квазиклассический расчет электронных спектров в атомах на основе двух универсальных функций

В.Я. Карпов1, Г.В. Шпатаковская2

1Институт электронных управляющих машин им. И.С. Брука, г. Москва, Россия,
 u1327@rambler.ru
2Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва, Россия,
 shpagalya@yandex.ru

В работе [1] одного из авторов (см. также обзоры [2, 3]) исследовались особенности электронных спектров в системах с центральным самосогласованным потенциалом притяжения, в частности с потенциалом, имеющим в нуле кулоновскую особенность. Как известно, экранирование кулоновского потенциала приводит к снятию вырождения по орбитальному квантовому числу . В [1] было показано, что при этом отклонение уровня  от энергии *s* — уровня  квадратично зависит от величины  (— главное квантовое число). Кроме того, анализ атомных спектров тяжелых элементов, рассчитанных по нерелятивистской модели Хартри-Фока, показал, что такая зависимость имеет место даже при не малых . Это дало основание для предлагаемого в данной работе метода расчета электронных спектров в атомах.

Квазиклассическое приближение применяется к расчету электронного спектра свободного атома. Используется свойство подобия по атомному номеру в модели Томаса-Ферми (ТФ) и квазиклассическое условие квантования Бора-Зоммерфельда. В области справедливости квадратичной зависимости уровней энергии от орбитального момента оказывается возможным вычислять спектр любого элемента в потенциале ТФ на основе двух универсальных функций, рассчитанных для водорода (атомный номер ). Одна из этих функций  — это зависимость действия от энергии электрона в *s*-состоянии.

Сначала вычисляется энергия *s* — уровня из условия

  , (1)

а затем используется квадратичная формула для вычисления других уровней энергии

  (2)

Приводится алгоритм вычисления функции , соответствующие таблицы и графики обеих функций. Проведено сравнение с результатами расчета спектра  непосредственно из условия квантования Бора-Зоммерфельда и с результатами нерелятивистской модели Хартри-Фока.

Данная работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (project no. 14-01-00828).

Литература

1. Шпатаковская Г.В. Письма в ЖЭТФ, 2001, **73**, 306.
2. Шпатаковская Г.В. УФН, 2012, **182**, 457.
3. Шпатаковская Галина, Квазиклассический метод в задачах квантовой физики. (LAP LAMBERT Academic Publishing GmbH, 2012) , ISBN 978-3-8465-2681-1 (на русск. яз.)