



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Институт физики высоких энергий имени А.А. Логунова
Национального исследовательского центра
«Курчатовский институт»

Препринт 2023-3

С. Н. Соколов

**Релятивистская механическая
модель для одноэлектронных ионов**

Протвино 2023

Аннотация

Соколов С.Н.¹ Релятивистская механическая модель для одноэлектронных ионов: Препринт НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ 2023-3. – Протвино, 2023. – 13 с., 2 рис., 2 табл., библиогр.: 11.

Для расчетов энергий связанных состояний систем из двух взаимодействующих частиц предложена простая релятивистская механическая (РеМ) модель, эквивалентная при низких скоростях модели Бора. Модель содержит условие квантования, соблюдает закон сохранения массы, и в простейшем бесспиновом варианте (не учитывая магнитные взаимодействия) имеет относительную точность примерно $3 \cdot 10^{-5}$. При $Z > 3$, ее предсказания ионизационных энергий одноэлектронных ионов почти совпадают со значениями главного (Кулоновского) члена для этих энергий, вычисленного Джонсоном и Соффом в [2] с использованием уравнений Дирака.

К работе приложены таблицы вычисленных энергий и Боровских радиусов для основного и первого возбужденного состояний для $Z < 119$.

Abstract

Sokolov S.N. Relativistic Mechanical Model for One-Electron Ions: Preprint NRC «Kurchatov Institute» – IHEP 2023-3. – Protvino, 2023. – p. 13, figs. 2, tables 2, refs.: 11.

For the calculation of the energies of the bound and excited states of systems of two spinless interacting particles, a simple Relativistic Mechanical (ReM) model, equivalent at low velocities to the Bohr model [1], is proposed. The model includes the quantization condition for the total angular momentum and respects the mass conservation law. ReM model in its simplest spinless version does not take into account the magnetic interactions and QED corrections, what limits its relative accuracy to about $3 \cdot 10^{-5}$. At $Z > 3$, its predictions for the ionization energies of one-electron ions in the ground state are close to the values for the main ("Coulomb") term in the expressions for the ionization energy, calculated by Johnson and Soff [2] with the use of the Dirac equations.

The tables for the predicted energies and the Bohr radii in the ground and the first excited state for $Z < 119$ are appended.

¹ E-mail address: skiff.sokolov@gmail.com

1. Введение

Большинство вычислений ионизационных энергий (напр. [2,9]) использует сведение 2-частичной задачи к случаю одной частицы и использует "релятивистские поправки". В качестве альтернативы этому способу, эта работа предлагает очень простую релятивистскую механическую (РeM) модель с двумя Кулоновски взаимодействующими частицами, способную с умеренной точностью предсказать ионизационные энергии водородо-подобных ионов с любым зарядом Z .

Модель РeM подражает модели Бора [1] и при малых скоростях становится ей эквивалентна, но является более примитивной и формальной. Она не содержит параметра эволюции и определяет только условия на мгновенные значения механических параметров, достаточные для образования квантовых связанных состояний. Эти условия формализуются в виде системы алгебраических уравнений, решения которых дают ионизационные энергии одноэлектронных ионов в основном и возбужденных состояниях. Так как РeM модель в ее простейшей базовой версии не учитывает магнитные взаимодействия и квантово-полевые поправки [3,4], то ее относительная точность составляет примерно $3 \cdot 10^{-5}$.

Система уравнений РeM модели использует условие квантования полного вращательного импульса системы двух частиц и включает уравнение сохранения полной энергии, определяющее потери массы частиц в процессе их сближения как из-за расхода энергии как на излучение, так и на накопление кинетической энергии.

2. Определение РeM модели

В РeM модели рассматривается мгновенное состояние системы из двух частиц, притягиваемых друг к другу Кулоновскими силами (с константой взаимодействия $a\sigma\hbar$) и вращающейся вокруг центра масс системы с угловой скоростью ν . Модель подразумевает, что (абсолютные) скорости и радиусы связаны соотношениями $c\beta_i =$

νr_i , $r = r_1 + r_2$, и использует релятивистские массы вида

$$M_i = m_i \gamma_i, \quad \gamma_i = 1/\sqrt{1 - \beta_i^2}.$$

Модель не содержит подгоночных параметров и определяется системой 4х уравнений

баланс сил $qM_1c\beta_1\nu = \alpha c\hbar Z/r^2$ (1)

баланс сил $qM_2c\beta_2\nu = \alpha c\hbar Z/r^2$ (2)

квантовое условие $q(M_1\beta_1r_1 + M_2\beta_2r_2)c = n\hbar$ (3)

сохранение массы $m_1 + m_2 = q(m_1 + m_2) + \alpha\hbar Z/(rc)$ (4)

с 4мя неизвестными (зависящими от состояния n): β_1, β_2, ν и коэф. потери массы q .

Это определение не содержит запаздывания взаимодействий.

РеM модель не претендует на описание самих связанных состояний (состояния могут быть сложными и включать дополнительные элементы), она только задает достаточные условия для перехода системы в связанное состояние.

3. Решение уравнений РеM модели

Система уравнений для скоростей, следующая из (1)-(3),

$$\beta_1 + \beta_2 = \alpha Z/n, \quad M_1\beta_1 = M_2\beta_2$$

сводится к алгебраическому уравнению 4го порядка, решаемому аналитически (см. ниже "Аналитическое решение") или, что проще, к уравнениям, решаемым численно последовательными приближениями, стартующими с $\beta_i = 0$ и (в случае $m_2 > m_1$) использующими соотношения

$$\beta_2 = \frac{M_1}{M_1 + M_2}\alpha Z/n, \quad \beta_1 = \alpha Z/n - \beta_2$$

Используя найденные скорости, получаем угловую скорость

$$\nu = qM_{12}\frac{(\alpha cZ)^2}{\hbar n^3},$$

коэф. потери массы

$$q(n) = 1/(1 + \frac{M_{12}}{m_1 + m_2}\frac{(\alpha cZ)^2}{n^2}),$$

и радиусы

$$r = \frac{n^2\hbar}{\alpha c Z M_{12} q}, \quad r_i = \frac{n^2\hbar}{\alpha c Z M_i q},$$

где $M_{12} = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ - приведенная масса..

4. Энергии

Так как силы взаимодействия в ионах - это силы притяжения, то Кулоновская потенциальная энергия определяется как негативная величина

$$E_{pot}(n) = - \int_{r(n)}^{\infty} dr \alpha c \hbar Z / r^2 = -\alpha c \hbar Z / r(n).$$

В РeM модели, она имеет вид

$$E_{pot}(n) = -q M_{12} \frac{(\alpha c Z)^2}{n^2}.$$

Однако, кинетическая энергия положительна и в РeM модели определена как

$$E_{kin} = q(m_1(\gamma_1 - 1) + m_2(\gamma_2 - 1))c^2.$$

Ионизационная энергия в РeM модели понимается как энергетический уровень и считается отрицательной. Она определена как сумма

$$E_{ion}(n) = E_{pot}(n) + E_{kin}(n).$$

$E_{ion}(n)$ - это энергия, потраченная на излучение во время перехода свободных частиц в пое состояние, и является энергией, необходимой для разрушения иона и приведение частиц в состояние покоя на большом расстоянии друг от друга.

