

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ПОТЕНЦИАЛОВ ИОНИЗАЦИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ ЭЛЕМЕНТОВ ОТ АРГОНА ДО КСЕНОНА

*Г. В. Шпатаковская**

*Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук
125047, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 17 марта 2022 г.,
после переработки 17 апреля 2022 г.
Принята к публикации 18 апреля 2022 г.

Проанализирована зависимость потенциалов ионизации от атомного номера Z и числа электронов N_e в многозарядных ионах элементов с атомными номерами в диапазоне $18 \leq Z \leq 54$. Обнаруженные закономерности с погрешностью менее одного процента описываются простыми полиномами на основе нескольких небольших таблиц полиномиальных коэффициентов, что позволяет с хорошей точностью оценивать потенциалы ионизации всех многозарядных ионов рассмотренного диапазона.

DOI: 10.31857/S0044451022080053
EDN: EGCBJW

1. ВВЕДЕНИЕ

Свойства многозарядных ионов (положительных ионов с кратностью ионизации $q > 5$), присутствующих в высокотемпературной плазме Солнца и других космических объектов, важны для рентгеновской астрономии и астрофизики. Они необходимы в кинетических моделях плазмы, для исследования взаимодействия ионов с веществом и т. д. На практике многозарядные ионы используют, например, в литографии, в ионном термоядерном синтезе, для ионной терапии раковых опухолей.

К числу важнейших характеристик ионов относятся их потенциалы (в вольтах) или совпадающие с ними численно энергии ионизации (в электронвольтах). Лишь для очень немногих многозарядных ионов эти величины измерены экспериментально, обычно спектроскопическими, очень точными методами. В большинстве же случаев их получают в полуэмпирических или теоретических моделях. Вся совокупность как экспериментальных, так и расчетных данных по энергиям ионизации атомов и атомных ионов в электронвольтах представлена в таблицах [1] для элементов с атомными номерами $Z \leq 110$ со ссылками на источники.

Теоретические расчеты электронных уровней энергии в атомах и ионах выполняются методами разной точности, сложности и трудоемкости.

Аналитический метод [2], основанный на модели эффективного заряда (effective charge model, ЕСМ), дает возможность в нулевом приближении вычислять полную энергию электронов атома как функцию эффективного заряда с погрешностью до 5–6%, а учет поправки второго порядка увеличивает точность до долей процента. Релятивистская версия метода ЕСМ применяется в работе [3] для расчета характеристик многоэлектронных атомов и ионов. Авторы предлагают использовать эту более точную модель, сравнимую по сложности с моделью Тома-са – Ферми – Дирака, вместо последней.

Вычисление полных электронных энергий связи во всех ионах в основном состоянии для элементов от лития до оганесона ($Z = 118$) методом самосогласованного поля Дирака – Фока (DF) [4] легло в основу расчета многих потенциалов ионизации, представленных в таблицах [1].

Более точным, но и более трудоемким является многоконфигурационный метод самосогласованного поля Дирака – Фока (MCDF) [5]. Его применение для подобных расчетов с учетом различных тонких эффектов (релятивизма, квантовой электродинамики, размера и формы ядра) обсуждается в обзоре [6], в котором сравниваются экспериментальные и теоретические результаты по рентгеновским тер-

* E-mail: shpagalya@yandex.ru

мам для внутренних оболочек нейтральных атомов от неона до фермия ($Z = 100$) включительно. Для большинства рассмотренных уровней и линий K - и L -оболочек продемонстрировано очень хорошее согласие теории и эксперимента. В работе [7] такой метод был использован для детального исследования характеристик иона стронция SrXXX . Однако распространение этого подхода на внешние электронные оболочки затрудняется необходимостью учета слишком большого количества возможных конфигураций.

Альтернативный методу самосогласованного поля и менее затратный метод функционала плотности использован в работе [8]. Рассчитанные этим методом орбитальные энергии в ионах Li-подобной изоэлектронной последовательности элементов от неона до фермия с учетом различных радиационных эффектов квантовой электродинамики также представлены в таблицах [1]. Однако применение метода функционала плотности в версии работы [9] к расчетам уровней энергии электронов в нейтральном атоме и первом ионе в основном состоянии для всех элементов от водорода до урана включительно [10] при сравнении [11] с результатами эксперимента демонстрирует его недостаточную точность.

В полужэмпирических моделях прослеживаются попытки выявить закономерности в зависимости потенциалов ионизации ионов от атомного номера в изоэлектронных последовательностях. Так, в работе [12] проанализирована разность между потенциалами ионизации, рассчитанными в модели MCDF и доступными в базе [1]. Построенные для этой разности аналитические зависимости от Z позволяют оценить недостающие и исправить имеющиеся данные для изоэлектронных последовательностей ионов с числом электронов от 3 до 18 в элементах от лития до олова ($Z = 50$).

В работе [13] аналитические выражения для потенциалов ионизации ионов в изоэлектронных последовательностях с числом электронов от 2 до 54, построенные как плавная интерполяция результатов для тяжелых ионов ($Z \gg 1$) и для области $Z = N_e - 1$, имеют вид полиномов по атомному номеру Z с квадратичным, линейным, нулевого и первого отрицательного порядков членами. Эти выражения также используются для обнаружения и исправления ненадежных данных из базы [1].

