Потенциалы ионизации многозарядных ионов элементов группы железа [[1]](#footnote-1)\*)

Шпатаковская Г.В.

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия, shpagalya@yandex.ru

Проанализированы имеющиеся данные [1] по потенциалам (энергиям) ионизации (эВ) многозарядных ионов с числом электронов  для элементов группы железа с атом­ными номерами *Z* = 21, 25, 28. Анализ основан на квазиклассическом методе [2] выделе­ния зависимости орбитальных энергий связи от атомного номера с помощью функ­ции:

  (1)

На Рис.1 в полулогариф­мичес­ком масштабе символами изображены эти данные, а линии соответствуют линейной аппро­кси­­ма­ции для *K* и *L* оболочек () и квадратичной аппро­кси­­ма­ции для *M* оболочки (): . Таким образом оказывается возможно восстановить потенциалы ионизации остальных элементов группы железа по формуле . Однако на практике более востребована информация о по­тен­циалах ионизации ионов одного элемента в зависимости от числа электронов *Ne* в нем. Рис.2 демонстрирует зависимость коэффициентов от *Ne* в *M* оболочке. Аппроксимация монотонных фрагментов , и подобных зависимо­стей для *K* и *L* оболочек позволяет аналитическое описание энергий ионизаций 144 ионов с по­грешностью порядка одного процента на основе небольшой таблицы коэффициентов .

|  |  |
| --- | --- |
| Fig1 | Fig2 |
| Рис.1 | Рис.2 |

Литература

1. Kramida, A., Ralchenko, Yu., Reader, J., and NIST ASD Team (2021). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.9), [Online]. Available: https://physics.nist.gov/asd [2021, November 6].
2. Г.В. Шпатаковская УФН **189** 195 (2019)
1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLIX/Lt/en/EB-Shpatakovskaya_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)