В нерелятивистском приближении $q = \gamma_i = 1$, рассмотренные энергии удовлетворяют известному простому соотношению

$$E_{pot}(n) = 2E_{ion}(n) = -2E_{kin}(n).$$

В релятивистском случае, $E_{kin}(n) > abs(E_{ion}(n))$.

Эти формулы для ионизационной и других энергий в бесспиновом приближении - основной результат простой РeM модели. Для достижения большей точности или получения большей информации о свойствах ионов требуется усложнять модель, добавляя больше взаимодействий, переменных, и уравнений.

Определенный намек в этом направлении дает вычисление в РeM модели произведения $\hbar\nu$. Это произведение является энергией некоторого "резонансного" фотона, вращающегося с той же частотой, что и пара частиц. Обозначим эту энергию как E_{ph} . Сравнение выражений для ν и E_{pot} приводит к равенству

$$E_{ph} = -E_{pot}/n$$

утверждающему, что энергии n "резонансных" фотонов должны в сумме давать $-E_{pot}$. Такое совпадение может трактоваться как внутреннее условие квантования, основанное на свойствах иона, и альтернативное внешнему квантовому условию (3). Это может иметь экспериментально наблюдаемые специфические следствия, но в рамках простой РeM модели возможная роль "резонансных" фотонов остается неизвестной.

5. Бесспиновый "позитроний"

В случае позитрония, в силу его массовой и зарядовой симметрий, скорости, очевидно, равны, $\beta_i = \alpha/(2n)$, и потенциал и кинетическая энергия становятся явными функциями константы α :

$$E_{pot} = -qmc^2(\alpha/n)^2\gamma/2, \quad E_{kin} = q2mc^2(\gamma - 1),$$

где $q = 1/(1 + (\alpha/n)^2\gamma/4)$. Для основного и первого возбужденного состояний, они дают

$$n = 1 : \beta = 0.0036486763, E_{kin} = 6.8028245eV, E_{ion} = -6.8027793eV, q = 0.999986687,$$

$$n = 2 : \beta = 0.0018243381, E_{kin} = 1.7007104eV, E_{ion} = -170070755.eV, q = 0.999986687.$$

Для физического позитрония, эти величины соответствуют параметрам, усредненным по направлениям спинов.

6. Аналитическое решение

Здесь удобно перейти к индексам $j=(0,1)$. Система уравнений

$$\beta_0 + \beta_1 = \alpha Z/n, \quad M_0\beta_0 = M_1\beta_1.$$

для неизвестных $\beta_{1-j} = x$ сводится к алгебраическому уравнению 4го порядка

$$(a - x)^2(1 - x^2)R - x^2(1 - (a - x)^2) = 0,$$

где $a = \alpha Z/n$, $R = m_{1-j}/m_j$. Правильный корень, который соответствует исходной системе уравнений, имеет вид

$$x = (a - g)/2 + (((a - g)/2)^2 - y - (\rho R - y)/g)^{1/2},$$

где $g = (1 + 2y)^{1/2}$, $\rho = R/(1 - R^2)$, $y = k/t$, где

$$k = a\rho(3/(1 - a^2))^{1/2}, \quad t = -2 \sin((1/3) \arcsin s), s = 3k/(1 - a^2).$$

Эти формулы точные, но проверочные вычисления показали, что их использование в численных расчетах приводит к заметной потере точности.

7. Сравнение с другими предсказаниями

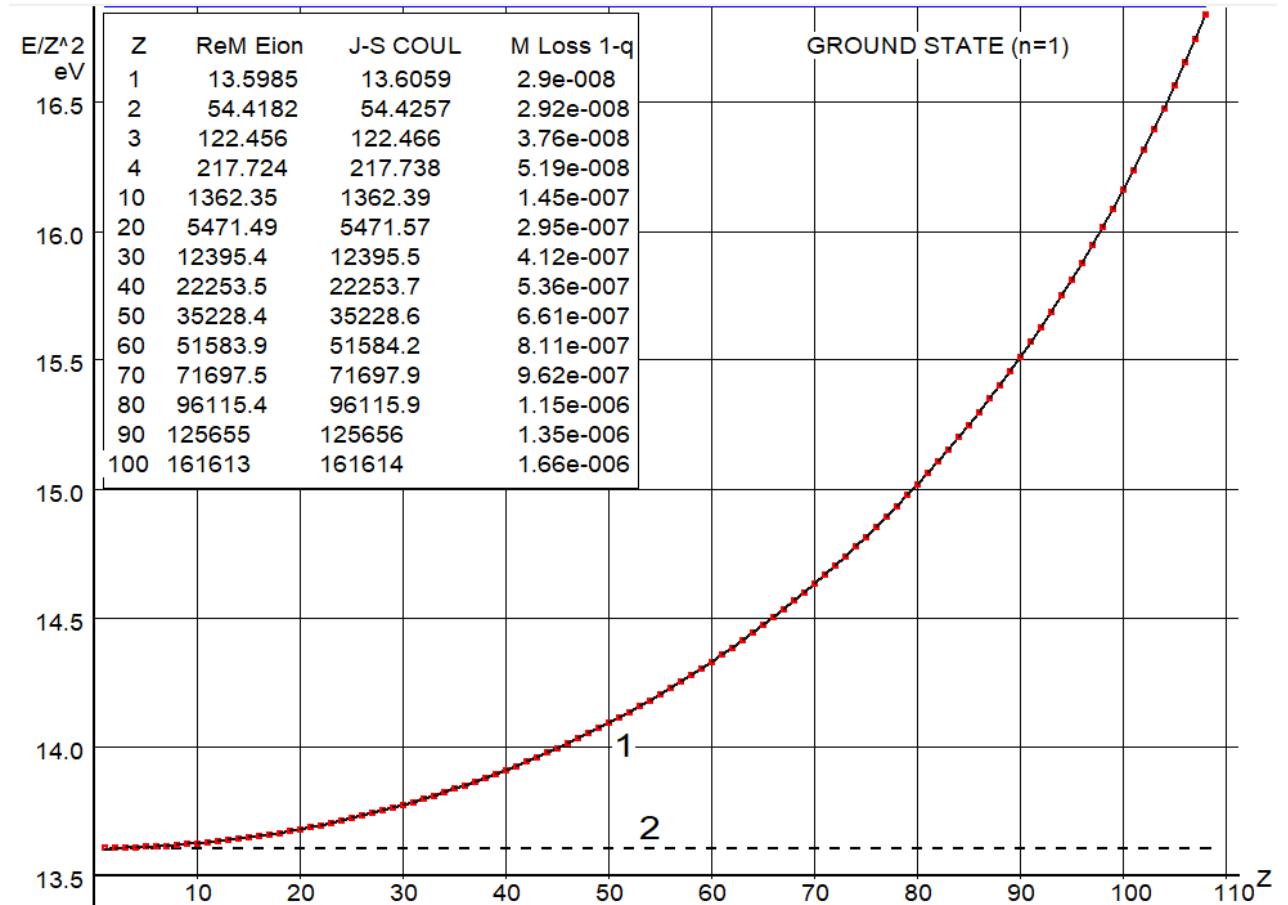


Рис. 1. Сравнение предсказаний для основного состояния.

