

## РАСЧЕТ ЭНЕРГИЙ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ В ПРИБЛИЖЕНИИ ТОМАСА - ФЕРМИ

Предложен метод для расчета энергий уровней для многоэлектронных нейтральных атомов. В этом случае помимо кулоновского поля ядра существенный вклад в энергию вносит взаимодействие между электронами. Это взаимодействие учитывается приближенно с помощью теории возмущений в рамках статистической модели Томаса - Ферми. Используя приближение Тейтца для среднего потенциала, получены аналитические выражения для энергий s-состояний с главными квантовыми числами  $n = 1, 2, 3, 4$ . Проведен расчет энергий для зарядов ядер в интервале  $1 < Z \leq 100$ . Получено хорошее согласие с экспериментальными значениями энергий.

*Ключевые слова:* энергии атомных уровней, модель Томаса - Ферми, теория возмущений.

### Введение

Хорошо известно, что водородоподобное приближение [1] для расчета энергий уровней в случае многоэлектронных атомов является неудовлетворительным, поскольку на каждый электрон воздействует не только поле ядра, но также поле всех остальных электронов атомной оболочки. Это взаимодействие оказывается существенным, особенно для тяжелых атомов. Поэтому расчет энергий уровней для атомов с большим зарядом является достаточно трудоемкой задачей. Решается она, как правило, с помощью различных численных методов, из которых можно выделить два основных: приближение самосогласованного поля [2 - 5] и метод функционала плотности [6 - 9]. Кроме того для решения многоэлектронной задачи применялись методы R-матрицы [10] и приближение сильной связи [11]. Для вычислений с большой точностью требуется учитывать релятивистские эффекты, влияние размеров и формы ядра, а также радиационные поправки. Приближение Томаса - Ферми также использовалось для определения спектра нейтральных атомов и ионов [12]. В работе [13] из уравнения Шредингера определялись энергии атомных уровней для потенциалов Томаса - Ферми и Томаса - Ферми - Дирака и было предложено использовать теорию возмущений для вычисления поправок к энергиям и волновым функциям. В работе [14], используя условия квантования Бора - Зоммерфельда, в модели Томаса - Ферми получено выражение для энергии связи электронов в основном состоянии атома. По-прежнему актуальными остаются учет в этой модели корреляционных и обменных эффектов, градиентных и оболочечных поправок.

Ниже рассматривается простой подход, который позволяет вычислить энергии уровней нейтральных атомов приближенно, но с достаточно

хорошей точностью. При этом для определения среднего потенциала, действующего на каждый электрон, используется метод Томаса - Ферми [15, 16], в котором учитывается вклад как кулоновского поля ядра, так и поля всех остальных электронов атома. Используя разницу между средним полем и кулоновским полем ядра как возмущение, можно найти поправки к энергиям атомных уровней, а приближение Тейтца позволяет получить выражения для энергий в аналитическом виде.

Использование теории возмущений, а также приближенный характер метода Томаса - Ферми ограничивают точность проводимых расчетов. Однако в предлагаемом подходе были получены достаточно простые аналитические выражения для энергий атомных уровней, что является существенным преимуществом в сравнении с другими подходами, требующими громоздких вычислений.

### Энергии атомных уровней в приближении Томаса - Ферми

Потенциал, определяющий в подходе Томаса - Ферми совместное действие на электрон кулоновского поля ядра с зарядом  $Z$  и остальных электронов атомной оболочки, имеет следующий вид [12, 13] ( $\hbar = c = 1$ ):

$$V_{TF}(r) = -\frac{\alpha}{r} - \frac{\alpha(Z-1)}{r} \varphi(x), \quad (1)$$

где  $\alpha$  - постоянная тонкой структуры, а функция  $\varphi(x)$  является решением уравнения Томаса - Ферми [15, 16]

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = \frac{\varphi(x)^{3/2}}{\sqrt{x}}, \quad x = \frac{r}{a}, \quad a = \left( \frac{9\pi^2}{128(Z-1)} \right)^{1/3} a_B. \quad (2)$$

Здесь  $a_B$  - борковский радиус. Уравнение (1) для потенциала  $V_{TF}(r)$  можно тождественно преобразовать как

$$V_{TF}(r) = -\frac{\alpha Z}{r} + \frac{\alpha(Z-1)}{r} [1 - \varphi(x)], \quad (3)$$