Совсем иной подход использовался в нашей работе [14]. Для анализа потенциалов ионизации в основном состоянии многозарядных ионов с числом электронов $N_e \leq 46$ в тяжелых элементах $55 \leq Z \leq 95$ применялся квазиклассический метод, подроб-

но описанный в работе [15]. Выявленные в результате закономерности в зависимости потенциалов ионизации I_{N_e} от атомного номера и числа электронов позволили с хорошей точностью аппроксимировать их с помощью простых полиномов на основе небольших таблиц полиномиальных коэффициентов. Это существенно упрощает практическое использование большого массива данных из [1].

В настоящей работе с аналогичной целью рассмотрены энергии ионизации многозарядных ионов элементов с атомными номерами $18 \leq Z \leq 54$ из базы данных [1]. В работе [14] мы опустили обсуждение небольшой модификации используемого нами квазиклассического метода [15]. Этот пробел будет ниже восполнен в разд. 2. В разд. 3 рассмотрены ионы с электронами в K - и L -оболочках, в разд. 4 и 5 — ионы с электронами в M - и N -оболочках. Таблицы полиномиальных коэффициентов приводятся в Приложении.

2. КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЙ МЕТОД АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОННЫХ ЭНЕРГИЙ СВЯЗИ

Кратко изложим основу квазиклассического метода [15] и его модификацию, используемую в работе.

Как известно, в квазиклассической модели Томаса – Ферми (TF) имеет место автомодельность по атомному номеру Z , т. е. для любого элемента все характеристики можно вычислить по решению для водорода ($Z = 1$) простым масштабным преобразованием. В частности, для энергетических величин это отвечает умножению на $Z^{4/3}$. Применение условия квантования Бора – Зоммерфельда к вычислению орбитальных энергий связи $E_{nl} = E_{n0}$ (n — главное квантовое число) s -состояний (орбитальное число $l = 0$) электронов в атоме в модели TF приводит к выделению зависимости от Z определенного вида (в атомных единицах):

$$E_{n0}^{TF} = Z^{4/3} e^{TF}(\sigma_n), \quad \sigma_n = \pi n Z^{-1/3}, \quad (1)$$

где $e^{TF}(\sigma)$ — универсальная функция, не зависящая ни от атомного номера элемента, ни от квантовых чисел, вычисляется по атомному потенциалу TF. Так как модель TF приближенно описывает многоэлектронные атомы с заполненными оболочками, возникает вопрос, насколько подобное выполняется в реальных атомах. Соответствующие функ-

ции были построены по орбитальным энергиям связи $E_{n0}^{exp}(Z)$ из таблиц [16]

$$e_n(\sigma_n) = E_{n0}^{exp}(Z)Z^{-4/3}. \quad (2)$$

Сравнение с результатами модели TF показало, что хотя не существует для всех квантовых чисел n универсальной функции, но для каждого значения n , т.е. в каждой из оболочек K, L, M, N, \dots при условии правильного порядка заполнения состояний имеется своя плавная монотонная зависимость $e_n(\sigma_n)$, которая может быть аппроксимирована по нескольким элементам простым полиномом. По этой аппроксимации возможно с погрешностью в пределах 1–2% восстановить соответствующие энергии связи для других элементов, что указывает на существование закона подобия по атомному номеру в энергиях связи электронов. Выпадение из этого закона может свидетельствовать или о нарушении в порядке заполнения состояний, или об ошибочности данных. Это позволяет, в частности, контролировать правильность экспериментальных измерений, как показано на примере оценок рентгеновских K - и L -термов в работе [17].

Таким образом, построение функций $e_n(\sigma_n)$ оказалось эффективным инструментом анализа как в целом энергий связи для всех естественных элементов периодической таблицы Менделеева [18], так и для отдельных групп атомов, в частности для исследования закономерностей в первых потенциалах ионизации лантанидов и актинидов [19]. При этом выяснилось, что если существует закономерность в зависимости $e_n(\sigma_n)$, то своя закономерность имеет место и для $e_n(\sigma_1)$, т.е. из аргумента можно убрать номер оболочки n и эффективно исследовать зависимость разных по n функций $e_n(\sigma)$ от одного аргумента, зависящего только от атомного номера. Такая модификация квазиклассического метода [15], была использована для анализа имеющихся данных по энергиям ионизации многозарядных ионов тяжелых элементов в работе [14]. Кроме того, выяснилось, что в случае правильного заполнения оболочек для потенциалов ионизации ионов нет явной зависимости от квантовых чисел n, l , а существенна лишь зависимость от числа электронов N_e . В отличие от тяжелых элементов все ионы средних атомов с зарядом $q > 5$ ($N_e < Z-5$) характеризуются правильным порядком заполнения оболочек, поэтому, как показано ниже, в этом случае оказалось возможным использовать описанный метод оценки практически для всех многозарядных ионов.

3. ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ ИЗ СОСТОЯНИЙ K - И L -ОБОЛОЧЕК

Будем исследовать зависимость энергий ионизации от Z в изоэлектронных последовательностях, в которых ионы сгруппированы по их подобию нейтральным атомам с тем же числом электронов N_e . Энергии ионизации ионов $I_{N_e}(Z)$ в таблицах [1] даются в электронвольтах. Поэтому в формулу (2) следует подставлять табличное значение, деленное на энергию Хартри $E_H = 27.211386$ эВ.

В этом разделе рассматриваются последовательности ионов с $N_e = 1-10$, что соответствует ионам с электронами в оболочках K и L : водородо- и гелиепоподобные ионы соответственно с $N_e = 1$ и $N_e = 2$, литиеподобные с $N_e = 3, \dots$, неоподобные с $N_e = 10$.