Графики показывают абсолютные величины энергий, деленные на Z^2 .

Рис. 1 показывает предсказания РeМ модели (сплошная кривая 1) для ионизационной энергии $E_{ion}(Z, 0)$ в основном состоянии при $Z < 110$ и вычисленные в [2] значения (квадратные точки) так называемого Кулоновского члена (основанного на квантовых урвнениях Дирака) ионизационных энергий, представленные частично в таблицах NIST [5]. Для сравнения, рис. 1 содержит также значения $E_{NR}(Z)$ ионизационных энергий (штриховая кривая 2), посчитанные в РeМ модели в нерелятивистском приближении.

С точностью рисунка, предсказания РeМ модели совпадают с Кулоновским членом в [2]. Небольшие таблички при выбранных Z , включенные в рис. 1, показывают, что относительная точность совпадения растет с Z и при больших Z приближается к 10^{-5} . Таким образом, в рамках заявленной точности РeМ модель совместима с соответственными предсказаниями в [2].

Переход от базовой РeИ модели к более точной модели, учитывающей магнит-

ные взаимодействия, может сблизить ее с результатами вычислений в [2]. Однако, уточненная модель не может совпасть с [2], так как вычисления в [2] игнорируют тот физический факт, что масса иона в любом связанном состоянии меньше суммы масс электроны и ядра в свободных состояниях, в то время как РeМ модель учитывает эту разницу масс. При больших Z , относительная потеря масс лежит в районе 10^{-6} , что сравнимо с величинами других поправок, рассматриваемых в [2].

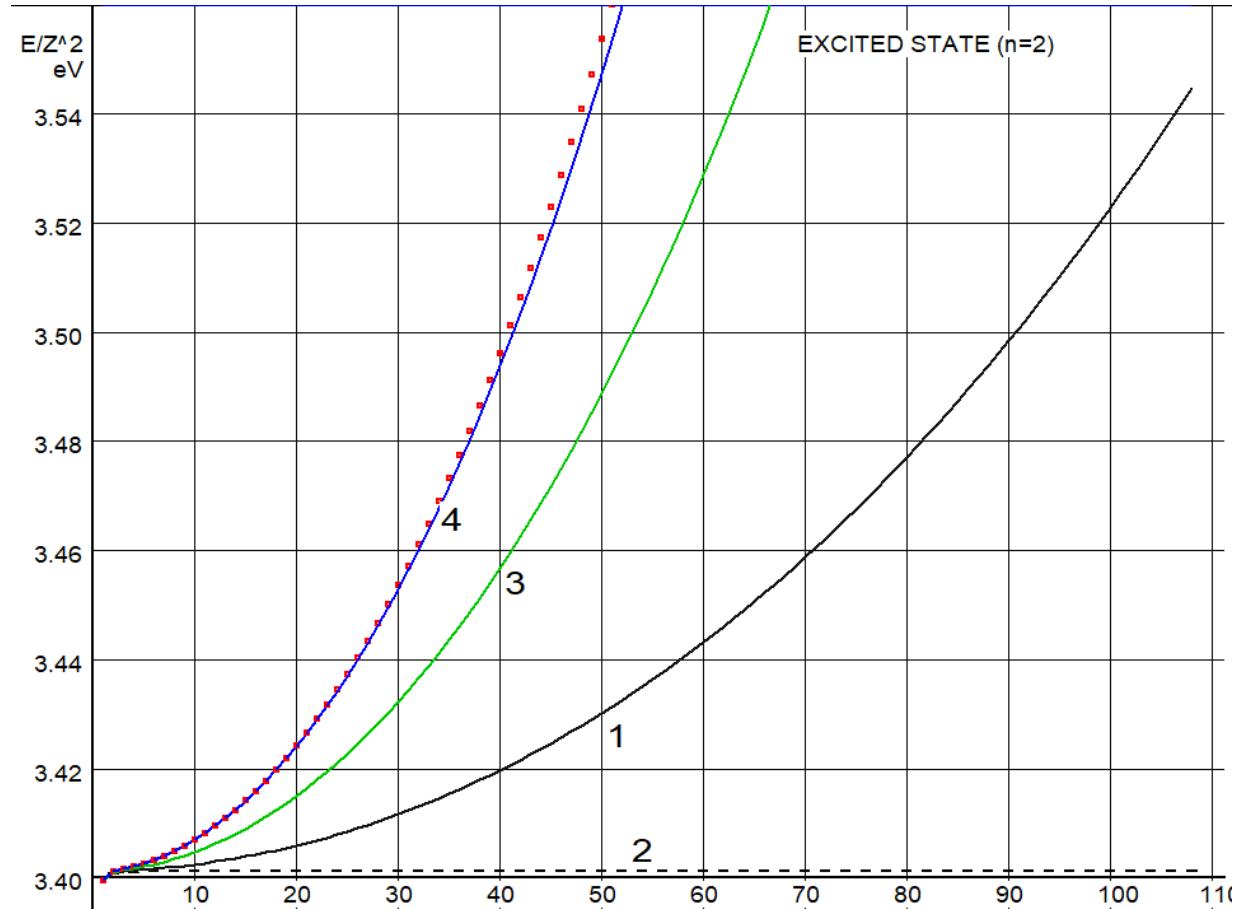


Рис. 2. Противоречивые предсказания для первого возбужденного состояния.

Рис. 2 подобен рис. 1, но показывает предсказания ионизационной энергии для первого возбужденного состояния. Как и выше, кривая 1 - предсказания РeМ модели E_{ion} , а кривая 2 дает их нерелятивистское приближение $E_{NR}(Z)$. Рис. 2 содержит еще 2 кривые, вычисленные в РeМ модели - кинетическую энергию E_{kin} (кривая 3) и комбинацию энергий (кривая 4) $E_{mix} = 2E_{kin} - \text{abs}(E_{ion})$.