где первый член описывает кулоновское поле ядра  $V_c(r)$ , а второй можно рассматривать как поправку, обусловленную учетом взаимодействия электронов в подходе Томаса - Ферми. Этот член обозначим как

$$\Delta V(r) = \frac{\alpha(Z-1)}{r} [1 - \varphi(x)]. \quad (4)$$

Тогда добавка  $\Delta E_{nl}$  к энергии водородоподобного атома  $E_n = -Z^2/n^2 Ry$ , обусловленная потенциалом  $\Delta V(r)$  в первом порядке теории возмущений, имеет вид

$$\Delta E_{nl} = \langle nl | \Delta V(r) | nl \rangle, \quad (5)$$

где среднее вычисляется по собственным волновым функциям  $\Psi_{nl}$ , которые являются решениями уравнения Шредингера с невозмущенным кулоновским потенциалом  $V_c(r)$ . Здесь  $Ry = \alpha^2 m/2$  - ридберг,  $m$  - масса электрона, а  $n$  и  $l$  - главные и орбитальные квантовые числа соответственно.

В дальнейшем мы будем рассматривать атомы с большим зарядом ядра, а в этом случае становятся существенными релятивистские поправки к энергиям. В нижайшем порядке по  $\alpha Z$  эти поправки можно ввести следующим образом. Вместо потенциала  $V_{TF}(r)$  введем новый потенциал

$$V_{TF}^R(r) = -\frac{\alpha Z}{r} + W_R(r) + \Delta V(r). \quad (6)$$

Потенциал  $W_R(r)$  состоит из трех слагаемых, обусловленных релятивистскими эффектами для частицы со спином 1/2: поправки Дарвина [17], поправки к кинетической энергии, возникающей из-за изменения массы частиц при изменении ее скорости, и поправки за счет спин-орбитального взаимодействия [18]. В этом случае поправки к энергиям состояний водородоподобного атома  $E_n$ , которые обусловлены отличием полного потенциала  $V_{TF}^R(r)$  от кулоновского  $V_c(r)$ , определяются следующим образом:

$$\Delta E_{nj}^R = \langle nl | W_R(r) + \Delta V(r) | nl \rangle = \langle nl | W_R(r) | nl \rangle + \Delta E_{nl}. \quad (7)$$

Матричный элемент от потенциала  $W_R(r)$  в уравнении (7) по волновым функциям  $\Psi_{nl}$  имеет вид [18, 19]

$$\langle nl | W_R(r) | nl \rangle = -\frac{\alpha^2 Z^4}{n^4} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) Ry, \quad (8)$$

где  $j$  - полный угловой момент электрона. Сумма энергии  $E_n$  и поправки (8) равна

$$E_{nj}^R = -\left[ \frac{Z^2}{n^2} + \frac{\alpha^2 Z^4}{n^4} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] Ry. \quad (9)$$

Эта энергия в точности совпадает с энергией связи электрона, которая является решением релятивистского уравнения Дирака при разложении ее в ряд по  $\alpha Z$  до членов порядка  $(\alpha Z)^4$  [18]. Таким образом, окончательное выражение для энергии с учетом релятивистских поправок выглядит как

$$E_{nj} = E_{nj}^R + \Delta E_{nl}, \quad (10)$$

где  $E_{nj}^R$  и  $\Delta E_{nl}$  задаются выражениями (9) и (5) соответственно.

### Вычисление энергий для s-состояний

Вычислим поправки к энергии  $\Delta E_{nl}$  (5) для s-состояний (с орбитальным моментом  $l=0$ ) и различных квантовых чисел  $n$ . Волновая функция  $\Psi_{n0}(r)$  в этом случае имеет вид [1]

$$\Psi_{n0}(r) = -\frac{\eta_n^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\eta_n r}}{n n!} L_n^1(2\eta_n r), \quad (11)$$

где

$$\eta_n = \eta/n \quad \eta = Zm\alpha, \quad (12)$$

а  $L_n^1(2\eta_n r)$  - присоединенный полином Лагерра.

