

ХАРАКТЕРИСТИКИ АТОМА И ПЕРВОГО ИОНА F-МЕТАЛЛОВ

Шпатаковская Г.В.

ИПМ РАН, Москва, Россия

shpagalya@yandex.ru

На основе экспериментальных и теоретических данных обсуждаются соотношения [1] между размером атомной системы, ее потенциалом ионизации и поляризуемостью, их зависимость от атомного номера для атомов и первых ионов в двух группах гомологов - лантаноидах и актиноидах.

Работа продолжает исследование, начатое в [2] для атомов этих элементов. В ней было показано, что для атомов с водородоподобным заполнением f-состояний возможны простые достаточно точные аппроксимации, связывающие поляризуемость и потенциал ионизации в обеих группах, поляризуемость и атомный номер для актиноидов. Для тяжелых актиноидов со степенью окисления +3 предсказаны значения атомных объемов (в атомных единицах): фермия $V_a \simeq 183$, менделевия $V_a \simeq 181$ и нобелия $V_a \simeq 179$.

Для однозарядных ионов используются расчеты радиуса максимальной плотности R_{max} [3] на основе многоконfigurационной модели Дирака-Фока (MCDF) с учетом многих тонких эффектов. Рассматриваются зависимости потенциала ионизации и радиуса иона R_{max} от атомного номера, для обеих групп проверяется соотношение $R_{max} \simeq I_p^{-1}$, предложенное в [1].

-
1. Dmitrieva I. K., Plindov G. I. //J Appl Spectrosc, 1986. V. 44, pp. 4.
 2. Шпатаковская Г. В. //Математ. моделирование, 2025 (in print).
 3. Indelicato P., Santos J. P., Boucard S., Desclaux J. P. //The European Physical Journal D : Atomic, molecular, optical and plasma physics, 2007. V. 45 (1), pp.155-170.