Точки $E_{[2]}(Z)$, вблизи кривой E_{mix} - значения Кулоновского члена E_{Coul} ионизационных энергий, вычисленные из значений разности между основным и возбужденным энергетическими уровнями, табулированными в [2]. Эти точки быстро отдаляются от нерелятивистского приближения и величина относительных релятивистских поправок $E_{[2]}(Z)/E_{NR}(Z)-1$ (которая должна быстро убывать с n) остается примерно

той же самой, что и в основном состоянии. Это означает, что предсказания в [2] для возбужденного состояния ошибочны. Так как значения $E_{[2]}(Z)$ близки к E_{mix} , то релятивистские поправки $E_{[2]}(Z) - E_{NR}(Z)$ содержат ошибку, оцениваемую в двойную разность между (абсолютными значениями) кинетической и ионизационной энергий.

Эта ошибка осталась незамеченной в [10], где использовались результаты работы [2].

В эксперименте [11] были сделаны измерения спектров ионов урана, которые использовались для проверки величины сдвига Лэмба в сильных полях. Судя по описанию эксперимента, он давал техническую возможность измерить энергию возбуждения иона. Однако, никаких противоречий измерений с использованными оценками работы [10] в работе [11] упомянуто не было.

8. Заключение

РeM модель способна успешно предсказывать ионизационные энергии и некоторые другие параметры ионов в бесспиновом приближении в широком диапазоне зарядов Z , несмотря на отсутствие запаздывания взаимодействий в ее определении и на использование Кулоновского потенциала подобно квазипотенциалам в релятивистской квантовой механике [6-8].

РeM модель выявляет незамеченное ранее равенство абсолютного значения потенциальной энергии иона в n -ом связанном состоянии с суммарной энергией n фотонов вращающихся с той же частотой, с которой электрон-ядерная пара вращается вокруг центра масс иона.

Сравнение предсказаний РeM модели с таблицами в [2] указывает на ошибку в релятивистских поправках, использованных в [2] для первого возбужденного состояния.

РeM модель, так же как и другие теоретические предсказания ионизационной энергии, остаются пока экспериментально непроверенными при больших Z . Желательность прямых экспериментальных измерений ионизационных энергий, высказанная еще в 1985 году в [2], остается актуальной, особенно для тяжелых элементов.

* * *

Приложение А содержит таблицы предсказаний РeM модели - энергии, скорости, радиусы, и потери массы для основного состояния $n=1$ и для первого возбужденного состояния $n=2$ для одноэлектронных ионов с $Z < 119$.

Список литературы

- [1] N. Bohr Dr. phil. (1913): I. On the constitution of atoms and molecules , Philosophical Magazine Series 6, 26:151, 1-25.
- [2] W.R.Johnson and Gerhard Soff. The Lamb Shift in Hydrogen-like Atoms, $1 \leq Z \leq 110$. Atomic Data and Nuclear Data Tables **33**, 405 (1985).

- [3] E.A.Uehling. Polarization Effects in the Positron Theory. Phys.Rev. **48**, 340 (1935).
 - [4] S.Klarsfeld. Analytical Expressions for the Evaluation of Vacuum-Polarization Potentials in Muonic Atoms. Phys.Lett. **B 66**, 86-88 (1977).
 - [5] NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.9)(2021).
 - [6] Sokolov, S.N.: Theory of relativistic direct interactions. Dokl. Akad. Nauk SSSR 233, 575 (1977).
 - [7] Coester, F., Polyzou, W.N.: Relativistic quantum mechanics of particles with direct interactions. Phys. Rev. D 26, 1348 (1982).
 - [8] W. N. Polyzou, Ch. Elster, W. Glueckle, J. Golak, Y. Huang, H. Kamada, R. Skibinski, H. Witala Mini Review of Poincare' Invariant Quantum Theory. Few-Body Systems 49: 129-147(2011).
 - [9] P. F. Lang, B.C. Smith. Methods of Calculating Ionization Energies of Multielectron (Five or More) Isoelectronic Atomic Ions. Sci. World J. vol. 2013, Article ID 157413.
 - [10] V. A. Yerokhin, V. M. Shabaev. Lamb Shift of $n = 1$ and $n = 2$ States of Hydrogen-like Atoms, $1 < Z \leq 110$ Journal of Physical and Chemical Reference Data 44, 033103 (2015).
 - [11] A. Gumberidze, Th. Stöhlker, D. Banaś, et.al. (Germany, Poland, ESR storage ring) Quantum Electrodynamics in Strong Electric Fields: The Ground-State Lamb Shift in Hydrogenlike Uranium. PRL **94**, 223001 (2005); DOI 10.1103/PhysRevLett.94.223001.
-

А. Приложение

Пояснения к таблицам

- "A".

Атомный вес. Масса ядра m_2 , использованная при вычислениях, была определена как $m_2 = Am_u - Zm_1$, где $m_u = 1.660539066E-24g$ - константа атомной массы и $m_1 = 9.10938370E-28$ - масса электрона.

- "Eion".

Энергия ионизации (абсолютное значение).

- "Ekin".

Кинетическая энергия.

- " ν E18".

Угловая скорость (частота $\cdot 2\pi$). Буквы "E18" означают, что значения в этой колонке надо умножить на 1.E18.

- " β_1 ".

Скорость электрона. Скорость ядра можно вычислить как $\beta_2 = \alpha Z/n - \beta_1$, где $\alpha = 7.297352569E-3$.

- " r_1 ".

Расстояние электрона от центра масс.

- " r_{12} ".

Полное расстояние между электроном и ядром.

- "Mloss".

Относительная потеря масс частиц в связанном состоянии n . Она равна $1 - q(n)$, где $q(n)$ - коэффициент уменьшения массы.

ТАБЛИЦА А основное состояние (n=1)