Для вычисления поправок  $\Delta E_{nl}$  (5) воспользуемся достаточно точной аппроксимацией  $\varphi_0(x)$  функции  $\varphi(x)$ , предложенной Тайтцем в работе [20]:

$$\varphi(x) \approx \varphi_0(x) = \frac{1}{(1+2\gamma\eta r)^2}, \quad (13)$$

где

$$\gamma = 0,30285 \frac{(Z-1)^{1/3}}{Z}. \quad (14)$$

Для матричного элемента  $\Delta E_{n0}$ , вычисленного с волновыми функциями  $\Psi_{n0}(r)$  (11) и использованием выражения (13) для  $\varphi(x)$ , получено выражение

$$\Delta E_{n0} = \frac{2Z(Z-1)}{n^3(n!)^2} J_{n0}(Z) Ry. \quad (15)$$

Функции  $J_{n0}(Z)$  в уравнении (15) имеют вид

$$J_{n0}(Z) = \int_0^\infty dy y e^{-y} (L_n^1(y))^2 \left[ 1 - \frac{1}{(1+\gamma n y)^2} \right]. \quad (16)$$

Интегралы  $J_{n0}(Z)$  (16) можно вычислить аналитически. Ниже приведены выражения для этих интегралов при различных значениях квантовых чисел  $n = 1, 2, 3, 4$ :

$$J_{10}(Z) = \frac{\gamma(1+\gamma^2) - e^{1/\gamma}(1+\gamma)\Gamma(0, 1/\gamma)}{\gamma^3}, \quad (17)$$

$$J_{20}(Z) = \frac{2\gamma(1+12\gamma+28\gamma^2+32\gamma^4) - (1+4\gamma)(1+10\gamma+8\gamma^2) e^{1/2\gamma}\Gamma(0, 1/2\gamma)}{8\gamma^5}, \quad (18)$$

$$J_{30}(Z) = \frac{1}{243\gamma^7} \left[ 3\gamma(1+48\gamma+729\gamma^2+3996\gamma^3+6318\gamma^4+8748\gamma^6) - (1+18\gamma+54\gamma^2)(1+51\gamma+864\gamma^2+5832\gamma^3+14580\gamma^4+8748\gamma^5) e^{1/3\gamma}\Gamma(0, 1/3\gamma) \right], \quad (19)$$

$$J_{40}(Z) = \frac{1}{16384\gamma^9} \left[ 4\gamma(1+120\gamma+5296\gamma^2+108032\gamma^3+1046016\gamma^4+4374528\gamma^5+5799936\gamma^6+9437184\gamma^8) - (1+124\gamma+5760\gamma^2+127488\gamma^3+1413120\gamma^4+7520256\gamma^5+16515072\gamma^6+9437184\gamma^7) \cdot e^{1/4\gamma}\Gamma(0, 1/4\gamma) \right]. \quad (20)$$

Используя эти выражения для интегралов в формуле (15), можно вычислить полные энергии атомных уровней  $E_{n1/2}$  s-состояний для широкого диапазона зарядов  $1 < Z \leq 100$ .

Результаты расчетов и их сопоставление с экспериментальными данными представлены на рис. 1 - 4 и в табл. 1 - 3 для квантовых чисел  $n = 1, 2, 3, 4$ . Здесь показаны зависимость от заряда ядра  $Z$  абсолютных значений энергий  $|E_{n1/2}|$  (10),  $|E_{n1/2}^R|$  (9) и экспериментальных значений энергий  $|E_{nEXP}|$  [21] для различных  $n$ . Ошибки измерений малы и приведены в работе [21].

На рис. 1а точками указаны вычисленные и экспериментальные значения энергий при  $n = 1$  для различных зарядов  $Z$ . Из рисунка хорошо видно, что экспериментальные значения энергий  $|E_{1EXP}|$  значительно отличаются от энергий для водородоподобного атома  $|E_{1/2}^R|$ , но очень близки к полным энергиям  $|E_{1/2}|$ .

В табл. 1 приведены значения экспериментальных энергий  $|E_{1EXP}|$  и вычисленных  $|E_{1/2}|$ , согласно определению (10), для некоторых зарядов  $Z$ .