На рис. 1а по оси абсцисс отложена величина σ , а по оси ординат десятичный логарифм соответствующего значения e_{N_e} , вычисленные для шести разных элементов выбранного диапазона (символы). Рисунок демонстрирует очень гладкие монотонные зависимости, которые хорошо аппроксимируются квадратичными полиномами (линии):

$$\lg e_{N_e}(\sigma) = \sum_{i=0}^{i_{max}} a_i^{(N_e)} \sigma^i, \quad \sigma = \pi Z^{-1/3}, \quad i_{max} = 2. \quad (3)$$

Применение выражения (3) к оценке потенциалов ионизации ионов данного диапазона N_e для других элементов по формуле, обратной (2),

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

подтвердило 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 $N_e = Z - q$. Поэтому более удобным оказывается другое представление функции $e_{N_e}(\sigma)$. Его можно получить, аппроксимируя полиномами кусочно-монотонные зависимости коэффициентов a_i от числа электронов N_e :

$$a_i^{(N_e)} = \sum_{k=0}^{k_{max}} b_{ik} N_e^k. \quad (5)$$

Эти зависимости для рассматриваемого диапазона ионов изображены на рис. 1б. На первый взгляд, здесь можно увидеть три диапазона монотонных зависимостей: $N_e = 1-2$; $N_e = 3-6$; $N_e = 7-10$ с

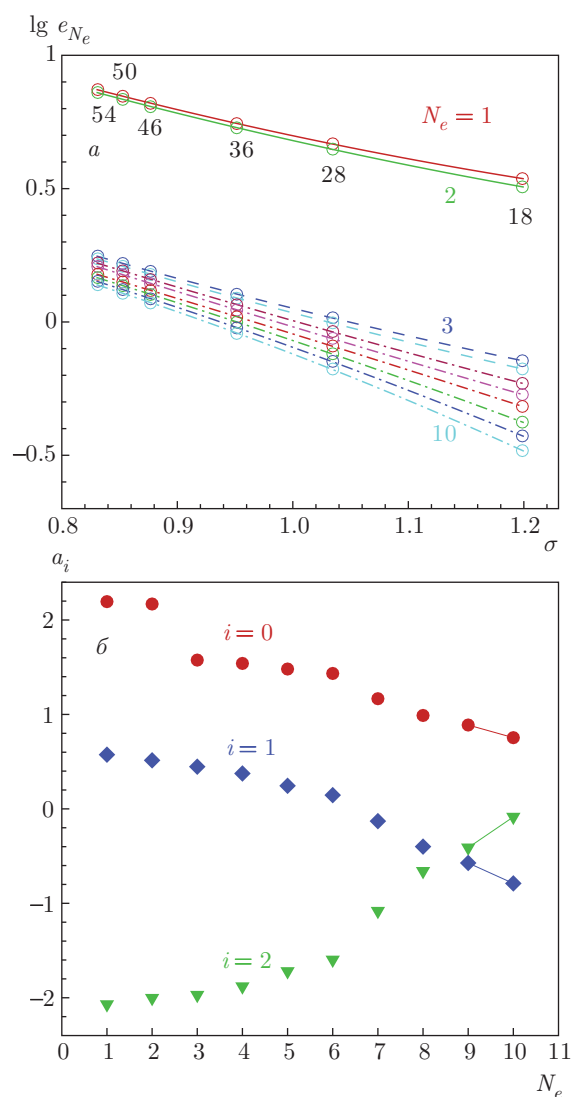


Рис. 1. (В цвете онлайн) Ионизация состояний из K - и L -оболочек. *а*) Зависимости $e_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 18, 28, 36, 46, 50, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — квадратичные интерполяции. Разные цвета и типы линий соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e , увеличивающимся последовательно сверху вниз от 1 до 10. Здесь и на рис. 2 a – $5a$ числа над и под символами отмечают атомный номер элемента; числа около линий указывают начало и конец заполнения электронами соответствующих оболочек. *б*) Зависимости коэффициентов квадратичной интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из K - и L -оболочек. Линии — линейные интерполяции монотонных фрагментов

линейной зависимостью в первом и квадратичной во втором и третьем диапазонах. Однако, поскольку зависимость в (4) логарифмическая, для полиномиальной интерполяции требуется достаточная точность, которой не хватает при таком рассмотрении. Оптимальным оказалось разбиение всей области на пять частей ($N_e = 1-2, N_e = 3-4, \dots, N_e = 9-10$) и попарная линейная интерполяция (5) значений $a_i(N_e)$. Очевидно, что при этом сохраняются неизменными значения коэффициентов a_i . Выражение для $\lg e_{N_e}(\sigma)$ тогда приобретает следующий вид:

$$\lg e_{N_e}(\sigma) = \sum_{i=0}^{i_{max}} \sum_{k=0}^{k_{max}} b_{ik} N_e^k \sigma^i, \quad (6)$$

$$i_{max} = 2, \quad k_{max} = 1,$$

а соответствующие полиномиальные коэффициенты b_{ik} для этих пяти диапазонов представлены в табл. 1 (см. Приложение). Таким образом, для оценки энергии ионизации многозарядного иона в рассмотренном диапазоне следует использовать формулы (4), (6) и табл. 1.

В качестве примера вычислим энергии ионизации нескольких ионов других элементов из рассмотренного в этом разделе диапазона. Для ионов кальция ($Z = 20$) с числом электронов $N_e = 5$ и $N_e = 6$ получаем для энергий ионизации I_{N_e} [эВ] соответственно 969.86 (973.7) и 889.8 (894.0). Здесь в скобках для сравнения приводятся табличные значения энергий ионизации из [1]. В таком же формате (с указанием неопределенности табличных значений) для энергий ионизации ионов цинка ($Z = 30$) с $N_e = 7, 8$ имеем 2211.1 (2214 ± 8), 2081.2 (2085 ± 5). Для ионов кадмия ($Z = 48$) с $N_e = 9, 10$ получаем 6048.3 (6039 ± 9), 5849.8 (5839 ± 3). Как видно, погрешность не превышает долей процента. Более широкое сравнение подтверждает такую точность обнаруженных закономерностей.

4. ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ ИЗ СОСТОЯНИЙ М-ОБОЛОЧКИ

Аналогичный анализ проведен для потенциалов ионизации ионов нескольких элементов из оболочки M . Соответствующие результаты представлены символами на рис. 2*а* для подоболочек $3s$ и $3p$, на рис. 2*а* для $3d$ -подоболочки. Линии на этих рисунках — это кубические аппроксимации по σ согласно выражению (3) с $i_{max} = 3$. Сравнение с табличными значениями для многих других элементов показывает, что эти аппроксимации имеют точность в доли процента.

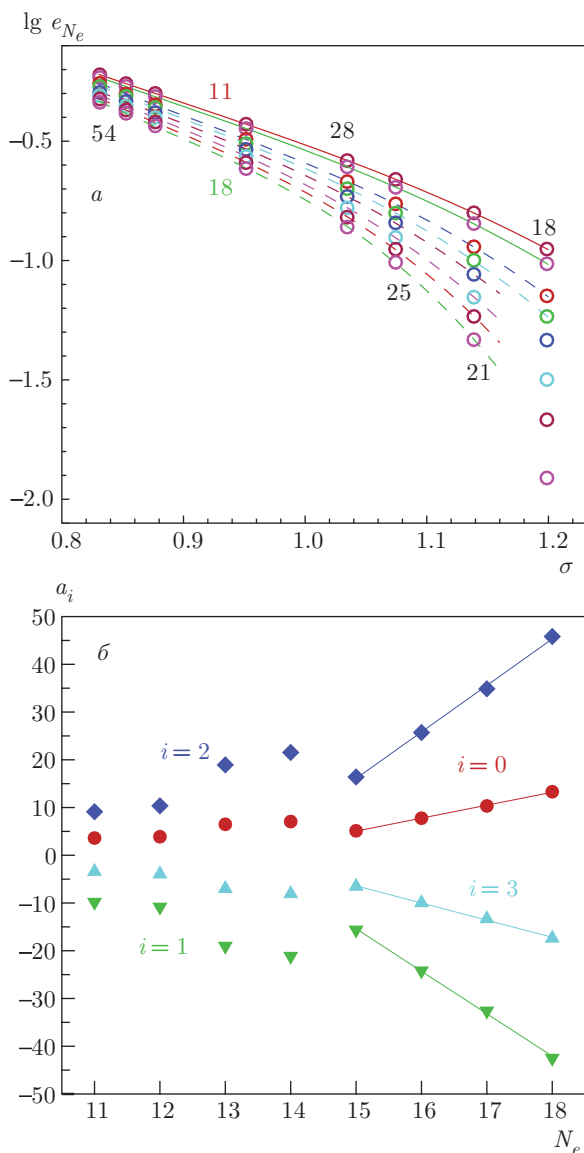


Рис. 2. (В цвете онлайн) Ионизация из s - и p -состояний M -оболочки. *a*) Зависимости $e_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 18, 21, 25, 28, 36, 46, 50, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — кубические интерполяции. Разные цвета и типы линий соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e от 11 до 18. *б*) Зависимости коэффициентов кубической интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из M -оболочки. Линии — квадратичные интерполяции монотонных фрагментов

Но, как уже было сказано выше, более востребованы на практике не зависимости от Z в изоэлектронных последовательностях, а потенциалы ионизации ионов с разным числом электронов N_e определенного элемента с фиксированным Z . Поэтому для

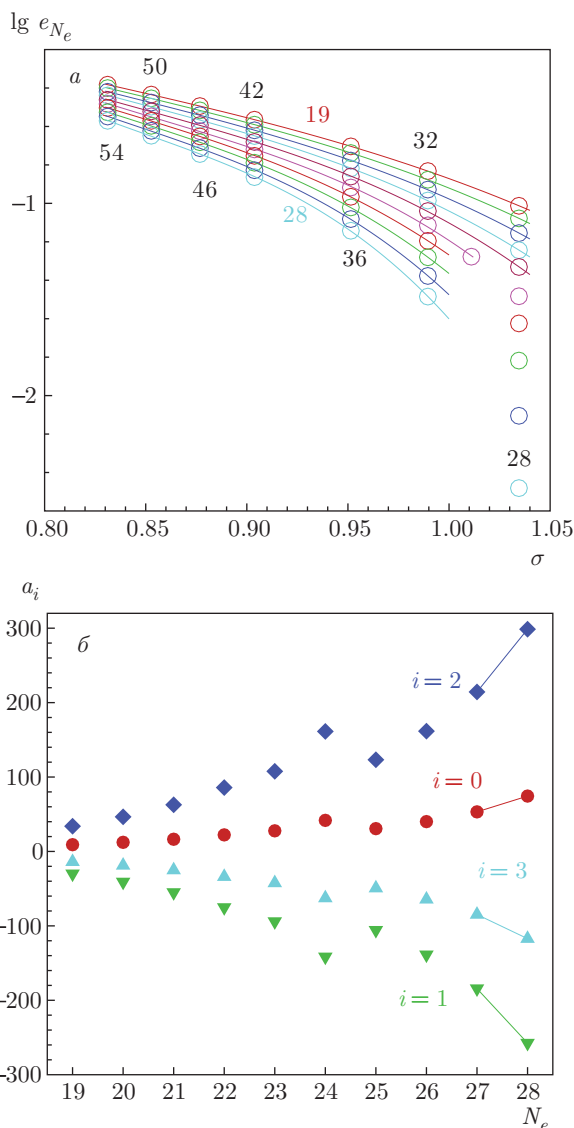


Рис. 3. (В цвете онлайн) Ионизация из d -состояний M -оболочки. *a*) Зависимости $e_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 28, 32, 36, 42, 46, 50, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — кубические интерполяции. Разные цвета линий и символов соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e от 19 до 28. *б*) Зависимости коэффициентов кубической интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из M -оболочки. Линии — линейные интерполяции монотонных фрагментов

