

ПОТЕНЦИАЛЫ ИОНИЗАЦИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ ЭЛЕМЕНТОВ ГРУППЫ ПАЛЛАДИЯ

Шпатаковская Г.В.

ИПМ РАН, Москва, Россия

shpaga1ya@yandex.ru

Рассмотрены имеющиеся данные [1] по ионизационным потенциалам (энергиям) $I_{N_e}(Z)$ (эВ) ионов с числом электронов $N_e \leq 36$ трех элементов из группы палладия с атомными номерами $Z = 39, 42, 46$. Во всех ионах рассматриваемого диапазона соблюдается правильный порядок заполнения электронных состояний. Для анализа энергий ионизации используется квазиклассический метод [2] выделения зависимости от атомного номера с помощью функции $e_{N_e}(\sigma)$:

$$e_{N_e} = (I_{N_e}(Z)/E_h) Z^{-4/3}, \quad \sigma = \pi Z^{-1/3}. \quad (1)$$

Здесь $E_h = 27.211\,386$ эВ – энергия Хартри.

Показано, что данные для этих трех элементов хорошо аппроксимируются линейными (для $N_e \leq 18$) и квадратичными (для $19 \leq N_e \leq 36$) полиномами:

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

Эта аппроксимация дает возможность восстановить с хорошей точностью ионизационные потенциалы и остальных элементов группы палладия по формуле:

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

Однако на практике требуются потенциалы ионизации ионов одного элемента в зависимости от числа электронов в них. Анализ зависимости коэффициентов a_i от числа электронов N_e выявляет их кусочно-монотонное поведение. Полиномиальная интерполяция монотонных фрагментов вида:

$$a_i^{(N_e)} = \sum_{k=0}^{k_{max}} b_{ik} N_e^k, \quad \lg e_{N_e}(\sigma) = \sum_{i=0}^{i_{max}} \sum_{k=0}^{k_{max}} b_{ik} N_e^k \sigma^i, \quad k_{max} = 1, 2 \quad (4)$$

позволяет аналитическое описание энергий ионизации 288 ионов группы палладия с погрешностью порядка и менее одного процента на основе небольших таблиц коэффициентов b_{ik} .

1. Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J., and NIST ASD Team (2020) // NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.8), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2021, November 17]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>
2. Shpatakovskaya, G. V. // Phys. Usp. 2019 V. 62. P. 186.