

АНАЛІТИЧНА АПРОКСИМАЦІЯ ЕЛЕКТРОННИХ ГУСТИН ТА РАДІАЛЬНИХ ОРБІТАЛЕЙ БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ АТОМНИХ СИСТЕМ

Е. Ремета, В. Келемен, М. Довганич

Інститут електронної фізики, НАН України, Університетська 21, Ужгород, 88000

З використанням певних аналітичних виразів за методом найменших квадратів проведено апроксимацію повних, підоболонкових електронних густин та одноелектронних орбіталей деяких багатоелектронних атомів та іонів, обчислених у локальному та скалярно-релятивістському наближенні теорії функціонала густини (ТФГ). В таблицях наводяться визначені параметри апроксимації.

ВСТУП

Важливою у фізиці атомних зіткнень є проблема достатньо адекватного опису особливостей пружної та непружної взаємодії при розсіюванні легких і важких частинок багатоелектронними системами – атомами, молекулами, кластерами та їх іонами.

Для дослідження складного характеру міжчастинкової взаємодії – обмінної, поляризаційної, поглинання – при розсіюванні атомною системою фотонів, електронів, позитронів, атомів застосовуються різні модельні уявлення і наближення. Наприклад, модельні оптичні потенціали (ОП) широко використовуються для опису процесу розсіювання цих частинок багатоелектронними атомними системами при малих та середніх енергіях зіткнення. Потенціали можуть містити емпіричні параметри, але фундаментальне значення мають саме безпараметричні потенціали. За допомогою ОП обчислюються не тільки інтегральні характеристики розсіювання, але й такі детальні, прямо зв'язані з амплітудою розсіювання, як диференціальні перерізи, параметри спінової поляризації, параметр асиметрії.

При визначенні складових ОП необхідно, щоб опис процесу розсіювання був узгоджений або, навіть, самоузгоджений.

Тому нами застосовується важлива вимога – використання, по можливості, однотипних

наближень як для знаходження потенціальних і структурних характеристик мішені, так і для розгляду цього процесу. З цією метою функціональні (одноелектронні радіальні орбіталі, оболонкові та повні електронні густини) і енергетичні величини, необхідні в складових ОП, знаходяться в єдиному підході – локальних наближеннях стаціонарної [1] та нестационарної [2,3] теорії функціонала густини.

Використання аналітичних виразів для радіальних орбіталей, електронних густин та статичного потенціалу багатоелектронних систем якісно і кількісно збільшує можливості прецизійних квантовомеханічних розрахунків різних характеристик процесу розсіювання.

Одною з перших для багатоелектронних атомів була проведена апроксимація методом найменших квадратів (МНК) електронних густин та статичного потенціалу, розрахованих у теорії Томаса-Фермі [4]. Також апроксимували ці величини, але розраховані у наближеннях: нерелятивістському Хартрі-Фока (ХФ) в [5] (для атомів з порядковим номером $Z=1-36$) та релятивістському Дірака-Хартрі-Фока-Слетера (ДХФС) в [6] (для атомів $Z=1-92$). В роботі [7] апроксимацію проводили для підоболонкових електронних

густин легких атомів ($Z=1-32$), розрахованих в наближенні Хартрі-Фока-Слетера (ХФС).

Аналітичний вираз, запропонований для апроксимації в [5], вважається найкращим. Цікавою, хоча і достатньо наближеною (внаслідок використання значень різних ступенів моментів, електронної густини) є методика знаходження параметрів апроксимації для статичного потенціалу [6]. Для знаходження параметрів розв'язуються системи нелінійних алгебраїчних рівнянь. Так як для статичного потенціалу була використана суперпозиція трьох юкавівських потенціалів, тому, математично це означає використання для апроксимації суми експонент, на відміну від дещо більш складної формули в [5].

З метою більш точного аналітичного опису розподілу електронного заряду в атомних системах в роботі [7] проводиться апроксимація за МНК, теж суперпозицією, але від двох до п'яти (в залежності від типу підоболонки) юкавівських потенціалів, статичних потенціалів та відповідних підоболонкових електронних густин.

