

HÖHERE NÄHERUNGEN DES STATISTISCHEN ATOMMODELLS, IN WELCHEM DIE ELEKTRONEN NACH DER HAUPTQUANTENZAHL GRUPPIERT SIND I

Von

P. GOMBÁS und T. SZONDY

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER UNIVERSITÄT FÜR TECHNISCHE WISSENSCHAFTEN, BUDAPEST

und

FORSCHUNGSGRUPPE FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER UNGARISCHEN AKADEMIE
DER WISSENSCHAFTEN, BUDAPEST

(Eingegangen: 22. XII. 1961)

Für das statistische Atommodell, in welchem die Elektronen nach der Hauptquantenzahl gruppiert sind, wird eine höhere Näherung ausgearbeitet und zwar in der Weise, dass die Variationsparameter der Elektronendichten aller Elektronenschalen gleichzeitig variiert werden und ausserdem auf die Elektronen einer Schale auch die elektrostatische Wirkung der äusseren Schalen in Betracht gezogen wird. Gegenüber der ersten Näherung ergibt sich sowohl für die Dichteverteilung der Elektronen als für die Energie nur eine unbedeutende Änderung.

In einigen vorangehenden Arbeiten¹ wurde ein statistisches Atommodell ausgearbeitet, in welchem die Elektronen mit gleicher Hauptquantenzahl in Gruppen (Schalen) eingeteilt und diese Gruppen dann gesondert statistisch behandelt werden. Für die Elektronendichten der einzelnen Schalen wurden Variationsansätze von der Form

$$\varrho_n = A_n r^{2(n-1)} e^{-\lambda_n r}$$

gemacht, wo r die Entfernung vom Kern und A_n einen Normierungsfaktor bezeichnen; n sowie λ_n sind Variationsparameter, die aus dem Energieminimumprinzip bestimmt werden. Bisher wurde das Atom sukzessive aufgebaut, d. h. die einzelnen Elektronenschalen wurden nacheinander hinzugefügt und die Variationsparameter in der Elektronendichte der einzelnen Schalen für jede Schale eigenst bestimmt. Ausserdem ist auf die Elektronenverteilung einer Schale die elektrostatische Wirkung der äusseren Elektronenschalen vernachlässigt worden.

In der vorliegenden Arbeit werden die Berechnungen gerade in diesen beiden Richtungen erweitert. Erstens werden die Variationsparameter in den Verteilungsfunktionen der Elektronendichte der einzelnen Schalen nicht gesondert nacheinander, sondern simultan variiert und zweitens wird für die Elektronenverteilung einer Schale auch die elektrostatische Wirkung der äusseren Schalen in Betracht gezogen.

¹ P. GOMBÁS u. K. LADÁNYI, Acta Phys. Hung. 5, 313, 1955; Acta Phys. Hung. 7, 255, 1957; Acta Phys. Hung. 7, 263, 1957; Acta Phys. Hung. 8, 301, 1958; Zeitschrift für Physik, 158, 261, 1960.

