

СРАВНЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ЭНЕРГИЙ СВЯЗИ В ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧКАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ГРУППЫ ПАЛЛАДИЯ

Шпатаковская Г.В.

ИПМ РАН, Москва, Россия

shpagalya@yandex.ru

Рассмотрены экспериментальные [1], [2] и теоретические [3] данные по электронным энергиям связи $|E_{nlj}^{(Z)}|$ в N оболочках ($n = 4$) в основном состоянии переходных металлов группы палладия. Для компактного представления данных используются специальные приведенные координаты [4]:

$$\sigma_n = \pi n Z^{-1/3}; \quad (1)$$

$$e_n = E_{n0}^{(Z)} Z^{-4/3}, \quad l = 0; \quad (2)$$

$$d_{nlj} = \left(E_{nlj}^{(Z)} - E_{n0}^{(Z)} \right) Z^{-2/3} (l + 1/2)^{-2}, \quad l > 0. \quad (3)$$

Здесь $E_{nlj}^{(Z)}$ – уровни энергии электронов с учетом спин-орбитального взаимодействия, Z – атомный номер, $n, l, j = l \mp 1/2$ – квантовые числа.

Отмечается разброс измерений 4p-энергий связи в разных источниках и почти полное отсутствие экспериментальных данных по энергиям 4d-состояний в этих элементах. Обсуждается также расхождение результатов измерений и расчетов [3] методом локального функционала плотности. Для оценки и корректировки измерений электронных энергий связи предлагается использовать эмпирический закон подобия по атомному номеру [5].

-
1. Tompson A 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. Kotochigova S., Levine Z.H., Shirley E.L., Stiles M.D., and Clark Ch.W., Atomic Reference Data for Electronic Structure Calculations. <http://www.nist.gov/pml/data/dftdata/index.cfm>
 4. Шпатаковская Г.В. // УФН. 2019. Т. 189. № 2. С. 195
 5. Шпатаковская Г.В. // ЖЭТФ. 2020. Т. 158. № 3. С. 430