Z	Ion	A	Eion eV	Ekin eV	ν E18	β_1	r1 E-12	r12 E-12	Mloss E-6
1	H	1.008	13.59847	13.59883	0.04131997	0.00729338	5294.513	5291.632	0.02896577
2	He	4.00262	54.41821	54.42401	0.16536043	0.01459270	2645.967	2645.604	0.02919661
3	Li	6.997	122.4563	122.4857	0.37213233	0.02189034	1763.640	1763.501	0.03758714
4	Be	9.012183	217.7242	217.8170	0.66170357	0.02918763	1322.460	1322.379	0.05189177
5	B	10.821	340.2383	340.4650	1.0341704	0.03648491	1057.704	1057.650	0.06754581
6	C	12.0116	490.0175	490.4878	1.4896497	0.04378211	881.1567	881.1164	0.08765327
7	N	14.0067	667.0882	667.9602	2.0282954	0.05107946	755.0103	754.9807	0.1023489
8	O	15.9997	871.4775	872.9662	2.6502764	0.05837682	660.3662	660.3435	0.1170764
9	F	18.9984	1103.220	1105.607	3.3557987	0.06567427	586.7224	586.7054	0.1248432
10	Ne	20.1797	1362.348	1365.990	4.1450747	0.07297154	527.7809	527.7665	0.1451809
11	Ha	22.98977	1648.910	1654.247	5.0183787	0.08026896	479.5295	479.5180	0.1542830
12	Mg	24.307	1962.945	1970.515	5.9759774	0.08756625	439.2971	439.2871	0.1737685
13	Al	26.98154	2304.511	2314.951	7.0181982	0.09486365	405.2320	405.2237	0.1838445
14	Si	28.086	2673.658	2687.720	8.1453659	0.1021609	376.0135	376.0061	0.2049824
15	P	30.97376	3070.451	3089.011	9.3578691	0.1094583	350.6714	350.6651	0.2135386
16	S	32.076	3494.949	3519.016	10.656087	0.1167556	328.4795	328.4738	0.2348090
17	Cl	35.457	3947.229	3977.956	12.040473	0.1240531	308.8811	308.8763	0.2400130
18	Ar	39.948	4427.362	4466.056	13.511480	0.1313505	291.4443	291.4403	0.2390534
19	K	39.0983	4935.419	4983.550	15.069566	0.1386477	275.8283	275.8244	0.2724195
20	Ca	40.078	5471.494	5530.712	16.715291	0.1459450	261.7593	261.7557	0.2947858
21	Sc	44.95591	6035.681	6107.822	18.449226	0.1532425	249.0160	249.0129	0.2900568
22	Ti	47.867	6628.063	6715.162	20.271926	0.1605399	237.4180	237.4153	0.2993291
23	Va	50.9415	7248.745	7353.049	22.184028	0.1678373	226.8159	226.8134	0.3077919
24	Cr	51.9961	7897.826	8021.806	24.186177	0.1751346	217.0851	217.0828	0.3287665
25	Mn	54.93804	8575.425	8721.788	26.279090	0.1824320	208.1209	208.1188	0.3380858
26	Fe	55.845	9281.649	9453.354	28.463477	0.1897293	199.8349	199.8329	0.3602434
27	Co	58.93319	10016.63	10216.89	30.740128	0.1970266	192.1517	192.1498	0.3686689
28	Ni	58.6934	10780.48	11012.81	33.109821	0.2043239	185.0066	185.0048	0.3987152
29	Cu	63.546	11573.34	11841.53	35.573451	0.2116214	178.3438	178.3422	0.3956657
30	Zn	65.38	12395.35	12703.50	38.131861	0.2189187	172.1152	172.1137	0.4122251
31	Ga	69.723	13246.66	13599.19	40.786012	0.2262161	166.2786	166.2773	0.4134503
32	Ge	72.63	14127.40	14529.08	43.536858	0.2335135	160.7974	160.7961	0.4236707
33	As	74.92159	15037.75	15493.69	46.385423	0.2408108	155.6390	155.6378	0.4375845
34	Se	78.971	15977.86	16493.57	49.332785	0.2481082	150.7750	150.7739	0.4415229
35	Br	79.904	16947.90	17529.27	52.380034	0.2554055	146.1801	146.1791	0.4633235
36	Kr	83.798	17948.05	18601.39	55.528367	0.2627029	141.8318	141.8308	0.4683456
37	Rb	85.4678	18978.49	19710.53	58.778971	0.2700002	137.7101	137.7092	0.4860775
38	Sr	87.62	20039.42	20857.35	62.133132	0.2772976	133.7970	133.7961	0.5011945
39	Y	88.90584	21131.03	22042.53	65.592167	0.2845949	130.0764	130.0756	0.5214458
40	Zr	91.224	22253.52	23266.76	69.157471	0.2918923	126.5339	126.5331	0.5358183
41	Nb	92.90637	23407.12	24530.78	72.830476	0.2991896	123.1563	123.1556	0.5540589
42	Mo	95.95	24592.04	25835.36	76.612701	0.3064870	119.9319	119.9311	0.5643432
43	Tc	97	25808.51	27181.31	80.505696	0.3137843	116.8498	116.8491	0.5866022
44	Ru	101.07	27056.77	28569.47	84.511130	0.3210817	113.9003	113.8996	0.5909880
45	Rh	102.9055	28337.06	30000.71	88.630679	0.3283790	111.0745	111.0739	0.6087417
46	Pd	106.42	29649.65	31475.96	92.866151	0.3356764	108.3643	108.3638	0.6167663
47	Ag	107.8682	30994.80	32996.17	97.219383	0.3429737	105.7623	105.7618	0.6370107
48	Cd	112.414	32372.78	34562.35	101.69234	0.3502711	103.2616	103.2611	0.6393713
49	In	114.818	33783.87	36175.53	106.28703	0.3575684	100.8560	100.8555	0.6542678
50	Sn	118.71	35228.37	37836.82	111.00556	0.3648658	98.53971	98.53922	0.6609087
51	Sb	121.76	36706.59	39547.37	115.85014	0.3721632	96.30739	96.30693	0.6724739
52	Te	127.6	38218.84	41308.37	120.82309	0.3794606	94.15414	94.15371	0.6692373
53	I	126.9045	39765.44	43121.05	125.92675	0.3867579	92.07546	92.07503	0.7013331
54	Xe	131.293	41346.75	44986.76	131.16369	0.3940552	90.06710	90.06669	0.7060800
55	Cs	132.9055	42963.11	46906.85	136.53649	0.4013526	88.12517	88.12478	0.7260866
56	Ba	137.327	44614.88	48882.76	142.04792	0.4086500	86.24604	86.24567	0.7310718
57	La	138.9055	46302.45	50915.99	147.70080	0.4159473	84.42636	84.42599	0.7515281
58	Ce	140.116	48026.19	53008.12	153.49812	0.4232446	82.66296	82.66260	0.7742798
59	Pr	140.9077	49786.53	55160.79	159.44303	0.4305419	80.95292	80.95257	0.7997508
60	Nd	144.242	51583.88	57375.75	165.53880	0.4378393	79.29348	79.29315	0.8111313

ТАБЛИЦА А основное состояние (n=1)

