4.** Вероятность  $P_{N_i}(Q_\alpha)$  ионизации  $N_i$ -оболочек, сопровождающей  $\alpha$ -распад изотопов из цепочки распадов оганесона

Изотоп $Q_\alpha$ , МэВ Оболочка	$^{294}_{118}\text{Og}$ 11.65	$^{290}_{116}\text{Lv}$ 10.80	$^{286}_{114}\text{Fl}$ 10.2
$N_1$	$2.39 \times 10^{-3}$	$2.43 \times 10^{-3}$	$2.51 \times 10^{-3}$
$N_2$	$2.72 \times 10^{-3}$	$2.75 \times 10^{-3}$	$2.86 \times 10^{-3}$
$N_3$	$4.58 \times 10^{-3}$	$4.76 \times 10^{-3}$	$5.10 \times 10^{-3}$
$N_4$	$6.79 \times 10^{-3}$	$7.15 \times 10^{-3}$	$7.78 \times 10^{-3}$
$N_5$	$1.09 \times 10^{-2}$	$1.16 \times 10^{-2}$	$1.25 \times 10^{-2}$
$N_6$	$2.44 \times 10^{-2}$	$2.55 \times 10^{-2}$	$2.77 \times 10^{-2}$
$N_7$	$3.34 \times 10^{-2}$	$3.51 \times 10^{-2}$	$3.80 \times 10^{-2}$
$N^{(\text{tot})}$	$8.38 \times 10^{-2}$	$8.92 \times 10^{-2}$	$9.64 \times 10^{-2}$

шественно при увеличении скорости  $\tilde{v}_i$ , поэтому отношения  $A_{ML}$  и  $A_{NM}$  в несколько раз меньше, чем  $A_{LK}$ . Отношения  $A_{ML}$  и  $A_{NM}$  имеют приблизительно одинаковую величину. Таблица 5 демонстрирует, что отношения  $A_{(n+1)n}$ , как правило, уменьшаются для более тяжелых изотопов с большей энергией  $\alpha$ -частицы.

Значения вероятности ионизации  $N_i$ -подоболочек, приведенные в табл. 3 и 4, тоже медленно уменьшаются для более тяжелых изотопов с большей энергией  $Q_\alpha$ . Эта закономерность также качественно объясняется на основе уравнения (17). Но в этом случае главной причиной уменьшения является множитель  $1/(I_i^2 \tilde{v}_i^2)$ , а экспоненциальный множитель меняется значительно меньше.

#### 4. РЕНТГЕНОВСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В СВЕРХТЯЖЕЛЫХ АТОМАХ

В случае, когда излученная  $\alpha$ -частица заселяет возбужденный ядерный уровень дочернего ядра и последующая разрядка ядра происходит путем внутренней конверсии на  $K$ -оболочке, дырка, образовавшаяся в  $K$ -оболочке, может заполняться рентгеновскими переходами электронов с  $L$ -оболочек. Сравнение экспериментальных спектров дочернего атома с точными теоретическими значениями энергий рентгеновских  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий позволяет исследовать продукты  $\alpha$ -распада сверхтяжелых элементов.

В работе [16] авторы пытались сопоставить линию  $(155 \pm 0.8)$  кэВ в спектре  $^{268}_{109}\text{Mt}$ , наблюдаемом в GSI [18], с рентгеновской  $K_{\alpha_1}$ -линией в нейтральном мейтнерии. Изотоп  $^{268}_{109}\text{Mt}$  является дочерним ядром при  $\alpha$ -распаде  $^{272}_{111}\text{Rg}$ . Однако теоретическое значение, полученное в [16], оказалось равным 151.78 кэВ, т.е. меньше экспериментального значения на 3.22 кэВ. В то же время теоретические энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий для ряда

более легких элементов  $27 \leq Z \leq 77$ , вычисленные в [16], совпадают с экспериментом с точностью  $\lesssim 0.015$  кэВ, а для сверхтяжелых элементов  $98 \leq Z \leq 104$  расчеты [16] согласуются с соответствующими экспериментальными значениями [28] с точностью  $\lesssim 0.5$  кэВ.