Подальшим кроком, для ще більш точнішого, адекватного опису квантовомеханічних внутрішньоатомних властивостей розподілу електронного заряду атомних систем, є апроксимація одноелектронних орбітальних хвильових функцій.

Знайдені аналітичні вирази для електронних орбіталей, повної та підоболонкових електронних густин, статичного потенціалу широко використовуються для знаходження: складових частин модельних оптичних потенціалів розсіювання електронів, позитронів та атомів і іонів на атомних системах; факторів розсіювання рентгенівських променів та електронів; узагальнених сил осциляторів; середніх енергій збудження атомних систем; моментів електронної густини.

ПОТЕНЦІАЛЬНІ СКЛАДОВІ ОП

Коротко нагадаємо основні відомості про потенціальний опис процесу розсіювання [8-10]. Загальний вид оптичного потенціалу взаємодії налітаючого електрона енергії E з N -електронною мішенню наступний

$$V_{opt}(r, E) = V_S(r) + V_X(r, E) + V_P(r) + iV_A(r, E). \quad (1)$$

ОП складається зі статичного $V_S(r)$, обмінного $V_X(r, E)$, поляризаційного $V_P(r)$ потенціалів та потенціалу поглинання $V_A(r, E)$. При розсіюванні позитрона обмінний потенціал дорівнює нулю, а статичний треба брати з протилежним знаком.

Статичний потенціал $V_S(r)$ (тут та надалі в а.о.)

$$V_S(r) = V_n(r) + V_H(r) = -\frac{Z}{r} + \frac{1}{2} \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (2)$$

де $V_n(r)$ – потенціал кулонівської взаємодії налітаючого електрона з ядром, $V_H(r)$ – потенціал Хартрі, описує кулонівську взаємодію цього електрона з електронами (густиною $\rho(r)$) мішені, Z – заряд ядра.

Для кількісного опису певних релятивістських ефектів процесу розсіювання до дійсної частини ОП додають потенціал спин-орбітальної взаємодії налітаючого електрона з мішенню [11,12], який є пропорційним похідній dV_S/dr . Таким чином, при числових розрахунках корисним буде наявність аналітичного виразу для $V_S(r)$.

Обмінний потенціал $V_X(r, E)$ знаходять у моделі неоднорідного електронного газу [8,13] (див. також [9,10]) з використанням локального наближення. Цей потенціал функціонально визначається локальним імпульсом Фермі $k_F(r) = [3\pi^2 \rho(r)]^{1/3}$ та величиною хвильового вектора налітаючого електрона $k_s(r, E)$. Функція $k_s(r, E)$ може містити потенціали $V_S(r)$ та $V_P(r)$. Для вибору того чи іншого виразу для $V_X(r, E)$ можуть бути використані відомості про атомну структуру мішені. Поляризаційний потенціал $V_P(r)$ визначається кореляційною взаємодією налітаючого електрона з електронною оболонкою мішені. Для опису цієї вза-

ємодії поряд з параметричними (містять один або декілька емпіричних параметрів) потенціалами (див., наприклад, [8,10]) використовуються безпараметричні (неемпіричні) вирази. Останній тип потенціалів базується в локальному наближенні ТФГ для неоднорідного електронного газу, на понятті густини кореляційної енергії $\varepsilon_c(r_s)$, $r_s(r)=[3/(4\pi \cdot \rho(r))]^{1/3}$. Густина енергії $\varepsilon_c(r_s)$ характеризує величину міжелектронної взаємодії в електронному газі в залежності від його електронної густини $\rho(r)$ [14-16]. При цьому використовується достатньо суттєве припущення, що потенціал не залежить від енергії E . Воно справедливе для середніх та великих значень енергій зіткнень. Поведінка поляризаційного потенціалу на великих, асимптотичних, відстанях відповідає полю, наведених налітаючою частинкою у електронній оболонці мішені дипольного та квадрупольного моментів, з відповідними статичними поляризованостями α_d і α_q [8,10]. Поляризованості знаходять в локальному наближенні часозалежної ТФГ [2,3].