Z	Ion	A	Eion eV	Ekin eV	ν E18	β_1	r1 E-12	r12 E-12	Mloss E-6
61	Pm	145	53418.67	59654.80	171.78882	0.4451366	77.68210	77.68178	0.8373579
62	Sm	150.36	55291.37	61999.86	178.19672	0.4524340	76.11636	76.11605	0.8376251
63	Eu	151.964	57202.42	64412.90	184.76619	0.4597313	74.59403	74.59373	0.8593393
64	Gd	157.25	59152.34	66896.06	191.50122	0.4670287	73.11298	73.11269	0.8607202
65	Tb	158.9254	61141.62	69451.51	198.40588	0.4743261	71.67123	71.67095	0.8823542
66	Dy	162.5	63170.78	72081.60	205.48452	0.4816234	70.26691	70.26664	0.8937308
67	Ho	164.9303	65240.37	74788.75	212.74166	0.4889208	68.89827	68.89800	0.9116603
68	Er	167.259	67350.95	77575.53	220.18207	0.4962181	67.56363	67.56338	0.9304083
69	Tm	168.9342	69503.12	80444.66	227.81075	0.5035154	66.26145	66.26120	0.9530993
70	Yb	173.045	71697.48	83398.99	235.63299	0.5108128	64.99022	64.98998	0.9624046
71	Lu	174.9668	73934.67	86441.51	243.65428	0.5181101	63.74855	63.74832	0.9842363
72	Hf	178.486	76215.35	89575.41	251.88048	0.5254075	62.53512	62.53490	0.9974033
73	Ta	180.9479	78540.21	92804.04	260.31771	0.5327048	61.34867	61.34845	1.016789
74	W	183.84	80909.96	96130.94	268.97245	0.5400022	60.18801	60.18779	1.034066
75	Re	186.207	83325.36	99559.85	277.85151	0.5472995	59.05199	59.05178	1.054623
76	Os	190.23	85787.17	103094.8	286.96213	0.5545969	57.93954	57.93934	1.066167
77	Ir	192.217	88296.22	106739.8	296.31189	0.5618942	56.84964	56.84944	1.089525
78	Pt	195.084	90853.34	110499.5	305.90886	0.5691916	55.78129	55.78110	1.108282
79	Au	196.9666	93459.42	114378.6	315.76155	0.5764889	54.73358	54.73340	1.133044
80	Hg	200.592	96115.38	118382.1	325.87903	0.5837862	53.70560	53.70542	1.148213
81	Tl	204.38	98822.19	122515.3	336.27085	0.5910836	52.69651	52.69633	1.162866
82	Pb	207.2	101580.9	126783.9	346.94717	0.5983809	51.70548	51.70530	1.183457
83	Bi	208.9804	104392.4	131194.0	357.91879	0.6056783	50.73172	50.73156	1.210481
84	Po	209	107258.0	135752.0	369.19721	0.6129756	49.77450	49.77434	1.248511
85	At	210	110178.8	140464.9	380.79468	0.6202729	48.83308	48.83291	1.281600
86	Rn	222	113155.9	145340.0	392.72438	0.6275703	47.90674	47.90659	1.250293
87	Fr	223	116190.8	150385.1	404.99999	0.6348677	46.99485	46.99470	1.283594
88	Ra	226	119284.6	155608.8	417.63654	0.6421650	46.09674	46.09659	1.306073
89	Ac	227	122438.8	161020.1	430.64994	0.6494623	45.21178	45.21164	1.340839
90	Th	232.0377	125655.0	166628.9	444.05734	0.6567597	44.33937	44.33923	1.352563
91	Pa	231.0359	128934.6	172445.6	457.87696	0.6640570	43.47891	43.47877	1.400709
92	U	238.0289	132279.3	178481.5	472.12868	0.6713543	42.62982	42.62969	1.401869
93	Np	237	135690.8	184748.8	486.83352	0.6786516	41.79155	41.79142	1.451812
94	Pu	244	139171.1	191260.9	502.01459	0.6859490	40.96355	40.96342	1.454129
95	Am	243	142722.0	198032.0	517.69639	0.6932463	40.14528	40.14516	1.505729
96	Cm	247	146345.6	205077.7	533.90588	0.7005437	39.33621	39.33609	1.527725
97	Bk	247	150044.0	212414.9	550.67194	0.7078410	38.53584	38.53572	1.575703
98	Cf	251	153819.7	220062.0	568.02625	0.7151383	37.74363	37.74352	1.599456
99	Es	252	157675.1	228039.1	586.00301	0.7224356	36.9591	36.95898	1.643530
100	Fm	257	161612.9	236368.4	604.63984	0.7297330	36.18173	36.18161	1.662804
101	Md	258	165635.7	245073.8	623.97757	0.7370303	35.41102	35.41091	1.709335
102	No	259	169746.7	254182.1	644.06122	0.7443276	34.64647	34.64636	1.757543
103	Lr	262	173949.2	263722.5	664.94026	0.7516249	33.88759	33.88748	1.793741
104	Rf	267	178246.4	273727.5	686.66917	0.7589223	33.13384	33.13374	1.817665
105	Db	270	182642.3	284232.8	709.30810	0.7662196	32.38474	32.38464	1.856729
106	Sg	269	187140.7	295278.6	732.92378	0.7735169	31.63975	31.63965	1.925685
107	Bh	270	191746.0	306909.3	757.59074	0.7808142	30.89834	30.89824	1.983125
108	Hs	270	196462.9	319175.0	783.39189	0.7881115	30.15996	30.15986	2.050668
109	Mt	278	201296.6	332131.9	810.42060	0.7954088	29.42402	29.42393	2.060364
110	Ds	281	206252.6	345843.3	838.78121	0.8027062	28.68997	28.68987	2.109699
111	Rg	281	211336.8	360380.9	868.59213	0.8100034	27.95716	27.95707	2.184683
112	Cn	285	216556.1	375826.9	899.98806	0.8173008	27.22496	27.22487	2.231877
113	Nh	286	221917.6	392274.6	933.12214	0.8245980	26.49269	26.49260	2.305958
114	Fl	289	227429.6	409832.0	968.17060	0.8318953	25.75959	25.75950	2.367734
115	Mc	289	233100.8	428623.7	1005.3364	0.8391926	25.02491	25.02482	2.458630
116	Lv	293	238941.3	448795.3	1044.8558	0.8464899	24.28777	24.28769	2.520391
117	Ts	293	244962.2	470517.1	1087.0043	0.8537872	23.54727	23.54719	2.622066
118	Og	294	251176.1	493990.6	1132.1075	0.8610844	22.80239	22.80231	2.721578

ТАБЛИЦА В возбужденное состояние (n=2)

