Закономерности в порядке заполнения электронных оболочек в переходных металлах [[1]](#footnote-1)\*)

Г.В. Шпатаковская

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

Экспериментальные [1], [2] и теоретические [3] данные по электронным энергиям в основном состоянии атомов в трех группах переходных металлов, железа (*n* = 3), палладия (*n*= 4), платины (*n* = 5), рассмотрены в специальных приведенных координатах [4]:

,

где Z – атомный номер элемента, *n, l, j = l* ±1/2 – квантовые числа.

Отмечается разброс измерений энергий связи в разных источниках и почти полное отсутствие экспери­ментальных данных по энергиям *d*-состояний в этих группах. Обсуждается расхождение результатов измерений и расчетов [3] релятивистским методом локального функционала плотности RLDA (см. рис.1a, 1b). Для оценки экспериментальных электронных энергий связи предлагается использовать эмпирический закон подобия по атомному номеру [5] и полиномиальную аппрокси­мацию функций .

|  |  |
| --- | --- |
| Pd_Expt | Pd_RLDA |
| Рис.1a Экспериментальная зависимость по данным из баз [1], [2] | Рис.1b Расчет по релятивистской модели функционала плотности RLDA [3] |

Литература

1. A. Tompson et al, X-RAY DATA BOOKLET, Center for X-ray Optics and Advanced Light Source (Lawrence Berkeley National Laboratory, update October 2009). <http://xdb.lbl.gov/>
2. Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J., and NIST ASD Team (2019). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.7.1): <https://physics.nist.gov/asd>
3. S. Kotochigova, Z.H. Levine, E.L. Shirley, M.D. Stiles, and Ch.W.~Clark, Atomic Reference Data for Electronic Structure Calculations. <http://www.nist.gov/pml/data/dftdata/index.cfm>
4. Г.В. Шпатаковская, УФН, **189**, 195 (2019)
5. Г.В. Шпатаковская, ЖЭТФ, **158**, 430 (2020)
1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLVIII/Lt/en/EB-Shpatakovskaya_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)