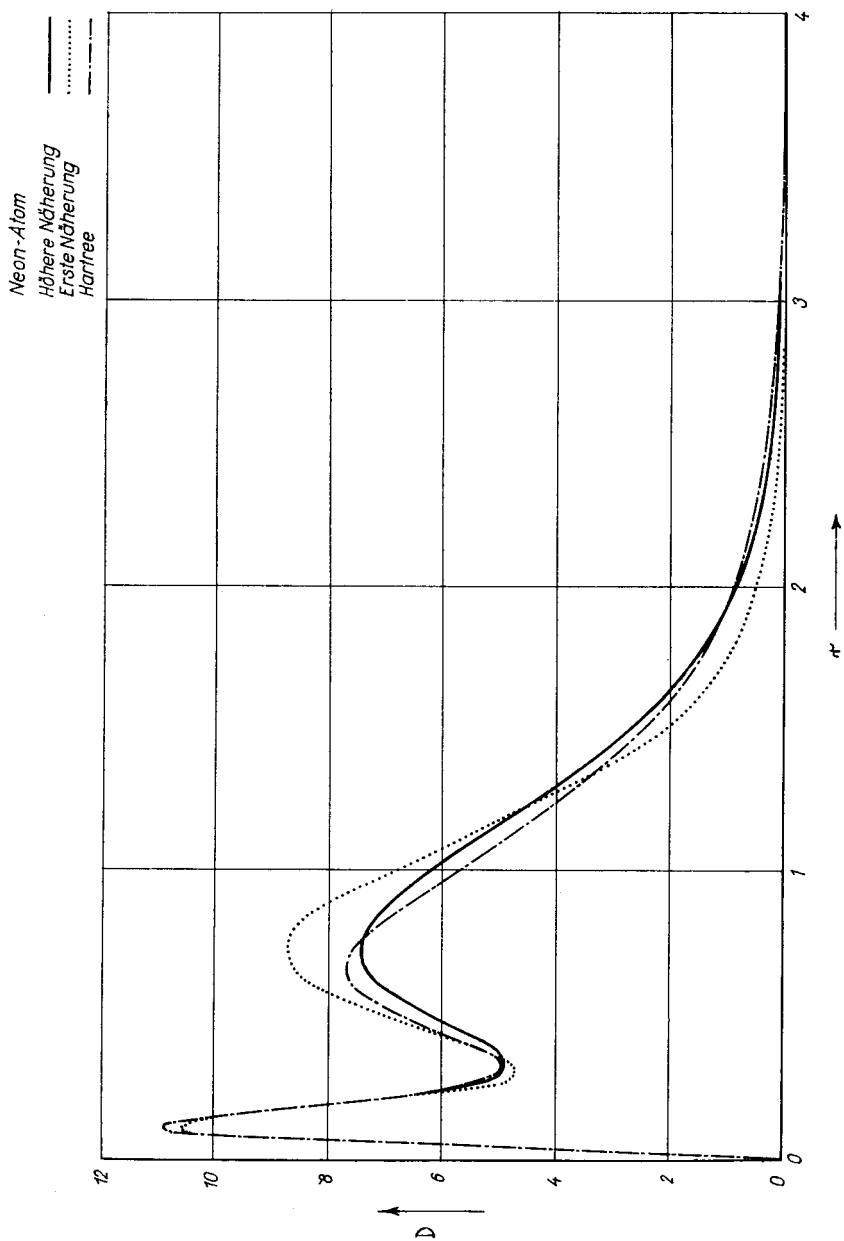


Fig. 1. Verlauf der hier bestimmten Elektronendichte sowie der in der ersten Näherung bestimmten Elektronendichte und der Hartreeschen Verteilung für das Ne-Atom. Abszisse: r Entfernung vom Kern in a_0 -Einheiten; Ordinate: Radiale Elektronendichte $D = \sum_n 4 \pi r^2 \rho_n$ in $1/a_0$ -Einheiten