M -оболочки также была исследована зависимость коэффициентов a_i ($i = 0, 1, 2, 3$) от числа электронов N_e . Результаты этого исследования представлены на рис. 2б и 3б.

На рис. 2б можно выделить три диапазона монотонного поведения $a_i(N_e)$ ($i = 0, 1, 2, 3$), причем все

с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$): $N_e = 11-12$, $N_e = 13-14$ и $N_e = 15-18$. На рис. 3б таких диапазонов оказывается четыре: $N_e = 19-21$ с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$), $N_e = 22-24$ с квадратичной зависимостью ($k_{max} = 2$) и $N_e = 25-26$, $N_e = 27-28$ с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$). Соответствующие коэффициенты b_{ik} помещены в табл. 2 и 3 в Приложении.

Вопрос о неоднозначности использованного разбиения и степени интерполяционного полинома связан с оптимизацией точности получаемых выражений и числа констант, которые его обеспечивают. Хотя разбиение на пары с линейной интерполяцией (в общей сложности 9 диапазонов, 18 констант) и в данном случае позволило бы сохранить неизменными коэффициенты a_i , наше разбиение при сохранении точности в пределах процента уменьшает число используемых констант до 15. Этот принцип оптимизации сохраняется и ниже в разд. 5.

Проиллюстрируем точность предложенной аппроксимации несколькими примерами. Вычислим энергии ионизации I_{N_e} из оболочки M для некоторых ионов, используя формулы (6), (4) с коэффициентами b_{ik} из соответствующих частей табл. 2 и 3. Ниже в скобках даны для сравнения соответствующие табличные значения из базы [1] с указанием их неопределенности.

Для энергий ионизации ионов мышьяка ($Z = 33$) с $N_e = 15-18$ приведем результаты аналитических оценок в сравнении с табличными данными:

$$728.62 (728.9 \pm 2.2), 679.61 (672.9 \pm 0.9),$$

$$633.89 (628.8 \pm 0.6), 591.24 (587.6 \pm 1.9).$$

Для ионов стронция ($Z = 38$) с $N_e = 19-21$:

$$776.82 (774 \pm 4), 720.49 (722 \pm 3), 668.24 (665 \pm 3).$$

Для ионов иода ($Z = 53$) с $N_e = 27-28$:

$$1471.4 (1472 \pm 4), 1395.3 (1397 \pm 4).$$

Оценки не выходят за пределы точности табличных данных. Это подтверждается и для других ионов рассматриваемого диапазона.

5. ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ ИЗ СОСТОЯНИЙ N-ОБОЛОЧКИ

Результаты подобного анализа для потенциалов ионизации ионов нескольких элементов из оболочки N представлены символами на рис. 4а для подоболочек $4s$ и $4p$, на рис. 5а — для d -подоболочки. Линии на рисунках — это квадратичные аппроксимации по

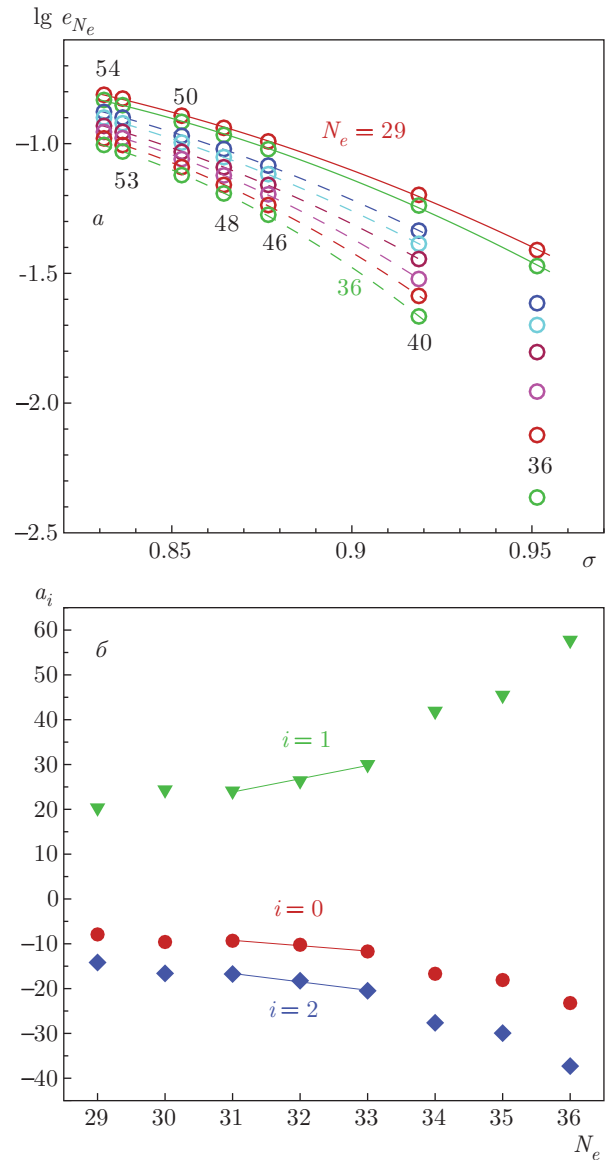


Рис. 4. (В цвете онлайн) Ионизация из s - и p -состояний N -оболочки. а) Зависимости $e_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 36, 40, 46, 48, 50, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — квадратичные интерполяции. Разные цвета и типы линий соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e от 29 до 36. б) Зависимости коэффициентов квадратичной интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из N -оболочки. Линии — линейные интерполяции монотонных фрагментов