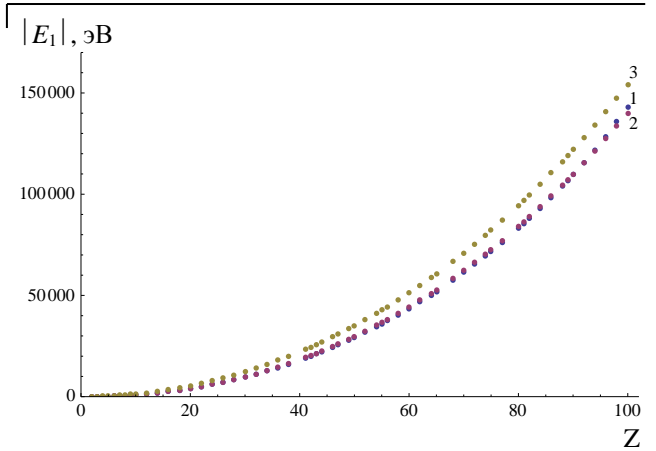
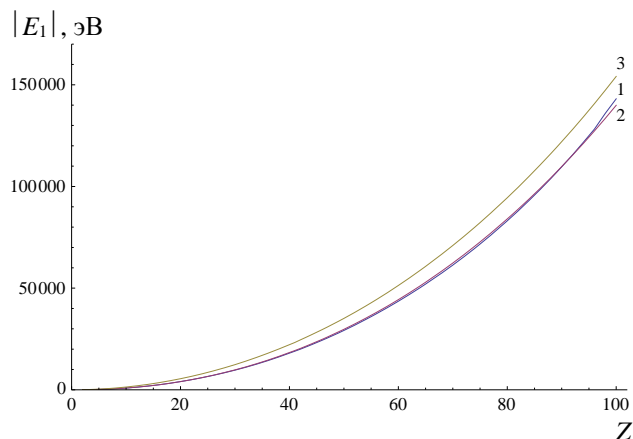
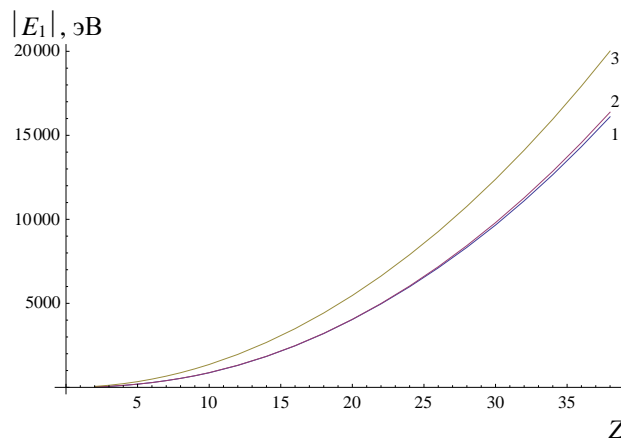


Рис. 1а. Зависимость от заряда ядра  $Z$  энергий состояний с  $n = 1$ . Энергии  $|E_{1EXP}|$  для различных зарядов обозначены цифрой 1;  $|E_{1/2}|$  - цифрой 2;  $|E_{1/2}^R|$  - цифрой 3. Значения энергий представлены в электрон-вольтах (эВ).

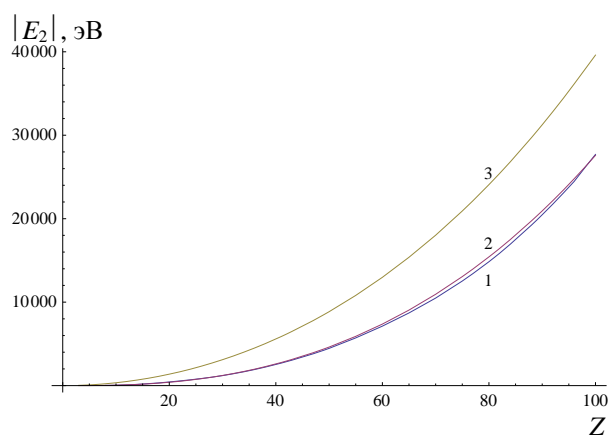
Из соображений наглядности, вместо сопоставления большого массива чисел в таблицах, мы соединили дискретные точки сплошными линиями и представили эти результаты на рис. 1б, подразумевая, что смысл имеют только те точки на кривой, которые соответствуют целочисленным зарядам  $Z$ . На рис. 1в показана часть рис. 1б в интервале зарядов  $2 \leq Z \leq 38$ .

