

2727/2-76

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



19/11-76

3-59

P9 - 9657

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

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ РАСЧЕТ  
ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ АТОМА  $^{54}\text{Xe}$   
ПО МЕТОДУ ДИРАКА-ФОКА-СЛЕТЕРА  
ДО ВЫСОКИХ СТЕПЕНЕЙ ИОНИЗАЦИИ

**1976**

P9 - 9657

Х.-У.Зиберт, Д.Леманн, Г.Музиоль\*, Г.Щорнак

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ РАСЧЕТ  
ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ АТОМА  $^{54}\text{Xe}$   
ПО МЕТОДУ ДИРАКА-ФОКА-СЛЕТЕРА  
ДО ВЫСОКИХ СТЕПЕНЕЙ ИОНИЗАЦИИ

Направлено в журнал "Оптика и спектроскопия"

---

\* Технический университет, Дрезден, ГДР.

## **1. ВВЕДЕНИЕ**

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/.

## **2. ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА АТОМА $^{54}\text{Xe}$ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИОНИЗАЦИОННОГО СОСТОЯНИЯ**

С помощью релятивистской программы типа Дирака-Фока-Слетера /4/ рассчитаны энергетические положения атомных уровней с квантовыми числами  $(n, \ell, j)$  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.

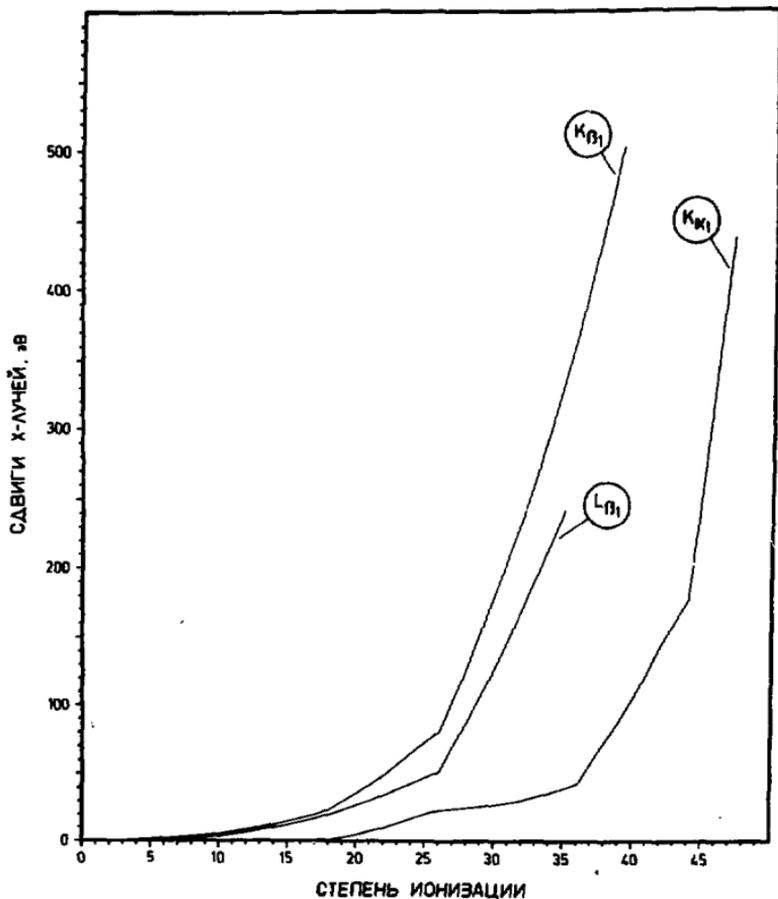
Табл. 1 содержит рассчитанные энергии уровней атома ксенона, полученные при решении релятивистского уравнения типа Дирака-Фока-Слетера /4/. При этом приблизительно учтен вклад взаимодействия обмена между электронами с помощью потенциала обмена типа Слетера /5/

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

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

### 3. СДВИГИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭНЕРГИЙ

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 ( $K_{\alpha 1}, K_{\beta 1}, \beta_1$ ) в зависимости от степени ионизации атома, представлены на рисунке. Заметим, что значения сдвигов для  $L_{\alpha 1}$  и  $L_{\beta 1}$  лучей отклоняются друг от друга в пределах нескольких десятых электронвольт. Принимается, что как образование дырок, так и заполнение их электронами из расположенных выше 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



Значения энергетических сдвигов рентгеновских лучей /  $K\alpha_1$ ,  $K\beta_1$  и  $L\beta_1$  / для разных степеней ионизации в случае ксенона, полученные при помощи релятивистской программы типа Дирака-Фока-Слетера [4].