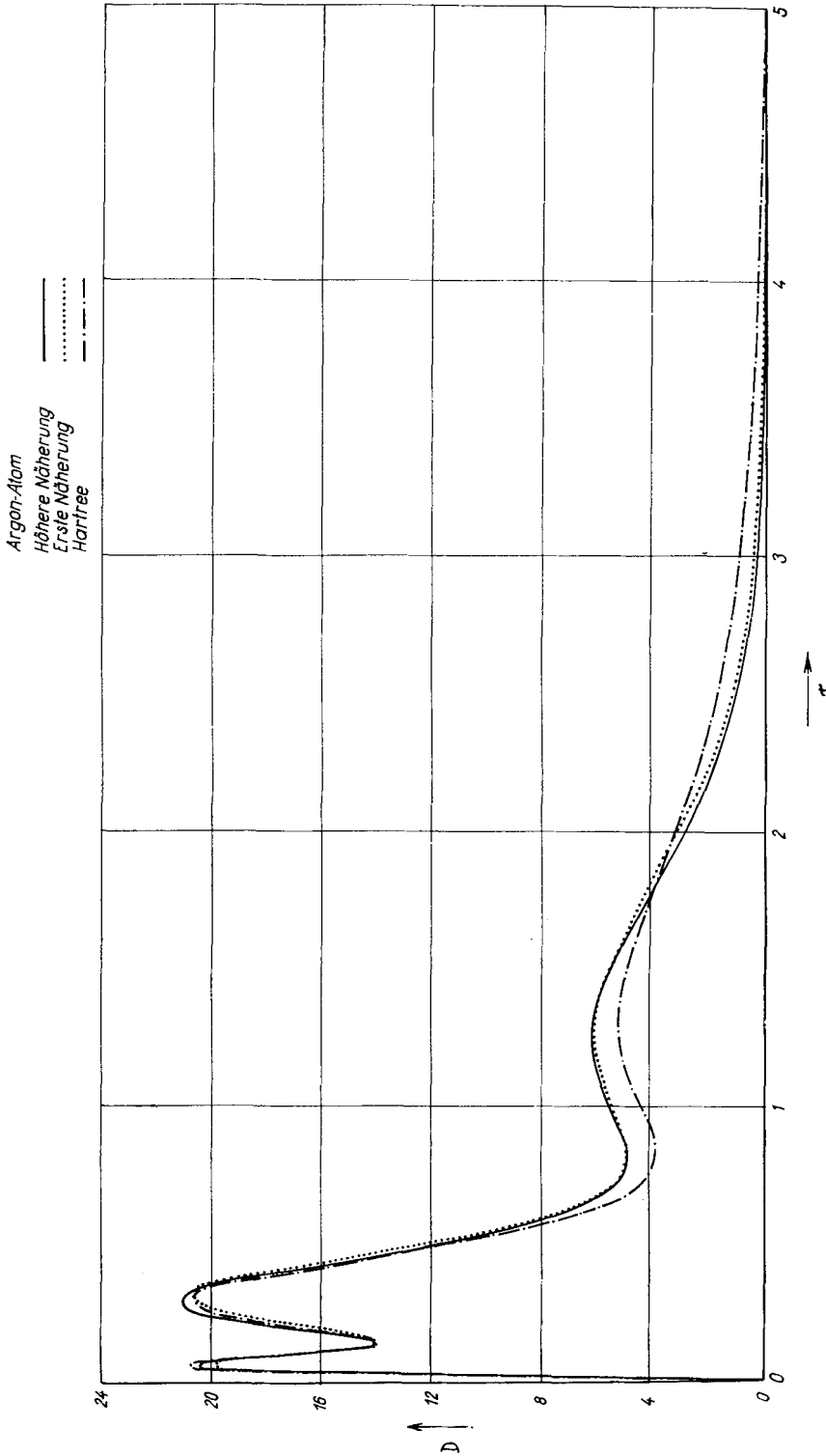


Fig. 2. Verlauf der hier bestimmten Elektronendichte: sowie der in [der ersten Näherung bestimmten Elektronendichte und der Hartreeschen Verteilung für das Ar-Atom. Abszisse: r Entfernung vom Kern in a_0 -Einheiten; Ordinate: Radiale Elektronendichte $D = \sum_n 4\pi r^2 \rho_n$ in $1/a_0^3$ -Einheiten