Таблица 1. Энергии состояний (эВ) с  $n = 1$  при различных значениях заряда ядра  $Z$ 

| $Z$          | 5   | 10  | 16   | 20   | 24   | 32    | 38    | 46    | 55    | 70    | 81    | 90     |
|--------------|-----|-----|------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|
| $ E_{1/2} $  | 192 | 877 | 2481 | 4050 | 6032 | 11279 | 16380 | 24810 | 36640 | 62345 | 86428 | 109772 |
| $ E_{1EXP} $ | 188 | 867 | 2472 | 4038 | 5989 | 11103 | 16105 | 24350 | 35985 | 61332 | 85530 | 109650 |

Рис. 16. Зависимость от заряда ядра  $Z$  энергий состояний с  $n = 1$ . Энергии  $|E_{1EXP}|$  - кривая 1;  $|E_{1/2}|$  - кривая 2;  $|E_{1/2}^R|$  - кривая 3.Рис. 1в. Энергии состояний с  $n = 1$  в интервале зарядов  $2 \leq Z \leq 38$ .  $|E_{1EXP}|$  - кривая 1;  $|E_{1/2}|$  - кривая 2;  $|E_{1/2}^R|$  - кривая 3.

В процентном отношении отклонение расчетных величин от экспериментальных для достаточно больших зарядов варьируется от 0,1 до 2 %. Однако подход, основанный на простом варианте статистической модели и теории возмущений, не может претендовать на очень большую точность.

Рис. 2. Зависимость от заряда ядра  $Z$  энергий состояний с  $n = 2$ .  $|E_{2EXP}|$  - кривая 1;  $|E_{2/2}|$  - кривая 2;  $|E_{2/2}^R|$  - кривая 3.

На рис. 2 представлены результаты расчетов и экспериментальные значения энергий для состояний с  $n = 2$  в виде непрерывных кривых, соединяющих дискретные точки, а в табл. 2 приведены значения экспериментальных энергий

$|E_{2EXP}|$  и вычисленных  $|E_{2/2}|$  для некоторых зарядов  $Z$ .

На рис. 3 представлены соответствующие результаты расчетов и экспериментальные значения энергий для состояний с  $n = 3$ .

В табл. 3 приведены значения экспериментальных энергий  $|E_{3EXP}|$  и вычисленных  $|E_{3/2}|$  для некоторых зарядов  $Z$ .

На рис. 4 представлены соответствующие результаты расчетов и экспериментальные значения энергий для состояний с  $n = 4$ . Отметим, что в этом случае первый порядок теории возмущений оказывается корректным только для  $Z > 80$ , поэтому результаты представлены для достаточно больших зарядов ядер. Следует отметить как общую тенденцию, что с увеличением главного квантового числа  $n$  теория возмущений остается корректной при все больших зарядах. Поэтому эффективность ее применения ограничена при  $n \geq 5$ .

Приведенные результаты показывают, что в рассмотренном приближении удастся достаточно хорошо описать энергии атомных уровней для рассмотренных главных квантовых чисел  $n$ . В настоящий момент проводятся расчеты энергий для состояний с любым полным угловым моментом  $j$ , допустимом при фиксированном главном квантовом числе  $n$ , и они будут представлены в следующей публикации.

Таблица 2. Энергии состояний (эВ) с  $n = 2$  при различных значениях заряда ядра  $Z$

| $Z$            | 10 | 18  | 41   | 50   | 55   | 60   | 70    | 80    | 88    | 92    | 94    | 100   |
|----------------|----|-----|------|------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $ E_{2\ 1/2} $ | 49 | 293 | 2767 | 4620 | 5899 | 7371 | 10938 | 15422 | 19743 | 22169 | 23452 | 27593 |
| $ E_{2\ EXP} $ | 45 | 320 | 2697 | 4465 | 5714 | 7126 | 10486 | 14839 | 19327 | 21757 | 23097 | 27700 |

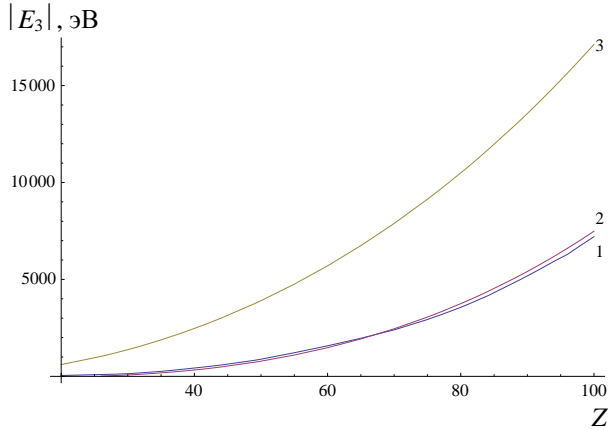


Рис. 3. Зависимость от заряда ядра  $Z$  энергий состояний с  $n = 3$ .  $|E_{3\ EXP}|$  - кривая 1;  $|E_{3\ 1/2}|$  - кривая 2;  $|E_{3\ 1/2}^R|$  - кривая 3.

