

ЗАВИСИМОСТЬ ОТ АТОМНОГО НОМЕРА Z УСЛОВИЙ ПРИМЕНИМОСТИ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ НА ПРИМЕРЕ ПОТЕНЦИАЛОВ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ И ИОНОВ

Шпатаковская Г.В.

ИПМ РАН, Москва, Россия

shpagalya@yandex.ru

Квазиклассический анализ и полиномиальная аппроксимация экспериментальных и расчетных данных по потенциалам ионизации в основном состоянии многозарядных ионов средних [1], тяжелых [2] и сверхтяжелых [3] элементов, представленных в таблицах NIST, были проведены в работах [1-3]. Аппроксимация воспроизводит данные из таблиц NIST с точностью 1-2%.

Сравнение результатов для сверхвысоких атомных номеров с результатами для высоких и средних Z показывает, что общая закономерность становится проще и прозрачнее с увеличением Z . Во-первых, степень интерполяционных полиномов в изоэлектронных последовательностях уменьшается с 3-2 до 2-1, во-вторых, водородоподобное заполнение внешней электронной оболочки становится более очевидным, в-третьих, количество таблиц полиномиальных коэффициентов уменьшается с пяти для средних до двух для сверхвысоких, хотя количество электронов увеличивается.

Другим примером использования квазиклассического подхода является полиномиальная аппроксимация потенциалов ионизации атомов лантанидов и актинидов [4]. Здесь зависимость потенциалов ионизации от атомного номера также значительно упрощается для более тяжелых гомологов актинидов в случае последовательного заполнения в них внешних оболочек.

Таким образом подтверждается улучшение условий применимости квазиклассического приближения, предсказываемое теорией: уменьшение квазиклассического параметра с увеличением атомного номера $\sim Z^{-1/3}$. Это позволяет оценивать некоторые атомные характеристики для сверхтяжелых элементов при отсутствии измеренных или расчетных данных о них.

-
1. Шпатаковская Г. В. //ЖЭТФ. 2022. V. 62. P. 205
 2. Шпатаковская Г. В. //Письма в ЖЭТФ. 2021. V. 114. P. 798
 3. Шпатаковская Г. В. //Физика плазмы. 2023. V. 49. P. 1016
 4. Шпатаковская Г. В. //Письма в ЖЭТФ. V. 111. P. 526