о зависимости электронных энергий связи в свободных ионах от заряда ядра и степени ионизации

Шпатаковская Г.В.

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва, Россия,   
[shpagalya@yandex.ru](mailto:shpagalya@yandex.ru)

В работе [1] по образцу, полученному в квазиклассическом приближении [2, 3] в модели Томаса-Ферми (ТФ), был проведен анализ экспериментальных и теоретических электронных спектров во всех атомах периодической системы от неона до урана. В результате была установлена упорядоченность электронных уровней в заполненных оболочках, проявля­ющаяся в их подобии по атомному но­ме­ру. Эта упорядоченность выражается в возможности выделения двух универсальных функций , через которые можно оценивать уровни энергии электронов в произвольном атоме:

 (1)

В настоящей работе зависимость от атомного номера энергий связи электронов исследуется в свободных положительных ионах. Электронные уровни в ионах рассматриваются в модели ТФ с использованием условия Бора-Зоммерфельда как в работах [2, 3]. В модели ТФ для ионов универсальная функция  зависит от параметра — степени иониза­ции , где z — заряд иона, Z — заряд ядра. В результате для энергий связи в ионах сохраняется вид соотношения (1), но входящие в него функции приобретают зависимость от степени ионизации: . Анализ семейства этих функций для значений  показывает, что уровни энергии s-состояний в заполненных оболочках ионов сохраняют подобие по атомному номеру, а также имеют скейлинг по степени ионизации. Последний проявляется в наличии общего участка у кривых  для разных .

Для поиска подобных закономерностей в более совершенных квантово­меха­нических моделях используются данные расчетов энергий связи  в свободных ионах до бария включительно по модели MCDF [5]. Показано, что полученные для уровней в заполненных оболочках ионов пары чисел  и  образуют функциональные зависимости, т.е. проявляют в определенной степени свойство подобия. Это свойство предлагается использовать для оценки энергий связи в ионах в качестве начального приближения в более точных расчетах.

Эта работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (project no. 17-01-00207).

Литература

1. Карпов В.Я., Шпатаковская Г.В. О подобии по атомному номеру электронных энергий связи заполненных оболочек элементов периодической системы. ЖЭТФ **151**, вып.2 (2017) (в печати)
2. Карпов В.Я., Шпатаковская Г.В., Квазиклассический расчет электронных спектров в атомах на основе двух универсальных функций. Сб. тезисов докл. XLIII Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС, 8 – 12 февраля 2016 г., с.196
3. G.V.Shpatakovskaya and V.Ya.Karpov, Atomic number scaling in the free atoms. Journal of Physics: Conference Series, ELBRUS-2016 (in print)
4. <http://www.dreebit.com/tl_files/dreebit_metro/images/dreebit/downloads/tutorial_electron_binding_energies2.pdf>