

СТАТИЧЕСКАЯ ДИПОЛЬНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

В. П. Шевелько

УДК 539.186.3

Предложена простая двухпараметрическая формула для расчета статической дипольной поляризуемости многозарядных ионов. Приведена таблица вычисленных аппроксимационных параметров поляризуемостей для ионов изоэлектронных рядов от H до Xe.

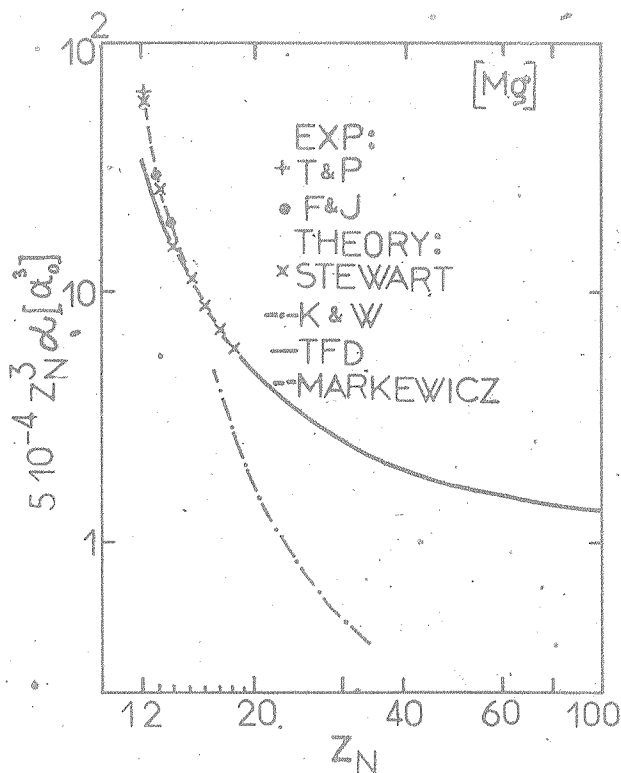
Статическая дипольная поляризуемость α является одной из основных элементарных радиационных характеристик ионов в плазме, взаимодействующей с внешним электрическим полем. В частности, величина α описывает сдвиг ионного терма в поле и поляризационную часть энергии высоковозбужденного уровня многозарядного иона /1/. Свойства α хорошо изучены в основном для нейтральных атомов /2/ и ионов X^{Z+} с зарядом $Z \leq 10$ (см., напр., /3-5/). Теоретические и экспериментальные данные для поляризуемостей многозарядных ионов с $Z > 10$ весьма немногочисленны. Для получения согласованных данных и для физических приложений необходимо знание универсальных формул (или графиков), которые давали бы величину α для всех ионов требуемого изоэлектронного ряда без применения ЭВМ.

В настоящей работе предлагается способ описания поляризуемости α изоэлектронных последовательностей в виде

$$\alpha = a(Z_N - b)^{-c} \left[a_0^3 \right], \quad (I)$$

где a_0 - боровский радиус, Z_N - заряд ядра, a - константа пропорциональности, b - константа экранировки; показатель

$s = 3$, если основной вклад в α , дают переходы без изменения главного квантового числа ($\Delta l = 0$), и $s = 4$, если $\Delta l \neq 0$. Аппроксимационные константы a и b подбираются по теоретическим или экспериментальным данным α ионов с зарядом $Z > 4$. Экстраполяция α на большие Z по данным для нейтральных атомов и ионов низкой кратности ионизации ($Z < 4$), может привести к сильно заниженным результатам /6/, особенно для последовательностей



Р и с. I. Зависимость дипольной поляризуемости от заряда ядра для Mg-последовательности: эксперимент: (+) /2/, (o) /13/; расчет: (x) метод ХФ /8/, (- -) метод ХФ /9/, (-) метод ТФД /5/, (---) экстраполяция /6/

с небольшим числом электронов в оптической оболочке, что связано с резкой зависимостью α от Z_N для первых членов изоэлектронного ряда (рис. 1).