σ согласно выражению (3). Оценки по этим аппроксимациям с точностью до процента согласуются с табличными значениями и для других элементов в рассматриваемом диапазоне зарядов ионов.

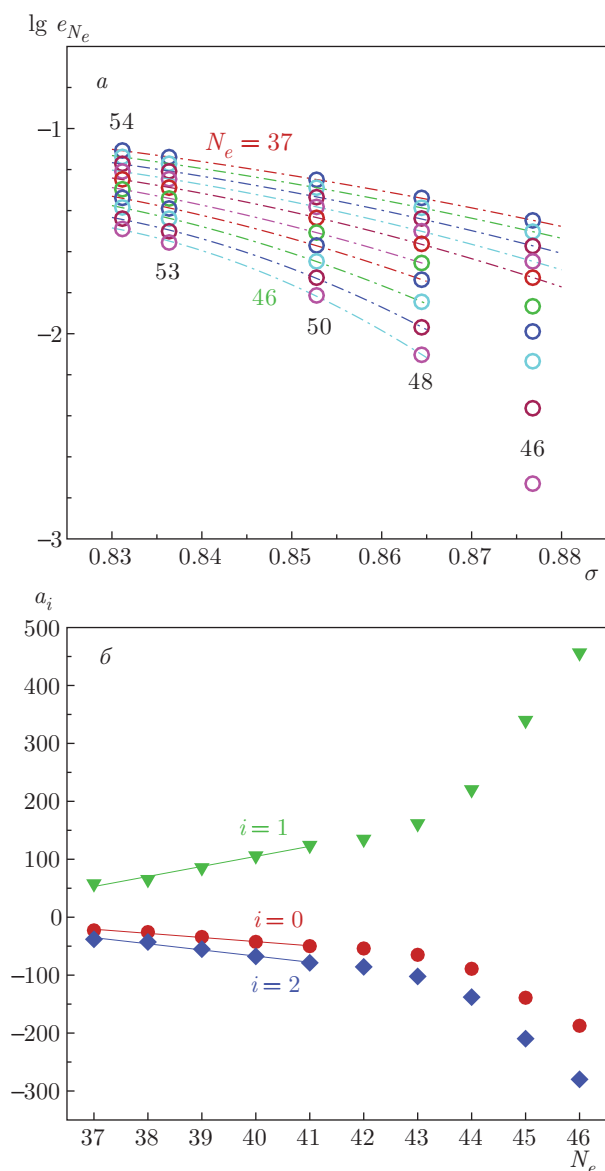


Рис. 5. (В цвете онлайн) Ионизация из d -состояний N -оболочки. *а*) Зависимости $e_{N_e}(\sigma)$, вычисленные по формуле (2) для ионов элементов с атомными номерами $Z = 40, 46, 48, 50, 53, 54$ по данным из [1] (символы). Линии — квадратичные интерполяции. Разные цвета линий и символов соответствуют разным значениям числа электронов в ионе N_e от 37 до 46. Числа рядом с линиями указывают начало и конец заполнения электронами d -подоболочки. *б*) Зависимости коэффициентов квадратичной интерполяции a_i (разные символы и цвета) в формуле (3) от числа электронов в ионе для ионизации из N -оболочки. Линии — линейные интерполяции монотонных фрагментов

Применение в данном случае выражения (5) для полиномиальных коэффициентов a_i ($i = 0, 1, 2$) основано на виде кусочно-монотонных зависимостей, представленных на рис. 4б и 5б. На рис. 4б можно выделить три диапазона монотонного поведения

$a_i(N_e)$ ($i = 0, 1, 2$): $N_e = 29-30$, $N_e = 31-33$ с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$) и $N_e = 34-36$ с квадратичной ($k_{max} = 2$). На рис. 5б также три диапазона: $N_e = 37-41$ и $N_e = 42-44$ с квадратичной зависимостью ($k_{max} = 2$) и $N_e = 45-46$ с линейной зависимостью ($k_{max} = 1$). Соответствующие коэффициенты b_{ik} помещены в табл. 3-5 в Приложении.

Ниже приводится несколько примеров точности получаемых описанным образом оценок энергий ионизации I_{N_e} из оболочки N . Используются формулы (6), (4) с коэффициентами b_{ik} из соответствующих частей табл. 3-5.