точности рассчитанных энергий рентгеновских переходов нейтрального атома, по отношению которых определяются сдвиги рентгеновских переходов. Это сравнение показывает, что энергии К-лучей, рассчитанные с помощью программы /4/, совпадают с экспериментальными данными с точностью 0,02%. С другой стороны, расчеты с помощью нерелятивистской программы типа Хартри-Фока-Слетера /9/ дают энергии рентгеновских переходов, отклоняющихся от экспериментальных на ~ 4,5%.

## 4. ОБСУЖДЕНИЕ

### 4.1. Энергии уровней атома

Рассчитанные собственные значения энергии атома получены при учете эффектов обмена и пренебрежении мультиконфигурационными эффектами и эффектами запаздывания. В табл. 3 даны экспериментальные и рассчитанные энергии уровней нейтрального атома ксенона. Отклонения рассчитанных от экспериментальных данных составляют меньше 1%. Особенно хорошее согласие получается в случае энергии К-уровня, где отклонение достигает значения 0,005%. В свою очередь, нерелятивистские расчеты типа Хартри-Фока-Слетера /9/ дают отклонения экспериментальной и рассчитанной энергии К-уровня ксенона на величину, равную 4,2%. Так как значения энергий КХ-линий сильно зависят от энергетического положения К-уровня, точный расчет энергий К-уровня имеет особенное значение для определения энергий КХ-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  $i > 5$ .

#### 4.2. Энергетические ограничения для переходов Костера-Кронига

Знание энергетической структуры оболочек атома в зависимости от его ионизационного состояния позволяет сделать выводы о возможностях многократной ионизации в ионизационных процессах вследствие электроно-атомных столкновений. При низких степенях ионизации ионизационные процессы, возникающие при переходах Костера-Кронига, дают заметный вклад в сечение многократной ионизации. Такими переходами называют переходы типа  $X \rightarrow YZ$  между двумя подоболочками  $X$  и  $Y$ , которые характеризуются одним и тем же главным квантовым числом. При этих переходах первоначально образованная дырка из подоболочки  $X$  переходит в более высоко расположенную подоболочку  $Y$ . При этом освобождается энергия, равняющаяся 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 переходов Костера-Кронига  $f_{L_{ij}}$  на  $L$ -оболочках<sup>/12/</sup>, вытекает важность учета этих 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 переходов в зависимости от степени ионизации /см. табл. 5/. При переходе приведенных границ степени ионизации оже-каскады оказываются важнейшим членом процессов многократной ионизации.

Таблица 1  
 Рассчитанные энергии уровней атома ксенона в зависимости от степени ионизации, полученные с помощью релятивистской программы Дирака-Фока-Слетера /4/.