Мы вычислили значения энергий  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий в  $^{268}_{109}\text{Mt}$  как методом ДФ в одночастичном приближении [19, 20], так и многоконфигурационным методом ДФ (МКДФ) [29, 30]. Энергии линий  $K_{\alpha_{1,2}}$  вычислялись как разности полных энергий атомов и ионов с вакансиями в соответствующих оболочках. В расчет полной энергии включалось взаимодействие Брейта, которое дает основные электродинамические поправки к кулоновскому потенциалу (см. [31] и ссылки там). Эти поправки особенно существенны для внутренних оболочек сверхтяжелых атомов. Как показали наши вычисления, брейтовское взаимодействие уменьшает энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий для сверхтяжелых элементов на величину  $\lesssim 1$  кэВ. Максимальное уменьшение для наиболее тяжелого из рассматриваемых здесь изотопов ливермория  $^{290}_{116}\text{Lv}$  (дочернее ядро при  $\alpha$ -распаде  $^{294}_{118}\text{Og}$ ) составляет 1.04 кэВ.

В отличие от [16], нами учитывались все электродинамические поправки высших порядков, входящие в лэмбовский сдвиг, — собственная энергия электрона, поляризация вакуума, релятивистская поправка на отдачу, поправка на приведенную массу и др. Эти вклады включены в медленно изменяющуюся функцию  $F_{nlj}(Z\alpha)$ , табулированную в [32] для водородоподобных ионов с конфигурациями  $1s, 2s, 2p_{1/2}$  и  $2p_{3/2}$  для всех элементов  $Z \leq 110$ . Функция  $F_{nlj}(Z\alpha)$  позволяет определить лэмбовский сдвиг  $nlj$  уровня в единицах  $m_0 c^2$  по формуле

$$\Delta E_{\text{Lamb}} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} F_{nlj}(Z\alpha). \quad (18)$$

Для элементов  $Z \leq 110$  функция  $F_{nlj}(Z\alpha)$  выбиралась из таблиц [32]. Для  $Z > 110$  мы определяли ее экстраполяцией, используя табулированные значения. Проверка точности экстраполяции показала, что возможная ошибка составляет несколько эВ. Экранирование приближенно учитывалось согласно работе [33] заменой в (18)  $(Z\alpha)^4$  на  $(Z^* \alpha)^4$ , где эффективный заряд  $Z^*$  определялся следующим образом:

$$Z^* = \frac{\langle r \rangle_{nlj}^{(H)}}{\langle r \rangle_{nlj}^{(DF)}} Z. \quad (19)$$

Здесь  $\langle r \rangle_{nlj}^{(H)}$  — среднее значение радиуса  $nlj$ -подоболочки в водородоподобном ионе, а  $\langle r \rangle_{nlj}^{(DF)}$  — в нейтральном атоме, вычисленное методом ДФ.



**Таблица 5.** Отношения вероятностей ионизации  $A_{LK}$ ,  $A_{ML}$  и  $A_{NM}$  [см. (15)] при  $\alpha$ -распаде рассматриваемых сверхтяжелых изотопов

Изотоп	${}^{270}_{105}\text{Db}$	${}^{274}_{107}\text{Bh}$	${}^{278}_{109}\text{Mt}$	${}^{282}_{111}\text{Rg}$	${}^{286}_{113}\text{Nh}$	${}^{286}_{114}\text{Fl}$	${}^{290}_{115}\text{Mc}$	${}^{290}_{116}\text{Lv}$	${}^{294}_{117}\text{Ts}$	${}^{294}_{118}\text{Og}$
$Q_{\alpha}$ , МэВ	7.9	8.7	9.0	9.2	9.5	10.2	10.2	10.8	11.0	11.65
$A_{LK}$	113.1	93.8	88.1	84.8	80.0	69.3	69.6	62.3	60.2	54.0
$A_{ML}$	18.1	16.6	15.8	14.9	14.1	13.2	13.0	12.4	11.9	11.4
$A_{NM}$	16.9	16.1	15.5	15.7	14.8	14.6	14.4	13.8	13.7	12.6