Z	Ion	A	Eion eV	Ekin eV	ν E18	β 1	r1 E-12	r12 E-12	Mloss E-6
1	H	1.008	3.399584	3.399606	0.005164894	0.00364669	21178.47	21166.95	0.007241299
2	He	4.00262	13.60401	13.60437	0.020668403	0.00729635	10584.71	10583.26	0.007298570
3	Li	6.997	30.61133	30.61316	0.046508183	0.01094517	7055.827	7055.274	0.009395097
4	Be	9.012183	54.42236	54.42816	0.082686517	0.01459382	5291.531	5291.209	0.01296880
5	B	10.821	85.03835	85.05251	0.12920674	0.01824246	4232.928	4232.713	0.01687802
6	C	12.0116	122.4603	122.4897	0.18607227	0.02189106	3527.164	3527.003	0.02189755
7	N	14.0067	166.6904	166.7448	0.25328860	0.02553973	3023.002	3022.883	0.02556216
8	O	15.9997	217.7300	217.8228	0.33086060	0.02918841	2644.850	2644.759	0.02923164
9	F	18.9984	275.5817	275.7303	0.41879515	0.03283714	2350.698	2350.630	0.03116023
10	Ne	20.1797	340.2464	340.4731	0.51709738	0.03648577	2115.357	2115.300	0.03622259
11	Ha	22.98977	411.7283	412.0603	0.62577751	0.04013448	1922.776	1922.730	0.03847730
12	Mg	24.307	490.0289	490.4992	0.74484213	0.04378313	1762.272	1762.233	0.04331680
13	Al	26.98154	575.1525	575.8006	0.87430274	0.04743183	1626.438	1626.405	0.04580541
14	Si	28.086	667.1014	667.9734	1.0141677	0.05108047	1509.991	1509.961	0.05104413
15	P	30.97376	765.8806	767.0302	1.1644507	0.05472917	1409.049	1409.024	0.05314354
16	S	32.076	871.4926	872.9814	1.3251612	0.05837782	1320.710	1320.687	0.05840037
17	Cl	35.457	983.9434	985.8416	1.4963150	0.06202654	1242.745	1242.725	0.05965464
18	Ar	39.948	1103.237	1105.624	1.6779250	0.06567527	1173.427	1173.411	0.05937376
19	K	39.0983	1229.375	1232.340	1.8700019	0.06932387	1111.393	1111.377	0.06760978
20	Ca	40.078	1362.367	1366.009	2.0725657	0.07297252	1055.547	1055.533	0.07310227
21	Sc	44.95591	1502.217	1506.647	2.2856343	0.07662126	1005.006	1004.994	0.07186900
22	Ti	47.867	1648.930	1654.268	2.5099210	0.08026996	959.0468	959.0358	0.07410080
23	Va	50.9415	1802.513	1808.893	2.7433454	0.08391865	917.0719	917.0620	0.07612500
24	Cr	51.9961	1962.969	1970.539	2.9880253	0.08756730	878.5834	878.5741	0.08123339
25	Mn	54.93804	2130.309	2139.227	3.2432829	0.09121599	843.1624	843.1539	0.08345097
26	Fe	55.845	2304.4536	2314.976	3.5091368	0.09486465	810.4553	810.4473	0.08882564
27	Co	58.93319	2485.660	2497.810	3.7856113	0.09851334	780.1602	780.1529	0.09080229
28	Ni	58.6934	2673.685	2687.748	4.0727255	0.1021620	752.0192	752.0121	0.09808919
29	Cu	63.546	2868.624	2884.818	4.3705085	0.1058107	725.8085	725.8022	0.09722196
30	Zn	65.38	3070.480	3089.041	4.6789795	0.1094594	701.3360	701.3301	0.1011644
31	Ga	69.723	3279.264	3300.444	4.9981674	0.1131081	678.4329	678.4276	0.1013335
32	Ge	72.63	3494.983	3519.051	5.3280963	0.1167568	656.9525	656.9475	0.1036987
33	As	74.92159	3717.646	3744.891	5.6687939	0.1204054	636.7652	636.7605	0.1069550
34	Se	78.971	3947.263	3977.991	6.0202900	0.1240541	617.7568	617.7525	0.1077618
35	Br	79.904	4183.842	4218.380	6.3826110	0.1277028	599.8266	599.8224	0.1129138
36	Kr	83.798	4427.395	4466.090	6.7557906	0.1313515	582.8843	582.8805	0.1139614
37	Rb	85.4678	4677.930	4721.149	7.1398571	0.1350001	566.8501	566.8464	0.1180873
38	Sr	87.62	4935.458	4983.592	7.5348443	0.1386488	551.6522	551.6487	0.1215591
39	Y	88.90584	5199.990	5253.449	7.9407845	0.1422975	537.2263	537.2229	0.1262556
40	Zr	91.224	5471.537	5530.757	8.3577133	0.1459462	523.5143	523.5111	0.1295078
41	Nb	92.90637	5750.110	5815.550	8.7856648	0.1495948	510.4642	510.4611	0.1336741
42	Mo	95.95	6035.721	6107.864	9.2246765	0.1532435	498.0285	498.0256	0.1359013
43	Tc	97	6328.382	6407.736	9.6747839	0.1568922	486.1645	486.1617	0.1409900
44	Ru	101.07	6628.105	6715.206	10.136028	0.1605409	474.8330	474.8304	0.1417629
45	Rh	102.9055	6934.902	7030.311	10.608446	0.1641895	463.9987	463.9962	0.1457239
46	Pd	106.42	7248.788	7353.094	11.092081	0.1678382	453.6290	453.6267	0.1473351
47	Ag	107.8682	7569.773	7683.594	11.586971	0.1714869	443.6944	443.6921	0.1518426
48	Cd	112.414	7897.874	8021.856	12.093163	0.1751356	434.1676	434.1654	0.1520669
49	In	114.818	8233.102	8367.923	12.610697	0.1787843	425.0236	425.0215	0.1552546
50	Sn	118.71	8575.474	8721.840	13.139622	0.1824330	416.2394	416.2374	0.1564622
51	Sb	121.76	8925.002	9083.654	13.679981	0.1860816	407.7939	407.7920	0.1588160
52	Te	127.6	9281.703	9453.412	14.231824	0.1897303	399.6675	399.6657	0.1576597
53	I	126.9045	9645.590	9831.161	14.795195	0.1933790	391.8422	391.8405	0.1647999
54	Xe	131.293	10016.68	10216.95	15.370151	0.1970277	384.3011	384.2995	0.1654811
55	Cs	132.9055	10394.99	10610.84	15.956737	0.2006763	377.0289	377.0273	0.1697125
56	Ba	137.327	10780.54	11012.87	16.555009	0.2043250	370.0110	370.0095	0.1704059
57	La	138.9055	11173.33	11423.11	17.165018	0.2079737	363.2341	363.2327	0.1746774
58	Ce	140.116	11573.40	11841.59	17.786819	0.2116224	356.6857	356.6843	0.1794416
59	Pr	140.9077	11980.76	12268.39	18.420470	0.2152710	350.3542	350.3528	0.1847906
60	Nd	144.242	12395.41	12703.56	19.066029	0.2189197	344.2287	344.2273	0.1868451

ТАБЛИЦА В возбужденное состояние (n=2)