Для энергий ионизации ионов палладия ($Z = 46$) с $N_e = 29, 30$:

$$459.16 (457.5), 429.57 (427 \pm 3).$$

Для ионов кадмия ($Z = 48$) с $N_e = 37-41$:

$$217.65 (218.0 \pm 2.5), 194.86 (195.0 \pm 2.4), \\ 172.23 (173.0 \pm 2.2), 150.28 (150.0 \pm 2.2), \\ 129.47 (130.1 \pm 2.1).$$

Для ионов олова ($Z = 50$) с $N_e = 42-44$:

$$155.93 (156.0 \pm 2.2), 134.55 (135.0 \pm 2.1), \\ 112.57 (112.9 \pm 2.0).$$

Для ионов иода ($Z = 53$) с $N_e = 45-46$:

$$173.40 (171.0 \pm 2.2), 153.24 (150.81).$$

Эти оценки и сравнение для других ионов показывают практическое совпадение с табличными данными.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в базе данных [1] энергии ионизации многозарядных положительных ионов рассмотрены для некоторых элементов в диапазоне $18 \leq Z \leq 54$ с помощью модифицированного квазиклассического метода [15] выделения зависимости от атомного номера Z . Анализ рассмотренных данных выявляет автомодельные зависимости энергий ионизации от атомного номера Z и числа электронов N_e во всем этом диапазоне.

Использование обнаруженных закономерностей позволяет на основе нескольких небольших таблиц с хорошей точностью оценивать потенциалы ионизации более тысячи ионов. Предложенные аналитические оценки могут быть полезны, например, при расчете состава плазмы в химической модели, при моделировании современных энергетических проектов лазерного и ионного термоядерного синтеза, в расчетах сечения ионизации ионами нейтральных атомов [20].

ПРИЛОЖЕНИЕ

Таблица 1. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для $N_e = 1-10$

N_e	1, 2		3, 4		5, 6	
$i \setminus k$	0	1	0	1	0	1
0	$2.219698 \cdot 10^0$	$-2.516389 \cdot 10^{-2}$	$1.681960 \cdot 10^0$	$-3.548086 \cdot 10^{-2}$	$1.714986 \cdot 10^0$	$-4.683745 \cdot 10^{-2}$
1	$-2.137021 \cdot 10^0$	$6.685233 \cdot 10^{-2}$	$-2.242038 \cdot 10^0$	$9.035552 \cdot 10^{-2}$	$-2.330886 \cdot 10^0$	$1.221714 \cdot 10^{-1}$
2	$6.339124 \cdot 10^{-1}$	$-5.987269 \cdot 10^{-2}$	$6.631457 \cdot 10^{-1}$	$-7.211843 \cdot 10^{-2}$	$7.368896 \cdot 10^{-1}$	$-9.852621 \cdot 10^{-2}$

N_e	7, 8		9, 10	
$i \setminus k$	0	1	0	1
0	$2.408410 \cdot 10^0$	$-1.773920 \cdot 10^{-1}$	$2.094341 \cdot 10^0$	$-1.340246 \cdot 10^{-1}$
1	$-4.036461 \cdot 10^0$	$4.221302 \cdot 10^{-1}$	$-3.338934 \cdot 10^0$	$3.253769 \cdot 10^{-1}$
2	$1.758030 \cdot 10^0$	$-2.697029 \cdot 10^{-1}$	$1.375225 \cdot 10^0$	$-2.164399 \cdot 10^{-1}$

Таблица 2. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для $N_e = 11-18$

N_e	11, 12		13, 14		15-18	
$i \setminus k$	0	1	0	1	0	1
0	$6.226699 \cdot 10^{-1}$	$2.716942 \cdot 10^{-1}$	$-9.260511 \cdot 10^{-1}$	$5.701232 \cdot 10^{-1}$	$-3.565692 \cdot 10^1$	$2.714508 \cdot 10^0$
1	$1.238404 \cdot 10^0$	$-1.006319 \cdot 10^0$	$8.525734 \cdot 10^0$	$-2.119051 \cdot 10^0$	$1.180769 \cdot 10^2$	$-8.897742 \cdot 10^{-1}$
2	$-4.496634 \cdot 10^0$	$1.237557 \cdot 10^0$	$-1.492080 \cdot 10^1$	$2.604040 \cdot 10^0$	$-1.300551 \cdot 10^2$	$9.742572 \cdot 10^0$
3	$2.369403 \cdot 10^0$	$-5.256131 \cdot 10^{-1}$	$7.030483 \cdot 10^0$	$-1.078257 \cdot 10^0$	$4.749643 \cdot 10^1$	$-3.593123 \cdot 10^0$

Таблица 3. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для диапазонов $N_e = 19-30$

N_e	19-21		22-24		
$i \setminus k$	0	1	0	1	2
0	$-6.039691 \cdot 10^1$	$3.649011 \cdot 10^0$	$2.067309 \cdot 10^3$	$-1.871043 \cdot 10^2$	$4.279428 \cdot 10^0$
1	$2.087465 \cdot 10^2$	$-1.253750 \cdot 10^1$	$-6.878930 \cdot 10^3$	$6.231700 \cdot 10^2$	$-1.426867 \cdot 10^1$
2	$-2.403794 \cdot 10^2$	$1.440452 \cdot 10^1$	$7.646937 \cdot 10^3$	$-6.933075 \cdot 10^2$	$1.589188 \cdot 10^1$
3	$9.216474 \cdot 10^1$	$-5.568930 \cdot 10^0$	$-2.842266 \cdot 10^3$	$2.578267 \cdot 10^2$	$-5.917017 \cdot 10^0$

N_e	25, 26		27, 28		29, 30	
$i \setminus k$	0	1	0	1	0	1
0	$-2.052357 \cdot 10^2$	$9.435333 \cdot 10^0$	$-5.190515 \cdot 10^2$	$2.119500 \cdot 10^1$	$4.089713 \cdot 10^1$	$-1.683137 \cdot 10^0$
1	$7.183185 \cdot 10^2$	$-3.296577 \cdot 10^1$	$1.791625 \cdot 10^3$	$-7.318269 \cdot 10^1$	$-9.61996 \cdot 10^1$	$4.018158 \cdot 10^0$
2	$-8.383867 \cdot 10^0$	$3.846336 \cdot 10^1$	$-2.061403 \cdot 10^3$	$8.428752 \cdot 10^1$	$5.632294 \cdot 10^0$	$-2.431015 \cdot 10^0$
3	$3.264476 \cdot 10^2$	$-1.502941 \cdot 10^1$	$7.907471 \cdot 10^2$	$-3.242548 \cdot 10^1$	0.0	0.0

