Учет ОБОЛОЧЕЧНЫХ ЭФФЕКТОВ в статистической модели свободных ионов

В.Я. Карпов, \*Г.В. Шпатаковская

ИНЭУМ им. И.С. Брука, Москва, Россия, u1327@rambler.ru
\*ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия, shpagalya@yandex.ru

Квазиклассический метод на основе статистической модели Томаса-Ферми применяется к исследованию характеристик свободных положительных ионов. Предложен эффективный способ учета дискретности электронного спектра и вычисления оболочечной поправки к числу состояний по статистической модели в случае сильной нерегулярности поправки. В применении к вычислению потенциалов ионизации свободных ионов такой подход позволяет описать их "пилообразную" зависимость от заряда иона и существенно улучшает результаты статистической модели в описании экспериментальных данных.

Оболочечные эффекты связаны с дискретностью спектра связанных электронов в атомных системах (атоме, ионе, атомной ячейке вещества). В работах [1], [2] одного из авторов эти эффекты были успешно учтены при расчете потенциалов ионизации ионов в статистической модели высокотемпературной плазмы. Использованный при этом квазиклассический метод основывался на предположении о плавном изменении физических величин за счет оболочечных эффектов. Однако при нулевой температуре это предположение не является оправданным. Для проявления оболочечных эффектов в этом случае характерны резкие зависимости. Например, пилообразная, как у зависимости атомных потенциалов ионизации от атомного номера, ионных ионизационных потенциалов ̶ от заряда иона, или касповидные, как у кривой атомных объемов [3].

В настоящей работе предложено обобщение квазиклассического метода, снимающее указанное ограничение. Вычисленные обобщенным методом потенциалы ионизации ионов отражают упомянутые выше резкие зависимости и оказываются существенно ближе к экспериментальным значениям.

Литература

1. Г.В. Шпатаковская, УФН, **182**, 457 (2012)
2. Галина Шпатаковская, Квазиклассический метод в задачах квантовой физики. (LAP LAMBERT Academic Publishing GmbH, 2012) , ISBN 978-3-8465-2681-1
3. Д.А. Киржниц, Ю.Е. Лозовик, Г.В. Шпатаковская, УФН **111** 3 (1975)