Потенціал поглинання $V_A(r,E)$ враховують, починаючи з енергій $E > \Delta$, де Δ – енергія збудження 1-го рівня. В наближенні квазівільного розсіювання електронів з врахуванням принципу Паулі [8-10,17] потенціал є пропорційним $\rho(r)$ та визначається локальним імпульсом Фермі $k_F(r)$ і локальною швидкістю налітаючого електрона $v_{loc}(r,E)$. Функція $v_{loc}(r,E)$ містить складові ОП – потенціали $V_S(r)$, $V_X(r,E)$ та $V_P(r)$. Зауважимо, що хвильовий вектор $k_s(r,E)$ в $V_X(r,E)$ і локальну швидкість $v_{loc}(r,E)$ в $V_A(r,E)$ бажано обчислювати узгоджено, в однотипних наближеннях.

В якості потенціалу поглинання також використовуються параметризовані емпіричні потенціали. Наприклад в [18,19] (див., також [8-10,17]) вони теж прямо пропорційні повній електронній густині $\rho(r)$ та обернено пропорційні квадрату функції $T_{loc}(r,E) = E - V(r,E)$ – локальній кінетичній енергії налітаючого електрона. В якості

електронної густини можна також використовувати певну суму підоболонкових густин, починаючи з валентної. Потенціальна функція $V(r,E)$ складається з потенціалів $V_S(r)$, $V_X(r,E)$ та $V_P(r)$.

Якщо досліджується процес розсіювання атомними системами, що містять напівзаповнені підоболонки, то для його опису з ТФГ використовуються наближення локальної спінової густини (НЛСГ) [1,16]. При цьому згідно з правилом Хунда [12,20] знаходять спінові електронні густини $\rho^{\uparrow\downarrow}(r)$. Повна густина $\rho(r) = \rho^{\uparrow}(r) + \rho^{\downarrow}(r)$. При описі розсіювання електрона з фіксованим напрямком спіну в НЛСГ обмінна взаємодія враховується тільки з відповідною спіновою підоболонкою. Обмінні потенціали $V_X^{\uparrow\downarrow}(r,E)$ залежать від двох імпульсів Фермі $k_F^{\uparrow\downarrow}(r) = [6\pi^2 \rho^{\uparrow\downarrow}(r)]^{1/3}$ [21-24]. Поляризаційний потенціал в НЛСГ теж модифікується [16], тому що густина кореляційної енергії $\varepsilon_c(r_s)$ тепер визначається двома густинами електронів $\rho^{\uparrow\downarrow}(r)$. В потенціалі поглинання також мають бути враховані особливості застосування НЛСГ.

АНАЛІТИЧНА АПРОКСИМАЦІЯ СТАТИЧНИХ ПОТЕНЦІАЛІВ, ЕЛЕКТРОННИХ ГУСТИН ТА РАДІАЛЬНИХ ОРБИТАЛЕЙ АТОМНИХ СИСТЕМ

З наведеного вище випливає, що важливими функціональними величинами складових ОП є статичний потенціал $V_s(r) = (-Z/r) \cdot (Z_p(r)/Z)$, виражений у роботах [5,6] через екрануючий фактор $Z_p(r)$, та повна електронна густина

$$\rho(r) = \sum \rho_{nl}(r) = \sum N_{nl} |\varphi_{nl}(r)|^2. \quad (3)$$

Тут $\rho_{n\ell}(r)$ – підоболонкові електронні густини, $\varphi_{n\ell}(r)$ – одноелектронні радіальні орбіталі, $N_{n\ell}$ – кількість електронів на підоболонці $n\ell$.

$$\frac{Z_p(r)}{Z} = \sum_i^{n_i} A_i \cdot \exp(-B_i \cdot r) + r \cdot \sum_k^{n_k} C_k \cdot \exp(-D_k \cdot r), \quad (4)$$

$$\rho(r) = \frac{N}{4\pi r} \left[\sum_i^{n_i} A_i \cdot B_i^2 \cdot \exp(-B_i \cdot r) + \sum_k^{n_k} C_k \cdot D_k \cdot (D_k \cdot r - 2) \cdot \exp(-D_k \cdot r) \right], \quad (5)$$

зв'язані між собою загальними параметрами. Розмірність параметрів впливає з цих виразів. Параметри-множники A_i в перших доданках (4), (5) задовільняють умові (6),

$$A_1 + A_2 + \dots + A_{n_i} = 1, \quad (6)$$

що є наслідком поведінки $V_S(r)$ на малих відстанях r .