**Таблица 6.** Теоретические и экспериментальные значения энергий  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий (в кэВ) сверхтяжелых элементов  $103 \leq Z \leq 116$ 

Изотоп	Данная работа		Расчет [16]		Эксперимент	
	$K_{\alpha_1}$	$K_{\alpha_2}$	$K_{\alpha_1}$	$K_{\alpha_2}$	$K_{\alpha_1}$	$K_{\alpha_2}$
${}^{255}_{103}\text{Lr}$	130.593	123.837	130.613	123.867	$130.5 \pm 0.1$ [28]	$123.9 \pm 0.2$ [28]
${}^{257}_{104}\text{Rf}$	133.921	126.808	133.941	126.839	$133.5 \pm 0.4$ [28]	$126.7 \pm 0.4$ [28]
${}^{270}_{105}\text{Db}$	137.312	129.825			$137.4 \pm 1.6$ [17]	
${}^{274}_{107}\text{Bh}$	144.359	136.064	144.403	136.114		
${}^{268}_{109}\text{Mt}$	151.770	142.572	151.780	142.606	$155.0 \pm 0.8$ [18]	
${}^{282}_{111}\text{Rg}$	159.495	149.317	159.554	149.389		
${}^{282}_{112}\text{Cn}$	163.524	152.811	163.563	152.867		
${}^{286}_{113}\text{Nh}$	167.636	156.361				
${}^{286}_{114}\text{Fl}$	171.868	159.999				
${}^{290}_{115}\text{Mc}$	176.199	163.704				
${}^{290}_{116}\text{Lv}$	180.655	167.500				

Расчеты показали, что уменьшение энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий за счет лэмбовского сдвига для сверхтяжелых элементов составляет несколько сотен эВ. Для  $Z = 116$  энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий уменьшаются на  $\lesssim 600$  эВ.

В наших расчетах учитывались конечные размеры ядра. При этом предполагалось не равномерное распределение заряда по ядру, а распределение Ферми [20, 33]:

$$\rho(r) = \rho_0 \left[ 1 + \exp \frac{4 \ln 3 (r - c)}{t} \right]^{-1}, \quad (20)$$

где  $\rho_0$  — нормирующий множитель,  $c$  — радиус половинной плотности,  $t$  — толщина поверхностного слоя. В отличие от [16], мы выбирали параметры  $c$  и  $t$ , используя выражения, предложенные в [33]:

$$c = (1.1769A^{1/3} - 0.47983), \quad (21)$$

$$t = [(R_0^2 - c^2)/1.192525]^{1/2}.$$

Здесь  $A$  — массовое число,  $R_0 = 1.2A^{1/3}$  фм — радиус ядра, значения  $c$  и  $t$  приведены в единицах фм. Проверялось, что зарядовое распределе-

ние Ферми увеличивает энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий на несколько эВ по сравнению с равномерным распределением заряда по поверхности ядра [23]. Для  $Z = 116$  это увеличение составляет  $\sim 10$  эВ.

Учет корреляционного взаимодействия, выполненный методом МКДФ с включением возбужденных внешних электронов, мало влияет на внутренние уровни. По сравнению с одночастичным ДФ-расчетом энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий изменяются незначительно, на несколько эВ. Для  ${}^{268}_{109}\text{Mt}$  это увеличение составляет 8 эВ. В результате значение энергии  $K_{\alpha_1}$ -линии мейтнерия, вычисленной нами МКДФ методом с учетом брейтовского взаимодействия, лэмбовского сдвига и фермиевского распределения плотности заряда по ядру, составляет 151.77 кэВ.

