



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P9-93-307

К.Мюле, Е.Э.Ширкова, Г.Д.Ширков

БИБЛИОТЕКА ДАННЫХ ИОНИЗАЦИОННЫХ
ПОТЕНЦИАЛОВ АТОМОВ И ИОНОВ

1993

В различных задачах атомной физики, физики плазмы, физики источников многозарядных ионов и в других областях физики, связанных с многократной ионизацией атомов, необходимы табличные значения потенциалов ионизации всех ионизационных состояний различных элементов. В настоящее время опытным путем определены потенциалы ионизации нейтральных элементов большей части таблицы Д.И.Менделеева. В то же время потенциалы ионизации ионов измерены только для относительно небольшого числа малозарядных ионов некоторых элементов. По этой причине на практике обычно используют таблицы с расчетными значениями потенциалов ионизации.

Потенциалы ионизации всех зарядовых состояний необходимы, в частности, для нахождения сечений ионизации и перезарядки в расчетах по определению зарядовых распределений в источниках многозарядных ионов. В этом случае дело осложняется тем, что для вычисления полного сечения ионизации требуются значения потенциалов всех внутренних оболочек иона. Например, полное число значений потенциалов ионизации для подоболочек всех зарядовых состояний ионов ксенона (Xe , заряд ядра $Z = 54$) составляет более пятисот значений, а для урана (U , $Z = 92$) их более тысячи.

Обычно программы для численного моделирования процессов образования и накопления ионов в ионных источниках имеют универсальный характер по отношению к типу ионов. В принципе, можно иметь в программе в виде таблицы все значения потенциалов ионизации для каждого элемента, представляющего интерес для расчетов. Но эти таблицы занимают большой объем в программе и требуют много машинной памяти. Это тем более неудобно, т. к. одни и те же потенциалы ионизации могут быть использованы с равным успехом во многих программах, а вариантов программ, моделирующих различные физические процессы в ионных источниках разных типов, может быть большое число.

Другим вариантом подхода к этой проблеме является расчет всего набора ионизационных потенциалов непосредственно в программе, моделирующей процесс накопления ионов. В настоящее время создан ряд современных пакетов программ для расчета энергетической структуры атомов и ионов, учитывающих основные

эффекты в атомной оболочке ионов и позволяющих с высокой степенью надежности определять атомные константы. Но сами эти программы очень сложны и громоздки, а кроме того, требуют много расчетного времени, особенно при расчетах электронных оболочек тяжелых атомов и ионов.

Более рациональным решением этой проблемы явилось создание специального пакета файлов данных, содержащих ионизационные потенциалы для каждого элемента в отдельности. Названия всех файлов имеют общую форму: ION**.ION, где ** соответствует порядковому номеру элемента в таблице Д.И.Менделеева. При математическом моделировании физических процессов, связанных с образованием многозарядных ионов в источнике, из основной программы вызывается только файл данных, соответствующий элементу, необходимому для расчетов.

Каждый такой файл содержит набор ионизационных потенциалов всех электронных подоболочек нейтрального атома. С этой целью были использованы табличные значения, приведенные в /1/. Для определения потенциалов ионных подоболочек используются расчетные значения энергетических сдвигов потенциалов ионизации для всех ионизационных состояний атомов от гелия до урана, найденные в /2/ и записанные также в файлы ION**.ION. Кроме потенциалов ионизации нейтрального атома и энергетических сдвигов для ионов, каждый файл данных содержит информацию о структуре электронных оболочек атома, порядковый номер и химическое название элемента.

В качестве примера приведем файл ION16.ION, содержащий данные о строении и энергетической структуре атома и ионов серы (S , $Z = 16$).

SULFUR	название элемента
16	порядковый номер элемента
7	количество электронных подоболочек атома
1 0 1 2	} квантовые числа n , l и j для каждой электронной подоболочки и количество электронов в ней
2 0 1 2	
2 1 1 2	
2 1 3 4	
3 0 1 2	
3 1 1 2	
3 1 3 2	}

2.4559	}	потенциалы ионизации (в keV) электронных подболочек нейтрального атома	
0.2259			
0.1727			
0.1714			
0.02094			
0.01033			
0.01024	}	потенциалы ионизации (в eV) электронных подболочек для различных зарядовых состояний ионов i ($i = 1, 2, 3, \dots, 14, 15$)	
13.07			
12.73			
12.77			
12.77			$i = 1$
10.95			
10.45	}	$i = 2$	
10.43			
28.55			
27.60			
27.70			
27.70			
23.20	}	$i = 3$	
22.22			
46.27			
44.38			
44.58			
44.57			
36.56	}	$i = 4$	
35.15			
35.98			
62.83			
63.16			
63.14			
50.99	}	$i = 5$	
88.08			
83.45			
83.93			
83.90			
67.78			
112.73	}	$i = 6$	
106.14			
106.82			
106.79			

