

О ЗАПОЛНЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК СЖАТЫХ АТОМОВ  
В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

С.В.Измайлов, Г.А.Шульман

Статистическое рассмотрение электронов атома позволяет достаточно просто показать, что при высоких давлениях электроны с данным квантовым числом  $\ell$  впервые могут появиться у элементов,

порядковые номера которых меньше порядковых номеров менделеевской периодичности.

В простой модели Томаса-Ферми (Т-Ф) решение задачи удобнее всего провести с помощью вариационного метода Ленца-Йенсена<sup>[1]</sup>, поскольку имеющиеся решения уравнения Т-Ф для сжатого атома<sup>[2]</sup> не позволяют непрерывно изменять его радиус. В модели же с учетом квантовых поправок<sup>[3]</sup> общее решение задачи возможно только с помощью вариационного метода. В силу условия нормировки для сжатого атома функций распределения плотности электронов  $\rho$  можно выбрать лишь в нулевом приближении.

В модели Т-Ф для сжатого атома

$$\rho = \frac{Z \lambda^3}{16\pi} \frac{e^{-\Lambda}}{\Lambda^3 (1-\gamma)}, \quad (1)$$

где  $\Lambda = (\lambda R)^{3/2}$ ,  $\lambda$  - вариационный параметр, определяемый из условия минимума полной энергии оболочки атома,  $\gamma = (1 + \Lambda + \Lambda^2/2) e^{-\Lambda}$  - поправочный член,  $Z$  - порядковый номер элемента.

Исходя из упрощенного условия Зомерфельда<sup>[4]</sup>, можно показать, что для сжатого атома первое появление  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -,  $f$ - электронов будет определяться формулой

$$Z_\ell = 1,26 (1-\gamma) \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^3. \quad (2)$$

Множитель  $(1-\gamma)$  в формуле (2) с увеличением давления будет уменьшаться и, следовательно, вместе с ним уменьшается порядковый номер элемента  $Z$ , у которого впервые появляются электроны с данным квантовым числом  $\ell$ . Определение множителя  $(1-\gamma)$ , а значит и параметра  $\Lambda$  легко произвести.

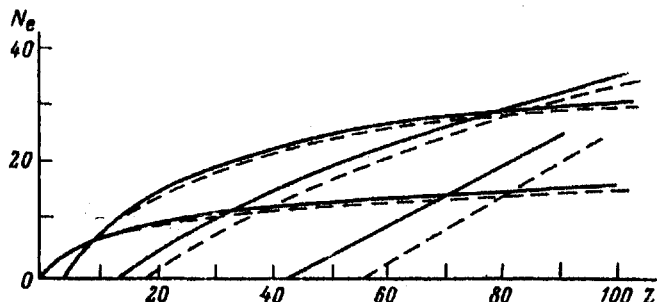
Следуя Ферми<sup>[5]</sup>, можно показать, что образование электронных групп в сжатом атоме существенно зависит от давления и определяется с помощью следующего соотношения:

$$N_\ell = \frac{2,13 Z^{1/3} \left(\ell + \frac{1}{2}\right)}{(1-\gamma)^{1/3}} \int_{x_1}^{x_2} \left[ e^{-2/3 x} x^2 - \alpha \right]^{1/2} \frac{dx}{x}, \quad (3)$$

где

$$\alpha = \left(\frac{16}{3\pi Z}\right)^{2/3} (1-\gamma) \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2.$$

Результаты расчета для  $\Lambda = \infty$  ( $P=0$ ) и  $\Lambda = 4$  ( $P = 2,37 \cdot 10^2 Z^{10/3}$  атм) изображены, соответственно, пунктирными и сплошными линиями на рисунке. Из рисунка видно, что число  $d$ - и  $f$ - электронов значительно увеличивается в атомах с повышением давления и появляются также  $g$ - электроны; число же  $s$ - и  $p$ - электронов увеличивается очень мало. Из рисунка следует



также, что первое появление электронов с данным квантовым числом смещается в сторону элементов, порядковые номера которых меньше порядковых номеров менделеевской периодичности.

Аналогичный расчет для сжатого атома был проведен в статистической модели с учетом квантовых поправок [3], имеющих один и тот же порядок величины. В этой модели функцию плотности электронов необходимо выбрать в виде

$$\rho = \frac{Z \lambda'^3}{20\pi \cdot 141} \frac{e^{-\Lambda'}}{(1-\gamma')^4}, \quad \Lambda' = (\lambda' R)^{4/5} \quad (4)$$

$$\gamma' = e^{-\Lambda'} \sum_{k=0}^{14} \frac{\Lambda'^k}{k!}.$$

Для  $Z_e$  и  $N_e$  получены следующие соотношения:

$$Z_e = 1,38 (1-\gamma') \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^3, \quad (5)$$

$$N_e = \frac{1,12 Z^{4/3} \left(\ell + \frac{1}{2}\right)}{10^3 (1-\gamma')^{4/3}} \int_{x_i'}^{x_2'} \left[ e^{-2/3 x'} x'^{10-\alpha'} \right] \frac{dx'}{x'}, \quad (6)$$

$$\alpha' = \left( \frac{10 \cdot 141}{3\pi Z} \right)^{2/3} (1-\gamma')^{2/3} \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2.$$

В модели с поправками зависимость энергии оболочки атома от радиуса такова, что возможно говорить о его конечных размерах при отсутствии давления. Это приводит к тому, что у ряда элементов не представляется возможным определить давления, при которых впервые появляются электроны с данным квантовым числом. Зависимость же  $N_e$  от давления такая же, как и в модели Т-Ф.

В таблице для ряда элементов приведены рассчитанные давления в модели Т-Ф и в модели с квантовыми поправками.

Элемент	Порядковый номер	Первое появление электрона с числом	Давление в атмосферах	
			модель Т-Ф	модель с поправками
K	19	2	$1,57 \cdot 10^5$	-
Ca	20	2	$1,91 \cdot 10^4$	-
Sn	50	3	$1,54 \cdot 10^7$	$1,03 \cdot 10^7$
Te	52	3	$6,32 \cdot 10^6$	$2,08 \cdot 10^6$
Ba	56	3	$1,57 \cdot 10^5$	$3,17 \cdot 10^3$

Приносим благодарность И.В.Ширмановой, В.Т.Александрову и Г.Г.Гурбанову за программирование и помощь в вычислениях.

Ленинградский государственный  
педагогический институт  
им. А.И.Герцена

Поступило в редакцию  
II июня 1965 г.

#### Литература

- [1] H. Lenz. Z. f. Physik, 77, 722, 1932;  
w. Lenz. Z. f. Physik, 77, 713, 1932.
- [2] J. Slater, H. Krutter. Phys. Rev., 47, 559, 1935.
- [3] А.С.Компанеец, Е.С.Павловский. ЖЭТФ, 31, 427, 1956;  
Д.А.Киржниц. Труды ФИАН, 16, 3, 1961;  
S. Golden. Phys. Rev., 105, 604, 1957.
- [4] А. Зоммерфельд. Строение атомов и спектры, т. II, 1956.
- [5] E. Fermi. Z. f. Physik, 48, 73, 1928.