Таблица 4. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для диапазонов $N_e = 31-36$

N_e	31-33		34-36		
$i \setminus k$	0	1	0	1	2
0	$2.774201 \cdot 10^1$	$-1.192549 \cdot 10^0$	$-2.198638 \cdot 10^3$	$1.278731 \cdot 10^2$	$-1.873475 \cdot 10^0$
1	$-6.782808 \cdot 10^1$	$2.957758 \cdot 10^0$	$5.105813 \cdot 10^3$	$-2.970817 \cdot 10^2$	$4.357147 \cdot 10^0$
2	$4.138968 \cdot 10^1$	$-1.871369 \cdot 10^0$	$-2.961334 \cdot 10^3$	$1.723388 \cdot 10^2$	$-2.530984 \cdot 10^0$

Таблица 5. Полиномиальные коэффициенты b_{ik} в формуле (6) для диапазона $N_e = 37-46$

N_e	37-41			42-44		
$i \setminus k$	0	1	2	0	1	2
0	$-7.129920 \cdot 10^2$	$4.196148 \cdot 10^1$	$-6.293558 \cdot 10^{-1}$	$-1.152739 \cdot 10^4$	$5.506973 \cdot 10^2$	$-6.607618 \cdot 10^0$
1	$1.726244 \cdot 10^3$	$-1.015340 \cdot 10^2$	$1.524121 \cdot 10^0$	$2.778065 \cdot 10^4$	$-1.327385 \cdot 10^3$	$1.593204 \cdot 10^1$
2	$-1.047455 \cdot 10^3$	$6.151746 \cdot 10^1$	$-9.246349 \cdot 10^{-1}$	$-1.674060 \cdot 10^4$	$7.999854 \cdot 10^2$	$-9.605740 \cdot 10^0$
		N_e	45, 46			
		$i \setminus k$	0	1		
		0	$2.040283 \cdot 10^3$	$-4.842836 \cdot 10^1$		
		1	$-4.905320 \cdot 10^3$	$1.165572 \cdot 10^2$		
		2	$2.949618 \cdot 10^3$	$-7.020622 \cdot 10^1$		

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team (2020), *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.8), <https://physics.nist.gov/asd> [2022, Febr. 20], National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>
2. O. D. Skoromnik, I. D. Feranchuk, A. U. Leonau, and C. H. Keitel, *J. Phys. B* **50**, 245007 (2017).
3. K. D. Dzikowski, O. D. Skoromnik, I. D. Feranchuk, N. S. Oreshkina, and C. H. Keitel, *J. Phys. B* **54**, 115002 (2021).
4. G. C. Rodrigues, P. Indelicato, J. P. Santos, P. Patte, and F. Parente, *At. Data Nucl. Data Tables* **86**, 117 (2004).
5. J. P. Desclaux, *Comput. Phys. Comm.* **9**, 31 (1975).
6. R. D. Deslattes, E. G. Kessler Jr, P. Indelicato, L. de Billy, E. Lindroth, and J. Anton, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 35 (2003).
7. A. Goyal, I. Khatri, S. Aggarwal, A. K. Singh, and ManMohan, *JQSRT* **161**, 157 (2015).
8. J. Sapirstein and K. T. Cheng, *Phys. Rev. A* **83**, 012504 (2011).
9. S. Kotochigova, Z. H. Levine, E. L. Shirley, M. D. Stiles, and C. W. Clark, *Phys. Rev. A* **55**, 191 (1997).
10. *Atomic Reference Data for Electronic Structure Calculation, Atomic Total Energies and Eigenvalues*. URL: <http://www.nist.gov/pml/data/dftdata/index.cfm>
11. Г. В. Шпатаковская, *ЖЭТФ* **158**, 430 (2020) [*JETP* **131**, 385 (2020)].
12. E. Biémont, Y. Frémat, and P. Quinet, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **71**, 117 (1999).
13. G. Gil and A. Gonzalez, *Can. J. Phys.* **95**, 479 (2017).
14. Г. В. Шпатаковская, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 798 (2021) [*JETP Lett.* **114**, 737 (2021)].
15. Г. В. Шпатаковская, *УФН* **189**, 195 (2019) [*Phys. Usp.* **62**, 186 (2019)].

16. NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database; <https://srdata.nist.gov/xps/selectEnergyType.aspx> [2022, Febr. 20].
17. Г. В. Шпатаковская, Письма в ЖЭТФ **108**, 781 (2018) [JETP Lett. **108**, 768 (2018)].
18. G. V. Shpatakovskaya, in *Book of Abstracts XXXVI Internat. Conf. on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter*, ELBRUS (2021), p. 135. http://www.ihep.ras.ru/elbrus21/abstracts/ELBRUS2021_book_of_abstracts.pdf
19. Г. В. Шпатаковская, Письма в ЖЭТФ **111**, 526 (2020) [JETP Lett. **111**, 463 (2020)].
20. I. Yu. Tolstikhina, I. I. Tupitsyn, S. N. Andreev, and V. P. Shevelko, ЖЭТФ **146**, 5 (2014).