

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.184

DOI: 10.17223/00213411/62/12/185

Д.К. ЕРШОВ

СКЕЙЛИНГ ПАРАМЕТРА ВЗАИМНОЙ ЭКРАНИРОВКИ ЗАРЯДА ЯДРА ДЛЯ ВАЛЕНТНЫХ ns^2 -ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМАХ СРЕДНИХ И ТЯЖЕЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Ключевые слова: энергии ионизации, параметр экранировки, скейлинг параметра взаимной экранировки.

1. Исследование электронной структуры валентных оболочек атомов представляет значительный практический и теоретический интерес, поскольку энергетический спектр этих оболочек определяет основные химические свойства соответствующих элементов и соединений, а теоретическое исследование позволяет оценить степень точности квантово-механических расчетов каких-то физических характеристик атомов и ионов и экспериментально наблюдаемых значений этих величин [1].

Следует также отметить, что точность спектроскопических данных в атомной физике постоянно возрастает, и это требует дальнейшего развития расчетного аппарата теории, учета все более тонких эффектов внутриатомной квантовой динамики.

2. В многоэлектронном атоме конкретный электрон находится в поле ядра и взаимодействует со всеми остальными электронами. Это позволяет использовать весьма плодотворную концепцию самосогласованного поля, в котором движется данный электрон.

Но даже такую упрощенную задачу для каждого атома приходится решать отдельно. Один из простейших вариантов метода самосогласованного поля – использование эффективного заряда ядра $Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$, где Z – номинальный заряд ядра, σ – параметр экранировки, который учитывает результирующее действие на данный электрон всех остальных, причем учитывается не только электростатическое взаимодействие.

Что касается релятивистских эффектов, то считают, что они должны проявляться после $Z > 30$, причем различают [2, 3] прямые (direct), т.е. чисто кинематические, и не прямые (indirect), приводящие к спин-орбитальному расщеплению уровней энергии электронов.

Внешние электроны являются нерелятивистскими, но поскольку полная электронная оболочка атома представляет собой единую систему, то релятивизм внутренних электронов косвенным образом отражается и на свойствах внешних электронных слоев.

3. В данной работе мы вычисляем параметр экранировки σ для внешних ns -оболочек, используя нерелятивистскую формулу для энергии электрона [4]:

$$\varepsilon = 13.6(Z - \sigma)^2/n^2 \text{ [эВ]}. \quad (1)$$

Кроме того, в s -оболочке может находиться только два электрона, которые дополнительно взаимно экранируют заряд ядра, внося вклад в параметр экранировки σ .

Целью данной работы является исследование эффектов экранировки для внешних ns^2 -оболочек.

Из формулы (1) легко получить выражение для параметра экранировки

$$\sigma = Z - n\sqrt{\varepsilon/13.6}, \quad (2)$$

что позволяет по экспериментальным данным для ε [5] вычислить параметры σ .

В таблице приведены значения σ и $\Delta\sigma = \sigma(ns^2) - \sigma(ns)$ – разность значений параметров экранировки.

Z	ns^2	ε , эВ	Z_{eff}	σ	$\Delta\sigma$	$\Delta\sigma (n^2/Z_{\text{eff}})^{1/3}$
3	$2s$	5.392		1.741		
4	$2s^2$	9.323	1.656	2.344	0.603	0.810
11	$3s$	5.139		9.156		
12	$3s^2$	7.646	2.249	9.751	0.595	0.944
19	$4s$	4.341		16.740		
20	$4s^2$	6.113	2.682	17.318	0.578	1.0481
37	$5s$	4.177		34.229		
38	$5s^2$	5.695	3.236	34.764	0.535	1.0587
55	$6s$	3.894		51.790		
56	$6s^2$	5.212	3.714	52.286	0.596	1.0594
87	$7s$	4.073		83.169		
88	$7s^2$	5.278	4.361	83.639	0.470	1.0520

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>