Результаты расчетов энергий  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий приведены в табл. 6 для сверхтяжелых элементов, являющихся дочерними атомами в цепочках  $\alpha$ -распадов  ${}^{294}_{117}\text{Ts}$  и  ${}^{294}_{118}\text{Og}$ . Мы включили также данные для  $Z = 103, 104$ , так как для этих элементов имеются экспериментальные значения [28]. Там же даны результаты, полученные в [16]. Отметим, что в

табл. 6 представлены энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий для элементов  $Z = 105$  и  $113 \leq Z \leq 116$ , отсутствующие в [16]. Для всех изотопов, кроме  ${}^{268}_{109}\text{Mt}$ , приведены значения, вычисленные нами методом ДФ без учета корреляционных эффектов, но со всеми указанными выше поправками.

Таблица 6 демонстрирует хорошее согласие, с точностью до сотых долей процента, наших вычислений и значений из [16]. Расчеты прекрасно совпадают с данными экспериментов для  $Z = 103, 104, 105$ . Однако расчеты для  ${}^{268}_{109}\text{Mt}$ , хотя и совпадают между собой с точностью 0.01%, существенно расходятся (на 2.1%) с экспериментальным значением, полученным в [18]. Следовательно, наши расчеты подтверждают вывод работы [16] о том, что линия  $(155.0 \pm 0.8)$  кэВ не может быть идентифицирована как  $K_{\alpha_1}$ -линия нейтрального  ${}^{268}_{109}\text{Mt}$ .

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что  $N$ -оболочки являются внутренними для сверхтяжелых элементов, и вероятность ионизации этих оболочек, сопровождающей  $\alpha$ -распад сверхтяжелых изотопов, может быть рассчитана в той же модели, которая использовалась при вычислении ионизации  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек в наших предыдущих работах [5–8]. В основе модели лежит квантовомеханическое рассмотрение, предложенное в [9]. Основные отличия наших расчетов от предыдущих вычислений других авторов состоят в следующем: а) использование метода ДФ с точным учетом экранирования ядра атомными электронами и обменного взаимодействия между электронами; б) учет всех мультипольных переходов, вносящих значимый вклад в вероятность ионизации оболочек, например, при вычислении ионизации  $N$ -оболочек необходимо учитывать вклады всех мультиполей  $0 \leq L \leq 6$ ; в) точный учет туннелирования  $\alpha$ -частицы через кулоновский барьер атома, что особенно существенно для  $K$ -оболочки. Как показано в [5–8], результаты расчетов вероятности ионизации  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек, сопровождающей  $\alpha$ -распад ряда изотопов  ${}^{84}\text{Po}$  и изотопа  ${}^{222}_{86}\text{Rn}$ , хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

В данной работе впервые вычислена вероятность ионизации  $N$ -подоболочек при  $\alpha$ -распаде десяти сверхтяжелых изотопов, входящих в цепочки распадов  ${}^{294}_{117}\text{Ts}$  и  ${}^{294}_{118}\text{Og}$ , которые в настоящее время активно исследуются теоретически и экспериментально. Результаты для  $N$ -оболочек анализируются и сравниваются с вероятностями ионизации  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек. Показано, что вероятность ионизации  $N$ -оболочки увеличивается в среднем в 15 раз по сравнению с  $M$ -оболочкой.

Дано качественное объяснение увеличения вероятности ионизации при  $\alpha$ -распаде для каждой оболочки атома с большим главным квантовым числом  $n$ .