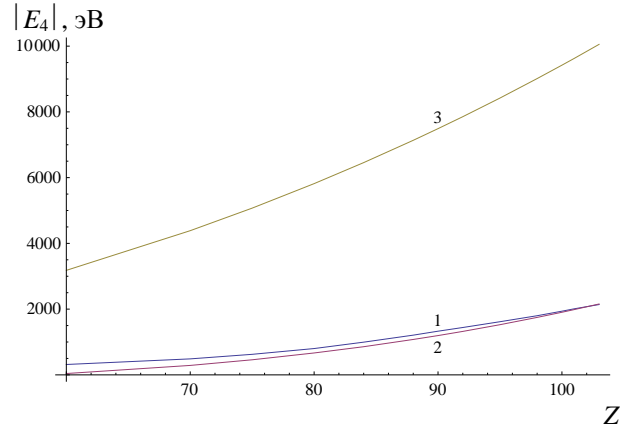


Рис. 4. Зависимость от заряда ядра  $Z$  энергий состояний с  $n = 4$ .  $|E_{4\ EXP}|$  - кривая 1;  $|E_{4\ 1/2}|$  - кривая 2;  $|E_{4\ 1/2}^R|$  - кривая 3.

Таблица 3. Энергии состояний (эВ) с  $n = 3$  при различных значениях заряда ядра  $Z$

| $Z$            | 30  | 35  | 44  | 50  | 55   | 60   | 70   | 80   | 88   | 92   | 94   | 100  |
|----------------|-----|-----|-----|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $ E_{3\ 1/2} $ | 71  | 177 | 484 | 784 | 1099 | 1479 | 2454 | 3750 | 5047 | 5791 | 6188 | 7486 |
| $ E_{3\ EXP} $ | 136 | 257 | 585 | 884 | 1217 | 1575 | 2398 | 3561 | 4822 | 5548 | 5933 | 7205 |

**Выводы**

Таким образом, использование среднего потенциала модели Томаса - Ферми, действующего на каждый электрон, позволяет приближенно учесть межэлектронное взаимодействие и достаточно хорошо описать энергии атомных уровней. При этом разница между средним полем и кулоновским полем ядра рассматривается как возмущение, с помощью которого находятся поправки к энергиям атомных уровней водородоподобного атома. Использование приближения Тейтца для среднего потенциала позволяет получить выражения для энергий в аналитическом виде. Эти энергии были вычислены для s-состояний с главными квантовыми числами  $n = 1, 2, 3, 4$  в первом порядке теории возмущений. Получены достаточно простые аналитические выражения для энергий, численное значение которых хорошо согласуется с соответствующими экспериментальными данными для большого диапазона зарядов. В процентном отношении отклонение расчетных величин от экспериментальных для достаточно больших зарядов варьируется от 0,1

до 2 % для К-оболочки. Для L- и M-оболочек согласие также хорошее, однако несколько хуже, чем для К-оболочки.

Следует отметить, что приближенный характер метода Томаса - Ферми и использование теории возмущений накладывают ограничения на точность проводимых расчетов. С ростом квантового числа  $n$  энергии уровней для водородоподобного атома  $E_{nj}^R$  (9) уменьшаются по абсолютной величине, а относительная роль поправки при этом  $\Delta E_{nl}$  возрастает. Поэтому теория возмущений в первом порядке перестает быть корректной для достаточно больших главных квантовых чисел и уже для  $n = 4$  разумные результаты получаются только для очень больших зарядов  $Z$ . Поэтому для состояний с квантовыми числами  $n \geq 4$  рассмотренная модель имеет ограниченную область применимости. Однако использование простых аналитических выражений для энергий атомных уровней избавляет от необходимости громоздких численных расчетов и позволяет проводить качественный анализ вли-

яния на величину энергий различных факторов, что является одним из преимуществ предлагаемого подхода, а учет корреляционных, обменных и других эффектов возможно увеличит точность

расчетов и расширит область его применимости.