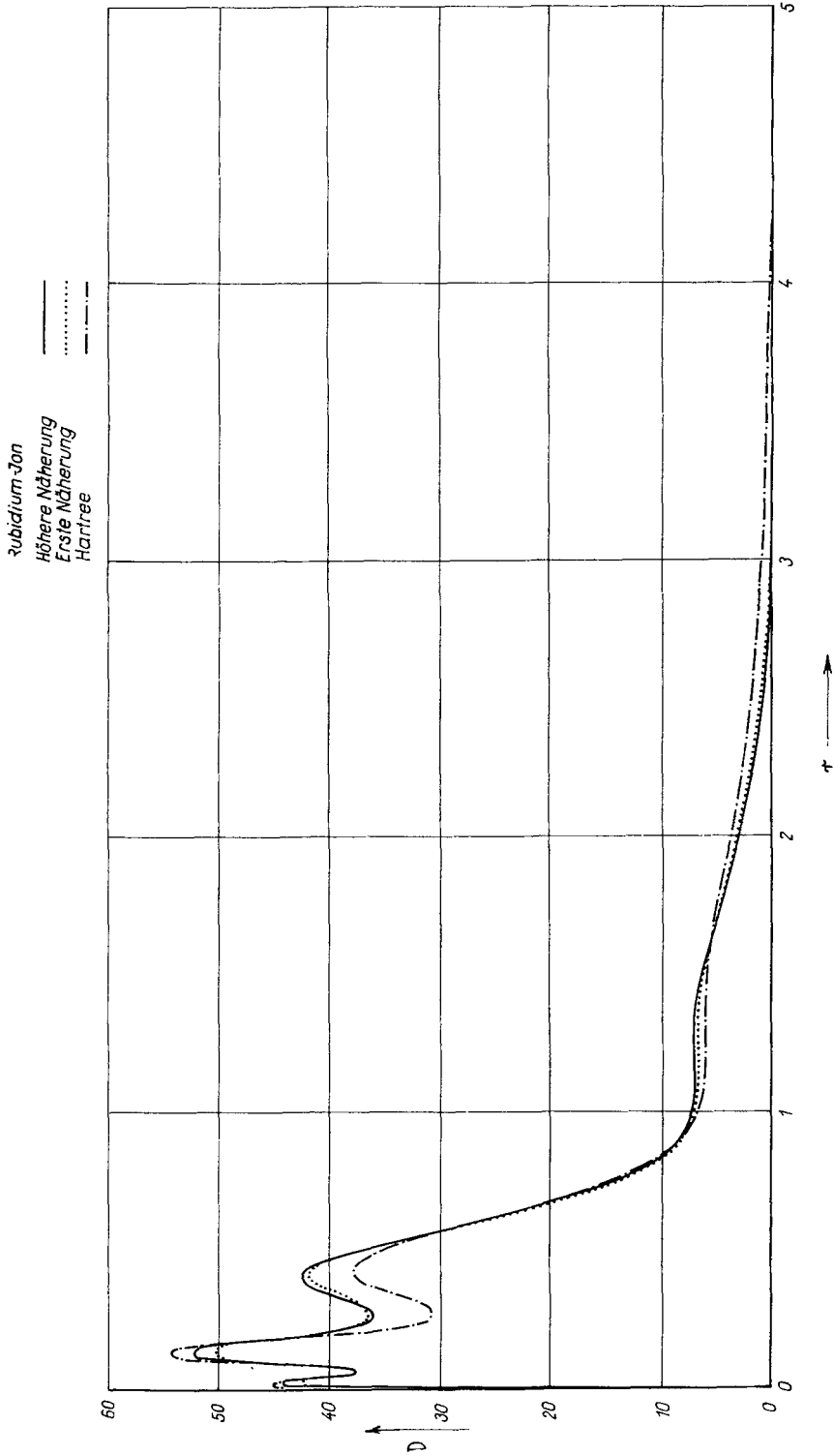


Fig. 3. Verlauf der hier bestimmten Elektronendichte sowie der in der ersten Näherung bestimmten Elektronendichte und der Hartreeschen Verteilung für das Rb^+ -Ion. Abszisse: r Entfernung vom Kern in a_0 -Einheiten; Ordinate: Radiale Elektronendichte $D = \sum_n 4\pi r^2 \rho_n$ in $1/a_0^3$ -Einheiten

Die Berechnungen haben wir für die Atome Ne und Ar sowie für das Rb^+ -Ion durchgeführt. Die hier gefundenen Resultate für die Variationsparameter sind zum Vergleich mit denen in den vorangehenden Arbeiten gefundenen Resultaten der ersten Näherung in der Tabelle 1 angegeben, und zwar λ_n in $1/a_0$ Einheiten, wo a_0 den ersten Bohrschen Wasserstoffradius bezeichnet. Hierbei ist zu bemerken, dass für n bei der Variation nur ganz- oder halbzahlige Werte zugelassen wurden. Bei Rb^+ haben wir n nicht variiert, sondern es wurden für n die Werte der ersten Näherung benutzt.