Z	Ion	A	Eion eV	Ekin eV	ν E18	β_1	r1 E-12	r12 E-12	Mloss E-6
61	Pm	145	12817.40	13147.16	19.723552	0.2225684	338.2990	338.2977	0.1922788
62	Sm	150.36	13246.72	13599.25	20.393104	0.2262171	332.5557	332.5545	0.1917182
63	Eu	151.964	13683.40	14059.89	21.074741	0.2298658	326.9899	326.9887	0.1960353
64	Gd	157.25	14127.47	14529.15	21.768530	0.2335144	321.5932	321.5921	0.1956814
65	Tb	158.9254	14578.93	15007.08	22.474533	0.2371631	316.3579	316.3568	0.1998983
66	Dy	162.5	15037.82	15493.77	23.192817	0.2408118	311.2766	311.2755	0.2017489
67	Ho	164.9303	15504.14	15989.26	23.923449	0.2444605	306.3424	306.3413	0.2050380
68	Er	167.259	15977.93	16493.65	24.666498	0.2481091	301.5487	301.5477	0.2084631
69	Tm	168.9342	16459.19	17006.98	25.422034	0.2517578	296.8895	296.8885	0.2127180
70	Yb	173.045	16947.97	17529.35	26.190131	0.2554065	292.3590	292.3580	0.2139387
71	Lu	174.9668	17444.27	18060.82	26.970860	0.2590552	287.9517	287.9507	0.2178964
72	Hf	178.486	17948.12	18601.47	27.764298	0.2627039	283.6624	283.6615	0.2198837
73	Ta	180.9479	18459.55	19151.37	28.570520	0.2663525	279.4864	279.4856	0.2231902
74	W	183.84	18978.57	19710.62	29.389606	0.2700012	275.4191	275.4182	0.2259769
75	Re	186.207	19505.21	20279.28	30.221636	0.2736499	271.4559	271.4551	0.2294205
76	Os	190.23	20039.50	20857.44	31.066693	0.2772986	267.5929	267.5921	0.2308477
77	Ir	192.217	20581.45	21445.20	31.924858	0.2809472	263.8261	263.8253	0.2347724
78	Pt	195.084	21131.11	22042.62	32.796218	0.2845959	260.1518	260.1511	0.2376358
79	Au	196.9666	21688.48	22649.81	33.680860	0.2882446	256.5665	256.5658	0.2417134
80	Hg	200.592	22253.61	23266.85	34.578875	0.2918933	253.0668	253.0661	0.2436726
81	Tl	204.38	22826.51	23893.85	35.490353	0.2955419	249.6495	249.6488	0.2454601
83	Bi	208.9804	23995.74	25178.06	37.354069	0.3028393	243.0503	243.0497	0.2526629
84	Po	209	24592.13	25835.47	38.306499	0.3064880	239.8628	239.8621	0.2590815
85	At	210	25196.41	26503.22	39.272778	0.3101366	236.7464	236.7457	0.2643524
86	Rn	222	25808.60	27181.43	40.253011	0.3137853	233.6986	233.6980	0.2563022
87	Fr	223	26428.75	27870.18	41.247290	0.3174340	230.7171	230.7165	0.2614557
88	Ra	226	27056.87	28569.59	42.255728	0.3210827	227.7997	227.7991	0.2642923
89	Ac	227	27693.00	29279.77	43.278430	0.3247314	224.9441	224.9435	0.2694968
90	Th	232.0377	28337.17	30000.84	44.315511	0.3283800	222.1482	222.1476	0.2699630
91	Pa	231.0359	28989.41	30732.90	45.367076	0.3320287	219.4101	219.4096	0.2775683
92	U	238.0289	29649.76	31476.09	46.433250	0.3356774	216.7279	216.7273	0.2757440
93	Np	237	30318.24	32230.51	47.514140	0.3393261	214.0997	214.0992	0.2833888
94	Pu	244	30994.90	32996.30	48.609875	0.3429747	211.5239	211.5234	0.2816055
95	Am	243	31679.77	33773.58	49.720569	0.3466234	208.9987	208.9982	0.2892262
96	Cm	247	32372.88	34562.48	50.846354	0.3502721	206.5225	206.5220	0.2909847
97	Bk	247	33074.27	35363.13	51.987353	0.3539208	204.0939	204.0934	0.2975151
98	Cf	251	33783.98	36175.67	53.143701	0.3575694	201.7113	201.7109	0.2992856
99	Es	252	34502.03	37000.23	54.315527	0.3612181	199.3734	199.3729	0.3046715
100	Fm	257	35228.48	37836.97	55.502972	0.3648668	197.0787	197.0783	0.3052745
101	Md	258	35963.36	38686.01	56.706170	0.3685155	194.8261	194.8256	0.3106838
102	No	259	36706.70	39547.51	57.925266	0.3721641	192.6141	192.6137	0.3161381
103	Lr	26 2	37458.55	40421.63	59.160405	0.3758128	190.4417	190.4413	0.3191819
104	Rf	267	38218.95	41308.51	60.411738	0.3794615	188.3077	188.3073	0.3198289
105	Db	270	38987.94	42208.32	61.679412	0.3831102	186.2109	186.2105	0.3229118
106	Sg	269	39765.56	43121.21	62.963581	0.3867588	184.1503	184.1499	0.3308612
107	Bh	270	40551.86	44047.35	64.264407	0.3904075	182.1249	182.1245	0.3364464
108	Hs	270	41346.87	44986.92	65.582051	0.3940562	180.1336	180.1332	0.3433455
109	Mt	278	42150.65	45940.08	66.916684	0.3977049	178.1756	178.1752	0.3402498
110	Ds	281	42963.23	46907.02	68.268465	0.4013535	176.2498	176.2494	0.3434171
111	Rg	281	43784.67	47887.90	69.637570	0.4050022	174.3554	174.3550	0.3503049
112	Cn	285	44615.01	48882.93	71.024180	0.4086509	172.4916	172.4912	0.3522653
113	Nh	286	45454.29	49892.29	72.428469	0.4122996	170.6574	170.6571	0.3579746
114	Fl	289	46302.57	50916.17	73.850628	0.4159482	168.8522	168.8518	0.3612145
115	Mc	289	47159.90	51954.77	75.290840	0.4195969	167.0751	167.0748	0.3682595
116	Lv	293	48026.33	53008.30	76.749304	0.4232456	165.3254	165.3251	0.3702678
117	Ts	293	48901.90	54076.97	78.226211	0.4268942	163.6024	163.6020	0.3773937
118	Og	294	49786.67	55160.98	79.721767	0.4305429	161.9053	161.9050	0.3833011

Рукопись поступила 2 марта 2023 г.

Препринт отпечатан с оригинала-макета, подготовленного авторами.

Соколов С.Н.

Релятивистская механическая модель для одноэлектронных ионов.

Оригинал-макет подготовлен с помощью системы **L_AT_EX**.

Подписано к печати 13.03.2023 Формат 60 × 84/16. Цифровая печать.
Печ.л. 1,1. Уч.-изд.л. 1,4. Тираж 60. Заказ 4. Индекс 3649.

НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ
142281, Московская область, г. Протвино, пл. Науки, 1

www.ihep.ru; библиотека <http://web.ihep.su/library/pubs/all-w.htm>

Индекс 3649

ПРЕПРИНТ 2023-3,
НИЦ «Курчатовский институт» – ИФВЭ, 2023