Автор благодарит А. Я. Дзюблика за полезные дискуссии и замечания.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. H.A. Bethe, E.E. Solpeter. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atom* (Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer-Verlag, 1957) 562 p.
2. C.F. Fischer. *The Hartree-Fock Method for Atoms* (N.Y., London: John Wiley & Sons, 1977) 308 p.
3. P. Palmeri et al. Radiative and Auger Decay of K-Vacancy Levels in the Ne, Mg, Si, S, Ar, and Ca Isonuclear Sequences. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 177(1) (2008) 408.
4. D.A. Pantazis, F. Neese. All-electron scalar relativistic basis sets for the  $bp$  elements. *Theor. Chem. Acc.* 131 (2012) 1292.
5. Дж. Слэтер. *Методы самосогласованного поля в теории атомов, молекул и твердых тел* (М.: Мир, 1974) 780 с.
6. *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*. Ed. by S. Lundqvist, N. H. March (New York and London: Plenum Press, 1983).
7. R.G. Parr, W. Yang. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* (Oxford: Oxford University Press, 1989).
8. S. Kotochigova et al. Local-density-functional calculations of the energy of atoms. *Phys. Rev. A* 55 (1997) 191.
9. B.-G. Englert, J. Schwinger. Thomas-Fermi revisited: The outer regions of the atom. *Phys. Rev. A* 26(5) (1982) 2322.
10. *Electronic and Atomic Collision*. Ed. by G. Watel, P.G. Burke. (North-Holland, Amsterdam, 1978) 201 p.
11. K. Smith, R.J. Henry, P.G. Burke. Scattering of Electrons by Atomic Systems with Configurations  $2p^q$  and  $3p^q$ . *Phys. Rev.* 147(1) (1966) 21.
12. P. Gombas. *Die Statistische Theorie des Atoms und Ihre Anwendungen* (Wien, New York and London: Springer-Verlag, 1983).
13. R.J. Latter. Atomic Energy Levels for the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Dirac Potential. *Phys. Rev.* 99(2) (1955) 510.
14. В.Я. Карпов, Г.В. Шпатаковская. О подобии по атомному номеру электронных энергий связи заполненных оболочек элементов периодической системы. *ЖЭТФ* 151(3) (2017) 435.
15. L.H. Thomas. The calculation of atomic fields. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 23 (1927) 542.
16. E. Fermi. Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. *Accad. Naz. Lincei* 6 (1927) 602; *Z. Phys.* 48(1-2) (1928) 73.
17. C.G. Darwin. The wave equations of the electron. *Proc. Roy. Soc. A* 118(780) (1928) 654.
18. В.Б. Берестецкий, Л.П. Питаевский, Е.М. Лифшиц. *Квантовая электродинамика* (М.: Физматгиз, 1980) 704 с.
19. А.С. Давыдов. *Квантовая механика* (М.: Наука, 1973) 748 с.
20. T. Tietz. Simple Analytical Eigenfunctions of Electrons in Thomas-Fermi Atoms. *Z. Naturforsch.* 23a (1968) 191.
21. J.A. Bearden, A.F Burr. Reevaluation of X-Ray Atomic Energy Levels. *Rev. Mod. Phys.* 39(1) (1967) 125.

С. М. Федоткін\*

*Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ, Україна*

\*Відповідальний автор: sfedot@kinr.kiev.ua

## РОЗРАХУНОК ЕНЕРГІЙ АТОМНИХ СТАНІВ У НАБЛИЖЕННІ ТОМАСА - ФЕРМІ

Запропоновано метод для розрахунку енергій рівнів для багатоелектронних нейтральних атомів. У цьому випадку крім кулонівського поля ядра істотний внесок в енергію вносить взаємодія між електронами. Ця взаємодія враховується наближено за допомогою теорії збурень у рамках статистичної моделі Томаса - Фермі. Використовуючи наближення Тайтца для середнього потенціалу, отримано аналітичні вирази для енергій  $s$ -станів із головними квантовими числами  $n = 1, 2, 3, 4$ . Проведено розрахунок енергій для зарядів ядра в інтервалі  $1 < Z \leq 100$ . Отримано добре узгодження з експериментальними значеннями енергій.