Степень ионизации	энергии атомных						
	1s <sup>1/2</sup>	2s <sup>1/2</sup>	2p <sup>1/2</sup>	2p <sup>3/2</sup>	3s <sup>1/2</sup>	3p <sup>1/2</sup>	3p <sup>3/2</sup>
0	34559,7	5417,7	5104,3	4774,6	1122,3	989,7	926,5
1	34570,5	5428,5	5115,1	4785,4	1133,1	1000,5	937,3
2	34582,6	5440,5	5127,1	4797,5	1145,0	1012,5	949,2
3	34595,9	5453,6	5140,2	4810,6	1158,0	1025,5	962,2
4	34610,1	5467,6	5154,3	4824,6	1171,9	1039,4	976,1
5	34625,7	5482,9	5169,6	4839,9	1187,1	1054,5	991,3
6	34642,1	5499,1	5185,6	4856,1	1203,0	1070,5	1007,2
7	34660,4	5517,0	5203,8	4874,0	1220,7	1088,2	1024,9
8	34679,5	5535,7	5222,5	4892,8	1239,2	1106,7	1043,4
9	34710,3	5566,7	5253,6	4923,8	1269,1	1136,6	1073,2
10	34742,5	5599,1	5286,0	4956,2	1300,1	1167,7	1104,3
11	34776,0	5632,8	5319,7	4990,0	1332,2	1199,9	1136,4
12	34810,7	5667,8	5354,8	5025,0	1365,5	1233,3	1169,6
13	34846,8	5704,0	5391,1	5061,3	1399,8	1267,7	1203,9
14	34884,2	5741,5	5428,7	5098,9	1435,1	1303,1	1239,2
15	34923,2	5780,6	5467,9	5138,0	1471,7	1339,8	1275,8
16	34963,4	5820,8	5508,3	5178,7	1509,3	1377,5	1313,4
17	35004,9	5862,3	5550,0	5220,0	1547,9	1416,3	1351,9
18	35047,6	5905,1	5592,9	5262,9	1587,4	1455,9	1391,4
19	35094,4	5949,2	5637,5	5307,3	1628,3	1497,0	1432,3
20	35142,2	5994,3	5683,0	5352,7	1669,9	1538,9	1474,0
21	35191,0	6040,2	5729,5	5399,0	1712,3	1581,4	1516,3
22	35240,9	6087,1	5776,8	5446,2	1755,3	1624,6	1559,3
23	35293,3	6135,8	5826,2	5495,4	1799,8	1669,4	1603,8
24	35346,8	6185,5	5876,5	5545,4	1845,0	1714,9	1649,0
25	35400,3	6235,6	5927,1	5595,9	1891,0	1761,1	1694,9
26	35454,9	6286,7	5978,6	5647,3	1937,6	1808,0	1741,6
27	35555,1	6385,4	6078,4	5746,7	2014,5	1886,3	1818,6
28	35657,7	6486,4	6180,4	5848,4	2092,5	1965,9	1896,8
29	35762,6	6589,4	6284,5	5952,2	2171,7	2046,7	1976,2
30	35869,8	6694,4	6390,8	6058,1	2251,9	2128,6	2056,7
31	35979,5	6801,4	6499,2	6166,2	2333,2	2211,7	2138,4

уровней, эВ									
3d3/2	3d5/2	4s1/2	4p1/2	4p3/2	4d3/2	4d5/2	5s1/2	5p1/2	5p3/2
690,9	677,4	208,5	160,8	148,0	69,8	67,7	23,6	12,4	11,0
701,6	688,1	219,2	171,5	158,6	80,5	78,3	33,4	21,7	20,1
713,6	700,1	231,0	183,3	170,4	92,2	90,1	44,0	31,8	30,1
726,6	713,1	243,8	196,1	183,2	105,0	102,8	55,2	42,6	40,7
740,5	727,0	257,5	209,7	196,8	118,4	116,3	67,0	53,9	
755,7	742,1	272,3	224,5	211,6	133,0	130,8	79,5	66,0	
771,6	758,1	287,8	239,9	227,0	148,3	146,1	92,6		
789,3	775,8	304,9	257,0	244,1	165,1	162,9	106,7		
807,8	794,3	322,7	274,8	261,7	182,6	180,3			
837,9	824,4	349,5	301,2	287,9	208,0	205,6			
869,2	855,6	376,9	328,4	314,8	234,1	231,7			
901,6	888,0	405,1	356,3	342,4	261,0	258,5			
935,2	921,5	434,0	384,9	370,7	288,7	286,0			
969,8	956,1	463,6	414,2	399,6	317,0	314,3			
1005,5	991,8	493,7	444,1	429,2	346,0				
1042,5	1028,8	524,7	474,8	459,5	375,8				
1080,6	1066,8	556,2	506,1	490,3	406,2				
1119,7	1105,8	588,2	537,9	521,8	437,3				
1159,7	1145,8	620,8	570,3	553,8					
1201,1	1187,1	654,3	603,5	586,6					
1243,2	1229,1	688,1	637,1	619,8					
1286,0	1271,9	722,2	671,1	653,3					
1329,5	1315,3	756,6	705,4						
1374,7	1360,4	791,8	740,5						
1420,5	1406,1	827,5							
1467,0	1452,6	864,4							
1514,4	1499,9								
1596,0	1581,1								
1679,2	1663,8								
1763,8	1748,0								
1849,9	1833,6								
1937,4	1920,7								