Як було зазначено вище, апроксимаційний вираз для функції $Z_p(r)$ в роботі [6] містить суперпозицію експонент (перші доданки в (4), (5)). Зауважимо, що апроксимація, проведена в цій роботі (використане ДХФС наближення), не відтворює структури (максимуми та мінімуми) радіальної електронної густини, яка є в розрахунках [25,26]. Це впливає на величину та поведінку кутової і енергетичної залежностей диференціальних перерізів пружного розсіювання на складних атомах (див. [25,26]. Так, наприклад, у випадку атома In для енергій $E = 20 \text{ eV}$ ці перерізи, отримані в подібних наближеннях, відрізняються в широкому інтервалі кутів $20^\circ - 140^\circ$ [25]. Проведення апроксимації для підоболонкових густин в наближенні ХФС [7] приводить до збільшення кількості параметрів. Але цікавим в даній роботі є запропоновані певні параметризовані вирази для параметрів K, L, M – підоболонок. В цих виразах параметри пов'язані з кількістю електронів в підоболонках та зарядом ядра. Вид виразів впливає з загальних умов поведінки підоболонкових

Для апроксимації статичного потенціалу і повної електронної густини нами використовуються аналітичні вирази [5]

орбіталей та ефектів екранування (див. [7]).

Для аналітичної апроксимації одноелектронних орбіталей використовуємо їх вираз через т. зв. слетерівські орбіталі [27,28]

$$\varphi_{n\ell}(r) = \sum_{i=1}^k a_i \cdot r^{b_i} \cdot \exp(-c_i \cdot r). \quad (7)$$

Кількість нулів орбіталі дорівнює $n - \ell - 1$. Орбітальні хвильові функції та їх апроксимації є найкращим засобом для вивчення внутрішніх квантовомеханічних властивостей атомних систем.

Наведені вирази (4)-(6) використовують, по можливості, для апроксимації на всьому інтервалу відстаней від ядра. Однак можливим є проведення апроксимації на окремих інтервалах з подальшою процедурою зшивання.

Електронна густина і статичний потенціал атомів та іонів розраховуються чисельно в локальному скалярно-релятивістському наближенні теорії функціонала густини з виключенням енергії самої електронів. Ці величини представляються у вигляді таблиць значень, які містять 400-440 точок, у т. зв. сітці Германа-Скіллмена за радіусом r , починаючи з $r_0 \cong 0.0022134 \cdot Z^{-1/3} a_0$ (див. [16]). Апроксимація проводилась за МНК.

Ми провели апроксимацію статичних потенціалів, електронних густин та електронних орбіталей, розрахованих у рамках

різних наближень теорії функціонала густини, для основних та збуджених станів деяких атомів, позитивних та негативних іонів [29,30]. Наприклад, для конфігурацій основного стану атомних систем F^- , Na^+ , K , Ca^+ , Ca , Kr , Xe , Yb , Rn визначені параметри аналітичної, за (4)-(6), апроксимації нормованої на загальну кількість електронів N в атомній системі, радіальної електронної густини $\bar{\rho}(r) = 4\pi r^2 \rho(r) / N$. Отримані нами параметри добре узгоджуються з аналогічними даними роботи [5].

Результати розрахунку параметрів за формулою (5) з умовою (6), радіальної електронної густини для деяких атомних систем, наведені в табл. 1,2. Атом Ne та іон Na^+ потребують для апроксимації різної кількості доданків в 2-х складових виразу (5), але з незмінним загальним числом – 4. Для атома Ar та іона K^+ апроксимація проведена із загальним числом параметрів 8 і 10 (див. табл.1). З таблиці 1 видно, що врахування 3-ої експоненти в другій сумі в (4), (5) є важливим для атома на малих відстанях, а для іона на великих.