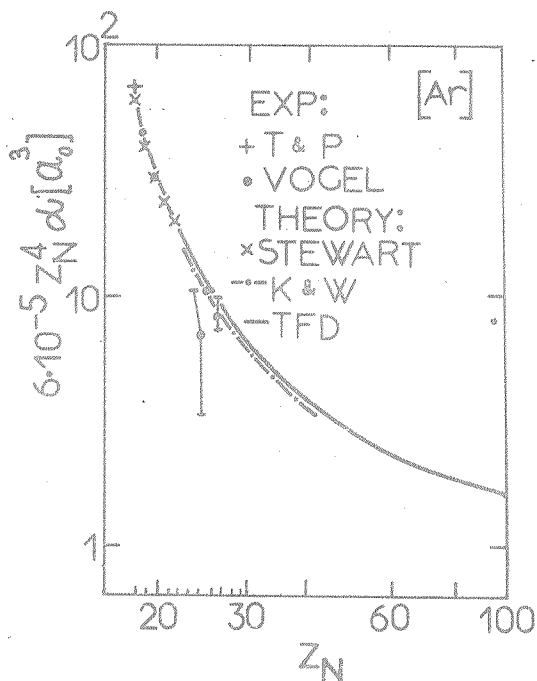
В настоящей работе величины a и b подбирались по расчетам α для многозарядных ионов, выполненных в модели Томаса - Ферми - Дирака (ТФД) /5/, в кулоновском приближении (КП) /7/, в приближении Хартри - Фока (ХФ) /8, 9/ или по экспериментальным данным /10/. Константы a и b для ионов с $Z_N \leq 100$ изоэлект-

Таблица. Параметры a , b и c дипольных поляризуемостей многозарядных ионов (формула (1)) изоэлектронных рядов от H до Xe

Изоэлектронный ряд	Конфигурация внешней оболочки	Полное число электронов	a	b	c	Данные подбора
H	1s	I	9/2	0	4	/II/ ^{ж)}
He	1s ²	2	9	0,359	4	/8/ XФ
Li	2s	3	165	2,84	3	/7/ КП
Be	2s ²	4	255	2,16	3	/9/ XФ
B	2p	5	195	2,76	3	/8/ XФ
C	2p ²	6	146	3,49	3	"
N	2p ³	7	1817	2,60	4	"
O	2p ⁴	8	1613	3,20	4	"
F	2p ⁵	9	1201	4,26	4	"
Ne	2p ⁶	10	870	4,96	4	/10/ эксп.
Na	3s	11	951	9,16	3	/7/ КП
Mg	3s ²	12	1981	8,31	3	/9/ XФ
Ar	3p ⁶	18	$1,63 \cdot 10^4$	11,7	4	/5/ ТФД
Cr ⁺	3d ⁵	23	235	21,3	3	/5/ ТФД
Cu ⁺	3d ¹⁰	28	$6,6 \cdot 10^4$	18,8	4	/5/ ТФД
Cu	4s	29	3200	23,7	3	/7/ КП
Zn	4s ²	30	7713	22,8	3	/9/ XФ
Kr	4p ⁶	36	$2,26 \cdot 10^5$	23,4	4	/5/ ТФД
Xe	5p ⁶	54	$1,7 \cdot 10^6$	35,6	4	/5/ ТФД

^{ж)} Квантово-механическая теория.

ронных рядов от И до Хе приведены в таблице; в последней колонке указаны ссылки на работы, по данным которых подбирались константы а и b.



Р и с. 2. То же для изоэлектронной последовательности Ar. Обозначения те же, что на рис. 1, кроме (•), эксперимент /12/

На рис. 1, 2, в качестве иллюстрации, результаты расчета α по формуле (I) для изоэлектронных рядов Mg и Ar сравниваются с расчетами, выполненными различными методами, и экспериментальными данными. Видно, что задание поляризуемости в виде (I) описывает практически все значения изоэлектронного ряда, кроме нейтральных атомов.

Автор благодарен И. Л. Бейтману за полезные замечания.

Поступила в редакцию
26 января 1982 г.

Л и т е р а т у р а

1. B. Edlén, Handb. der Physik, 27, Springer-Verl., Berlin, 1964, p. 80.
2. R. R. Teachout, R. T. Pack, Atomic Data, 3, 195 (1971).
3. S. Fraga, K. M. S. Saxena, B. W. N. Lo, Atomic Data, 3, 323 (1971).
4. S. Fraga, J. Karwowski, K. M. S. Saxena, Handbook of Atomic Data, Amsterdam-Elsevier, 1976.
5. V. P. Shevelko, A. V. Vinogradov, Physica Scripta, 19, 275 (1979).
6. S. O. Kastner, M. L. Wolf, JOSA, 69, 1279 (1979).
7. L. Curtis, Physica Scripta, 21, 162 (1980).
8. R. P. Stewart, Adv. in Physics, 12, 299 (1963); Mol. Phys., 30, 787 (1975); *ibid.*, 30, 1283 (1975).
9. E. Markewicz, R. P. McEachran, A. D. Stauffer, J. Phys., B14, 949 (1981).
10. B. Edlén, Physica Scripta, 17, 565 (1978).
11. A. Dalgarno, Adv. in Physics, 11, 281 (1962).
12. P. Vogel, Nucl. Instr. Meth., 110, 241 (1973).
13. K. Fayans, G. Joose, Zs. Phys., 23, 1 (1924).