Таблица 1 /продолжение/

степень ионизации	энергия атомных уровней, эВ						
	1s1/2	2s1/2	2p1/2	2p3/2	3s1/2	3p1/2	3d3/2
30	36091,5	6910,5	6609,8	6276,3	2415,5	2296,0	2221,3
33	36207,4	7022,6	6723,7	6389,7	2499,2	2381,8	2305,6
34	36325,7	7136,7	6839,8	6505,2	2584,0	2468,7	2391,0
35	36446,3	7252,7	6957,9	6622,7	2665,6	2556,6	2477,4
36	36569,4	7370,6	7077,1	6742,3	2756,3	2645,6	2564,9
37	36695,0	7479,2	7199,9	6853,1	2838,5	2730,0	2648,0
38	36822,4	7599,0	7303,1	6965,2	2921,2	2814,9	2731,6
39	36951,6	7700,0	7417,6	7079,6	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	37794,2	8490,5	8246,9	7896,0			
46	38267,9	8706,2	8486,2	8129,0			
47	38587,4	8926,9	8726,7	8363,3			
48	38915,4	9146,6	8969,2				
49	39267,3	9372,4	9216,8				
50	39621,6	9591,7					
51	39931,9	9833,7					
52	40315,1						
53	41147,7						

Таблица 2

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

Рентгеновский переход	$E_{\text{эксп.}}$ , эВ	$E_{\text{ДЭС}}$ , эВ	$\left  \frac{E_{\text{эксп.}} - E_{\text{ДЭС}}}{E_{\text{эксп.}}} \right $
$K_{\alpha_1}$	29779 ± 1,4	29785,1	0,00020
$K_{\beta_1}$	33624 ± 1,8	33633,2	0,00027
$L_{\alpha_1}$	4109,9 ± 2,7	4097,2	0,00309

**Таблица 3**  
**Сравнение экспериментальных и рассчитанных энергий**  
**уровней нейтрального атома ксенона**

Уровень	$E_{\text{уров.}} \cdot \text{эВ}$		$\left  \frac{E_{\text{уров., эксп.}} - E_{\text{уров., ДЭС}}}{E_{\text{уров., эксп.}}} \right $
	эксп. /10/	ДЭС	
K	$34561,4 \pm 1,1$	34559,7	0,00005
L <sub>I</sub>	$5452,8 \pm 0,4$	5417,7	0,0064
L <sub>II</sub>	$5103,7 \pm 0,4$	5104,3	0,0001
L <sub>III</sub>	$4782,2 \pm 0,4$	4774,6	0,0016
M <sub>II</sub>	$999,0 \pm 2,1$	989,6	0,0093
M <sub>III</sub>	$937,0 \pm 2,1$	926,5	0,0112
M <sub>v</sub>	$672,3 \pm 0,5$	677,4	0,0076
N <sub>III</sub>	$146,7 \pm 3,1$	148,0	0,0089

**Таблица 4**

**Выходы флуоресценции  $\omega_{Lij}$  и выходы переходов Костера-Кронига  $f_{Lij}$  на L-оболочках /по данным работы /12/**

$\omega_{L_I}$	$\omega_{L_{II}}$	$\omega_{L_{III}}$	$f_{L_{I,II}}$	$f_{L_{I,III}}$	$f_{L_{II,III}}$
0,058	0,091	0,097	0,179	0,274	0,173

Таблица 5

Граничные степени ионизации для возникновения переходов Костера-Кронига в случае ксенона

$X \longrightarrow Y \quad Z$	Степень ионизации
$L_I \longrightarrow L_{II} \quad O$	7
$L_I \longrightarrow L_{II} \quad N_I$	7
$L_I \longrightarrow L_{II} \quad N_{II}$	9
$L_I \longrightarrow L_{II} \quad N_{III}$	9
$L_I \longrightarrow L_{II} \quad N_{IV}$	12
$L_I \longrightarrow L_{II} \quad N_V$	12
$L_I \longrightarrow L_{II} \quad M$	запрещен
$L_I \longrightarrow L_{III} \quad M$	запрещен
$L_{II} \longrightarrow L_{III} \quad O$	7
$L_{II} \longrightarrow L_{III} \quad M$	запрещен
$L_{II} \longrightarrow L_{III} \quad N$	13

## ЛИТЕРАТУРА

1. X. - У. Зибери, Д. Леманн, Г. Музиоль, Г. Щорнак. ОИЯИ, Р9-9366, Дубна, 1975.
2. J.D. Garcia, R.J. Forther, T.M. Karanagh. Rev. Mod. Phys., 45, 111 (1973).

3. A.Salop. *Phys.Rev.*, A8, 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.*, A3, 587 (1971).

Рукопись поступила в издательский отдел  
29 марта 1976 года.