Вычислены энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$  рентгеновских линий для ряда сверхтяжелых элементов. Использовался метод ДФ, учитывалось взаимодействие Брейта и лэмбовский сдвиг, включающий электродинамические поправки высших порядков, а также фермиевское распределение плотности заряда ядра. Эти расчеты были выполнены в связи с существенным, на 3.2 кэВ, расхождением теоретического значения энергии  $K_{\alpha_1}$ -линии, полученного в [16] для  ${}^{268}_{109}\text{Mt}$ , с экспериментом [18]. Наш расчет  $K_{\alpha_1} = 151.77$  кэВ прекрасно согласуется с вычислениями [16]  $K_{\alpha_1} = 151.78$  кэВ. Это подтверждает вывод, сделанный в [16], что экспериментальная линия  $(155.0 \pm 0.8)$  кэВ не может быть идентифицирована как  $K_{\alpha_1}$ -линия нейтрального  ${}^{268}_{109}\text{Mt}$ . Вычислены энергии  $K_{\alpha_{1,2}}$ -линий для элементов  ${}^{270}_{105}\text{Db}$ ,  ${}^{274}_{107}\text{Bh}$ ,  ${}^{282}_{111}\text{Rg}$ ,  ${}^{282}_{112}\text{Cn}$ ,  ${}^{286}_{113}\text{Nh}$ ,  ${}^{286}_{114}\text{Fl}$ ,  ${}^{290}_{115}\text{Mc}$ ,  ${}^{290}_{116}\text{Lv}$ , которые являются дочерними атомами в цепочках  $\alpha$ -распадов изотопов  ${}^{294}_{117}\text{Ts}$  и  ${}^{294}_{118}\text{Og}$ .

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **11**, 207 (1941).
2. L. Kocbach, in *Proceedings of the Nordic Spring Symposium on Atomic Inner Shell Phenomena*, Ed. by J. M. Hansteen and R. Gundersen (Univ. Bergen, Norway, 1978), Vol. 2, p. 65.
3. M. Lund, J. U. Andersen, E. Lægsgaard, and L. Kocbach, Report DK-8000 (Univ. Aarhus, Denmark, 2009); [www.phys.au.dk/main/publications/PhD/Martin\\_Lund.pdf](http://www.phys.au.dk/main/publications/PhD/Martin_Lund.pdf)
4. N. Wandkowsky, G. Drexlin, F. M. Fränkle, F. Glück, S. Groh, and S. Mertens, arXiv: 1304.1375v1 [physics.ins-det].
5. М. В. Тржасковская и V. K. Nikulin, Phys. Rev. C **93**, 034312 (2016).
6. В. К. Никулин, М. Б. Тржасковская, Изв. РАН. Сер. физ. **81**, 1343 (2017) [Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **81**, 1201 (2017)].
7. В. К. Никулин, М. Б. Тржасковская, ЯФ **82**, 62 (2019) [Phys. At. Nucl. **82**, 55 (2019)].
8. V. K. Nikulin and M. B. Trzhaskovskaya, Phys. Rev. C **99**, 054328 (2019).
9. R. Anholt and P. A. Amundsen, Phys. Rev. A **25**, 169 (1982).
10. S. R. McConnell, A. N. Artemyev, and A. Surzhykov, J. Phys. B **44**, 145204 (2011).
11. L. Öhrström and J. Reedijk, Pure Appl. Chem. **88**, 1225 (2016).
12. <https://en.wikipedia.org/wiki/Tennessine>
13. <https://en.wikipedia.org/wiki/Oganesson>

