Анализ релятивистских эффектов в электронных энергиях связи многоэлектронных атомов

Шпатаковская Г.В.

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

Исследуются полученные в эксперименте и в релятивистских расчетах электронные энергии связи в средних и тяжелых атомах (). На основе обнаруженного в [1],[2] скейлинга по атомному номеру предложен метод одновременного анализа и представления энергий связи электронов  в большом числе атомов. Скейлинг позволяет свести описание всей совокупности данных по электронным энергиям связи любого числа элементов к представлению двух функций . Здесь , а соответствующие величины  вычисляются по следующему алгоритму:



Пары чисел  для всех рассмотренных атомов () и всех *n* образуют в области энергий заполненных оболочек () приближенно общую зависимость , причем релятивистские эффекты мало влияют на эту зависимость, не меняя ее однозначный монотонно убывающий характер в этой области. Аналогично ведет себя и функция , если релятивистские эффекты малы, т.е. для элементов . Однако в тяжелых атомах однозначный характер функции  пропадает: имеет место видимое разветвление значений  для разных *l*, а для каждого *l* еще и раздвоение за счет спин-орбитального взаимодействия. При этом наглядно проявляется рост влияния релятивистских эффектов с ростом атомного номера, но все зависимости от  сохраняют непрерывный гладкий характер и ложатся на соответствующую зависимость для инертных газов. Эту закономерность можно использовать, например, для верификации новых данных или для восстановления недостающей информации об энергиях в соседних атомах.

Литература.

1. Shpatakovskaya G.V. and Karpov V.Ya. J. Phys.: Conf. Ser. **774**, 012002 (2016)
2. Карпов В.Я., Шпатаковская Г.В. ЖЭТФ, 2017, **151**, 435