Der hier bestimmte Verlauf der Elektronendichte für die Atome Ne und Ar sowie für das Rb^+ -Ion ist bzw. in den Figuren 1, 2 und 3 dargestellt. Zum Vergleich ist in diesen Figuren auch die Dichteverteilung der ersten Näherung² und die der wellenmechanischen HARTREESchen Näherung³ eingezeichnet. Wie ersichtlich ist, unterscheidet sich die Elektronendichte der zweiten Näherung von der der ersten Näherung für Ar und Rb^+ nur wenig; für Ne ergibt sich jedoch ein grösserer Unterschied, wobei zu sehen ist, dass die hier bestimmte zweite Näherung mit der HARTREESchen Verteilung besser übereinstimmt als die der ersten Näherung.

Mit den neu bestimmten Parameterwerten n und λ_n der Teildichten haben wir die Energie der Atome Ne und Ar sowie des Rb^+ -Ions berechnet. Die Resultate sind zum Vergleich mit denen, die wir in der ersten Näherung erhielten und mit den halbempirischen Resultaten von SLATER⁴ in der Tabelle 2

Tabelle 1

Vergleich der hier gefundenen Variationsparameter n und λ_n für Ne, Ar und Rb^+ mit den in der ersten Näherung gefundenen Resultaten. λ_n in $1/a_0$ -Einheiten

Atom	Schale	Erste Näherung		Hier berechnet	
		n	$2 \lambda_n$	n	$2 \lambda_n$
Ne	K	1,0	19,37	1,0	19,65
	L	2,0	5,58	1,5	4,11
Ar	K	1,0	35,38	1,0	36,65
	L	2,0	13,10	2,0	13,36
	M	3,0	4,70	3,0	4,79
Rb ⁺	K	1,0	73,38	Wie in der ersten Näherung	77,33
	L	2,0	30,44		32,11
	M	3,0	14,10		14,44
	N	4,0	5,97		6,18

² P. GOMBÁS u. K. LADÁNYI, Acta Phys. Hung. 5, 313, 1955.

³ Für Ne: F. W. BROWN, Phys. Rev. (2) 44, 214, 1933.

Für Ar: D. R. HARTREE und W. HARTREE, Proc. Roy. Soc. Lond. (A) 166, 450, 1938.

Für Rb^+ : D. R. HARTREE und W. HARTREE, Proc. Roy. Soc. Lond. (A) 151, 96, 1935.

⁴ J. C. SLATER, Phys. Rev. 36, 57, 1930.

in e^2/a_0 Einheiten zusammengestellt, wo e die positive Elementarladung bezeichnet. Wie zu sehen ist entsteht in den Energien gegenüber denen der ersten Näherung nur eine unbedeutende Änderung.

Tabelle 2

Vergleich der hier gefundenen Energie der Atome Ne und Ar sowie des Rb^+ -Ions mit der der ersten Näherung und mit den halbempirischen Werten. E in e^2/a_0 -Einheiten

Atom	E		
	Erste Näherung	Hier berechnet	Halbempirisch
Ne	-125,85	-125,94	-129,5
Ar	-515,96	-521,44	-525,4
Rb^+	-2920,4	-2925,7	-2885,3

ВЫСШИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТОМА, В КОТОРОЙ ЭЛЕКТРОНЫ СГРУППИРОВАНЫ ПО ГЛАВНЫМ КВАНТОВЫМ ЧИСЛАМ

П. ГОМБАШ и Т. СОНДИ

Резюме

Авторами разрабатывается высшее приближение для статистической модели атома, сгруппировавшей электроны по главным квантовым числам. При разработке метода вариационные параметры плотности электронов всех электронных оболочек варьируются одновременно, кроме этого у электронов данной оболочки принимается во внимание и электростатическое воздействие других оболочек. По сравнению с результатами первого приближения изменения как по распределению плотности электронов, так и по энергии незначительны.