14. N. T. Brewer, V. K. Utyonkov, K. P. Rykaczewski, Yu. Ts. Oganessian, F. Sh. Abdullin, R. A. Boll, D. J. Dean, S. N. Dmitriev, J. G. Ezold, L. K. Felker, R. K. Grzywacz, M. G. Itkis, N. D. Kovrizhnikh, D. C. McInturff, R. Miernik, G. D. Owen, *et al.*, *Phys. Rev. C* **98**, 024317 (2018).
15. Yu. Ts. Oganessian and V. K. Utyonkov, *Nucl. Phys. A* **944**, 62 (2015).
16. C. Thierfelder, P. Schwerdtfeger, F. P. Heßberger, and S. Hofmann, *Eur. Phys. J. A* **36**, 227 (2008).
17. F. P. Heßberger, S. Hofmann, B. Streicher, B. Sulignano, S. Antalic, D. Ackermann, S. Heinz, B. Kindler, I. Kojouharov, P. Kuusiniemi, M. Leino, *et al.*, *Eur. Phys. J. A* **41**, 145 (2009).
18. S. Hofmann, F. P. Heßberger, D. Ackermann, G. Münzenberg, S. Antalic, P. Cagarda, D. Kindler, J. Kojouharova, M. Leino, B. Lommel, R. Mann, *et al.*, *Eur. Phys. J. A* **14**, 147 (2002).
19. I. M. Band, M. B. Trzhaskovskaya, C. W. Nestor, Jr., P. O. Tikkanen, and S. Raman, *At. Data Nucl. Data Tables* **81**, 1 (2002).
20. И. М. Банд, М. А. Листенгартен, М. Б. Тржасковская, *Комплекс программ RAINE, часть VI*, Препринт ЛИЯФ №1479 (Гатчина, 1989).
21. J. U. Andersen, E. Lægsgaard, M. Lund, and C. D. Moak, *Nucl. Instrum. Methods* **132**, 507 (1976).
22. I. P. Grant, *Adv. Phys.* **19**, 747 (1970).
23. Л. А. Слив, *ЖЭТФ* **21**, 770 (1951).
24. M. S. Rapaport, F. Asaro, and I. Perlman, *Phys. Rev. C* **11**, 1746 (1975).
25. M. S. Rapaport, F. Asaro, and I. Perlman, *Phys. Rev. C* **11**, 1740 (1975).
26. J. S. Hansen, *Phys. Rev. A* **9**, 40 (1974).
27. I. D. Kaganovich, E. Startsev, and R. C. Davidson, *New J. Phys.* **8**, 278 (2006).
28. F. P. Heßberger, S. Hofmann, D. Ackermann, S. Antalic, B. Kindler, I. Kojouharov, P. Kuusiniemi, M. Leino, B. Lommel, R. Mann, K. Nishio, A. G. Popeko, *et al.*, *Eur. Phys. J. A* **29**, 165 (2006); **30**, 561 (2006).
29. I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers, and N. C. Pyper, *Comput. Phys. Commun.* **21**, 207 (1980).
30. I. M. Band and M. B. Trzhaskovskaya, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30**, 5185 (1997).
31. I. P. Grant and N. C. Pyper, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **9**, 761 (1976).
32. W. R. Johnson and G. Soff, *At. Data Nucl. Data Tables* **33**, 405 (1985).
33. M. H. Chen, B. Crasemann, V. Aoyagi, K.-N. Huang, and H. Mark, *At. Data Nucl. Data Tables* **26**, 561 (1981).

## ATOMIC PROCESSES ACCOMPANYING $\alpha$ DECAY OF SUPERHEAVY NUCLEI

V. K. Nikulin<sup>1)</sup>, M. B. Trzhaskovskaya<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>*Ioffe Physical Technical Institute, St. Petersburg, Russia*

<sup>2)</sup>*National Research Center "Kurchatov Institute" — PNPI, Gatchina, Russia*

Considered here are processes of the atomic shell ionization and X-ray transitions in daughter atoms accompanying  $\alpha$  decay of superheavy isotopes. We have calculated probabilities of the  $N$ -shell ionization during  $\alpha$  decay of isotopes from the tennessine  ${}_{117}^{294}\text{Ts}$   $\alpha$ -decay chain as well as the oganesson  ${}_{118}^{294}\text{Og}$  chain. The Dirac–Fock method has been used taking into account all multipole transitions and the  $\alpha$ -particle tunneling through the atomic Coulomb barrier. Results obtained are analyzed and compared with the  $K$ -,  $L$ -, and  $M$ -shell ionization probabilities. The  $K_{\alpha_{1,2}}$  X-ray energies have been calculated with consideration for the Breit interaction and electrodynamic high-order corrections for superheavy isotopes which are the  $\alpha$ -decay products in chains of  ${}_{117}^{294}\text{Ts}$  and  ${}_{118}^{294}\text{Og}$ . The  $K_{\alpha_1}$  X-ray energy for the  ${}_{109}^{268}\text{Mt}$  isotope is shown to agree with an accuracy of 0.01 keV with the theoretical value obtained in previous calculations. The agreement provides a confirmation that the experimental line observed in GSI (Darmstadt) which exceeds theoretical values by 3.2 keV cannot be identified with the X-ray  $K_{\alpha_1}$  of the meitnerium atom.