*Ключові слова:* енергії атомних рівнів, модель Томаса - Фермі, теорія збурень.



S. N. Fedotkin\*

*Institute for Nuclear Research, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

\*Corresponding author: sfedot@kinr.kiev.ua

**CALCULATION OF THE ATOMIC STATES ENERGIES IN THE THOMAS - FERMI APPROXIMATION**

A method for calculating the energies of levels for many-electron neutral atoms is proposed. In this case, in addition to the Coulomb field of the nucleus, an important contribution to the energy is connected with the interaction between the electrons. This interaction is taken into account approximately by perturbation theory in the framework of the Thomas - Fermi statistical model. Using the Taitz approximation for the mean potential the analytical expressions for the energies of s-states are obtained with principal quantum numbers  $n = 1, 2, 3, 4$ . The energies are calculated for the nuclear charges in the interval  $1 < Z \leq 100$ . A good agreement with the experimental values of the energies was obtained.

*Keywords:* energies of atomic levels, Thomas - Fermi model, perturbation theory.

## REFERENCES

1. H.A. Bethe, E.E. Solpeter. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atom* (Berlin-Gottingen-Heidelberg: Springer-Verlag, 1957) 562 p.
2. C.F. Fischer. *The Hartree-Fock Method for Atoms* (N.Y., London: John Wiley & Sons, 1977) 308 p.
3. P. Palmeri et al. Radiative and Auger Decay of K-Vacancy Levels in the Ne, Mg, Si, S, Ar, and Ca Isonuclear Sequences. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 177(1) (2008) 408.
4. D.A. Pantazis, F. Neese. All-electron scalar relativistic basis sets for the 6p elements. *Theor. Chem. Acc.* 131 (2012) 1292.
5. J.C. Slater. *The Self-Consistent Field for Molecules and Solids* (Moskva: Mir, 1974) 780 p. (Rus)
6. *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*. Ed. by S. Lundqvist, N. H. March (New York and London: Plenum Press, 1983).
7. R.G. Parr, W. Yang. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* (Oxford: Oxford University Press, 1989).
8. S. Kotochigova et al. Local-density-functional calculations of the energy of atoms. *Phys. Rev. A* 55 (1997) 191.
9. B.-G. Englert, J. Schwinger. Thomas-Fermi revisited: The outer regions of the atom. *Phys. Rev. A* 26(5) (1982) 2322.
10. *Electronic and Atomic Collision*. Ed. by G. Watel, P.G. Burke. (North-Holland, Amsterdam, 1978) 201 p.
11. K. Smith, R.J. Henry, P.G. Burke. Scattering of Electrons by Atomic Systems with Configurations  $2p^q$  and  $3p^q$ . *Phys. Rev.* 147(1) (1966) 21.
12. P. Gombas. *Die Statistische Theorie des Atoms und Ihre Anwendungen* (Wien, New York and London: Springer-Verlag, 1983).
13. R.J. Latter. Atomic Energy Levels for the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Dirac Potential. *Phys. Rev.* 99(2) (1955) 510.
14. V.Ya. Karpov, G.V. Shpatakovskaya. On the Atomic-Number Similarity of the Binding Energies of Electrons in Filled Shells of Elements of the Periodic Table. *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 124(3) (2017) 369.
15. L.H. Thomas. The calculation of atomic fields. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 23 (1927) 542.
16. E. Fermi. Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. *Accad. Naz. Lincei* 6 (1927) 602; *Z. Phys.* 48(1-2) (1928) 73.
17. C.G. Darwin. The wave equations of the electron. *Proc. Roy. Soc. A* 118(780) (1928) 654.
18. V.B. Berestetskii, L.P. Pitaevskii E.M. Lifshitz. *Quantum Electrodynamics* (Moskva: Fizmatgiz, 1980) 704 p. (Rus)
19. A.S. Davydov. *Quantum Mechanics* (Moskva: Nauka, 1973) 748 p. (Rus)
20. T. Tietz. Simple Analytical Eigenfunctions of Electrons in Thomas-Fermi Atoms. *Z. Naturforsch.* 23a (1968) 191.
21. J.A. Bearden, A.F Burr. Reevaluation of X-Ray Atomic Energy Levels. *Rev. Mod. Phys.* 39(1) (1967) 125.

Надійшла 17.05.2017

Received 17.05.2017