178.53	}	$i = 7$	
153.80			
156.94			
156.81			
248.73	}	$i = 8$	
203.61			
209.67			
209.02			
323.24	}	$i = 9$	
255.46			
264.88			
264.53			
401.84	}	$i = 10$	
309.13			
309.30			
484.78			
364.66	}	$i = 11$	
381.85			
571.29			
421.77			
650.73	}	$i = 13$	
483.45			
753.06			$i = 14$
1039.13			$i = 15$

В настоящее время созданы файлы данных для основных химических элементов, представляющих наибольший интерес для источников многозарядных ионов: гелия (He, $Z = 2$), углерода (C, $Z = 6$), азота (N, $Z = 7$), кислорода (O, $Z = 8$), неона (Ne, $Z = 10$), алюминия (Al, $Z = 13$), серы (S, $Z = 16$), аргона (Ar, $Z = 18$), кальция (Ca, $Z = 20$), железа (Fe, $Z = 26$), меди (Cu, $Z = 29$), цинка (Zn, $Z = 30$), криптона (Kr, $Z = 36$), серебра (Ag, $Z = 47$), олова (Sn, $Z = 50$), ксенона (Xe, $Z = 54$), тантала (Ta, $Z = 73$), золота (Au, $Z = 79$), свинца (Pb, $Z = 82$) и урана (U, $Z = 92$).

Часть файлов библиотеки ионизационных потенциалов были успешно использованы при расчетах зарядовых распределений ионов азота, неона, аргона и криптона в источниках ионов на электронно-циклотронном резонансе (см., например, [3 - 5]) в течение последних нескольких лет. Файлы для других элементов

предполагается использовать в предстоящих расчетах. При необходимости библиотека энергий ионизации может быть дополнена данными любых для других атомов и ионов. Но уже сейчас можно заключить, что идея сохранения ионизационных потенциалов в отдельных файлах данных для каждого элемента полностью себя оправдала.

Литература

1. T.A. Carlson, C.W. Nestor, N. Wasserman, J.D. McDowell; Atomic Data, 2, 1970, p.63.
2. G. Zschornack, G. Musiol, W. Wagner; Report ZfK-574, Dresden-Rossendorf 1986.
3. Г.Д. Ширков. Препринт ОИЯИ Р9-90-581, Дубна, 1990, 16с.; ЖТФ, т.62, 1992, сс.94-107.
4. V. Kutner, G. Shirkov. Proceeding of 5th Internat. Conference on the Physics of Highly Charged Ions, Giessen, Germany, 1990 in: Atomic Physics of Highly Charged Ions. Springer-Verlag, Berlin, 1991, (Supplement to Z. Phys. D.) p.S 323-325.
5. G. Shirkov, C. Muehle, G. Musiol, G. Zschornack. Nucl. Instr. and Methods A302 (1991), pp.1-5
6. G. Shirkov, preprint JINR E9-92-33, Dubna, 1992, 11p.; Nucl. Instr. and Methods A322, pp.161-165, 1992.

Мюле К., Ширкова Е.Э., Ширков Г.Д.
Библиотека данных ионизационных потенциалов
атомов и ионов

P9-93-307

Описаны основные принципы построения библиотеки файлов данных ионизационных потенциалов атомов и ионов. Каждый файл содержит информацию о строении электронной оболочки отдельного атома, потенциалы ионизации всех электронных подоболочек нейтрального атома и энергетические сдвиги потенциалов для всех зарядовых состояний ионов данного элемента. Файлы библиотеки используются при математическом моделировании процессов, связанных с образованием и накоплением ионов в источниках многозарядных ионов.

Работа выполнена в Лаборатории сверхвысоких энергий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1993

Перевод авторов

Muehle C., Shirkova E.E., Shirkov G.D.
Ionization Potential Data Library of Atoms and Ions

P9-93-307

The general principles of the library construction of data files for the atomic and ionic ionization potentials are described. Each file relates to one atom and contains the information of the structure of atom electron shells, the ionization potentials for all subshells of neutral atom and the energy shifts of potentials for all ionization states of given element. The library files have been used in the mathematical simulation of processes connected with the ion formation and confinement in the sources of multicharged ions.

The investigation has been performed at the Particle Physics Laboratory, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1993