Внаслідок складної електронної структури атома Yb [12,27], апроксимацію повної електронної густини було проведено на різних інтервалах відстаней. Для

$r < 0.02a_0$: $A_1=0.97969$, $B_1=6.1136$; $A_2=0.02031$, $B_2=140.546$; $C_1=1.0153$, $D_1=192.614$; $C_2=0.02175$, $D_2=813.02$. Для $0.02a_0 \leq r < 0.718a_0$: $A_1=3.9048$, $B_1=3.4717$; $A_2=-2.9048$, $B_2=84.102$; $C_1=-38.896$, $D_1=13.228$; $C_2 = -85.500$, $D_2=33.704$; $C_3=-0.36$, $D_3=68.852$; $C_4=-13.696$, $D_4=5.2765$. Для $0.718a_0 \leq r < 4.45a_0$: $A_1=2.1344$, $B_1=7.5227$; $C_1=1.2494$, $D_1=3.4182$; $C_2=0.05597$, $D_2=1.0643$. Для $r \geq 4.45a_0$: $C_1=-0.02893$, $D_1=0.07975$; $C_2=1.6863$, $D_2=1.1839$ Для діркових збуджених станів атомних систем параметри апроксимації електронної густини в табл. 3 мають немонотонну поведінку, залежно від типу стану. Кількість параметрів збільшується при переході від однозарядного іона до двозарядного (див. також [30]). Такі дані потрібні для проблем опису пружних зіткнень електронів з високозбудженими атомними системами, що відбуваються у гарячій плазмі [31]. Сюди відносяться також і задачі електронних зіткнень за участю автоіонізаційних станів, розташованих вище потенціалу іонізації, властивості яких дуже ретельно та плідно вивчалися в різні часи групами науковців під керівництвом Іллі Сергійовича Алексахіна [32].

Таблиця 1. Параметри апроксимації радіальної електронної густини конфігурацій основних станів деяких атомів та ізоелектронних їм іонів

Ne Na⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	C₁	D₁	C₂	D₂		
	1.2105	2.706	-0.2105	23.370	-3.3043	9.2728	-1.4631	15.356		
Na Mg⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	A₃	B₃	C₁	D₁		
	2.2390	3.713	-0.083	29.088	-1.247	4.5344	-2.969	10.944		
Na Mg⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	C₁	D₁	C₂	D₂		
	1.1250	1.219	-0.125	26.337	-1.7366	2.0298	-3.4267	11.495		
Na Mg⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	C₁	D₁	C₂	D₂		
	1.1778	1.5228	-0.1778	26.662	-2.0760	2.4494	-4.4988	12.831		
Ar K⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	C₁	D₁	C₂	D₂	C₃	D₃
	1.3558	2.063	-0.356	32.945	-4.1949	4.8541	-8.6652	19.955	-	-
	1.5137	2.1690	-0.5137	38.215	-5.1150	4.9560	-9.1922	17.839	-5.9501	30.674
	1.1778	1.5228	-0.1778	26.662	-2.0760	2.4494	-4.4988	12.831	-	-
Kr Rb⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	C₁	D₁	C₂	D₂	C₃	D₃
	1.5683	4.0625	-0.5683	24.766	-6.0538	10.440	-5.4814	18.009	0.2142	1.4477
Kr Rb⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	C₁	D₁	C₂	D₂	C₃	D₃
	1.8295	5.9399	-0.8295	55.053	0.8028	2.2147	-14.74	14.185	-26.13	39.415
Rb Sr⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	C₁	D₁	C₂	D₂	C₃	D₃
	1.7820	2.4752	-0.7820	57.370	-5.3494	4.3226	-14.682	14.475	-25.888	40.898
Rb Sr⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	C₁	D₁	C₂	D₂	C₃	D₃
	1.7129	2.3371	-0.7129	58.094	-5.0642	4.1990	-13.567	14.405	-24.113	41.206
Rb Sr⁺	A₁	B₁	A₂	B₂	C₁	D₁	C₂	D₂	C₃	D₃
	1.8073	2.5533	-0.8073	58.665	-5.6998	4.5223	-15.502	15.058	-27.075	42.021

Таблиця 2. Параметри апроксимації радіальної електронної густини для конфігурацій основного стану деяких ізоелектронних іонів

	A_1	B_1	A_2	B_2	C_1	D_1	C_2	D_2	C_3	D_3
Ne^+	1.4505	3.1711	-0.4505	21.500	-4.6821	8.6446	-3.7848	14.937	-	-
Na^{2+}	1.7409	3.9380	-0.7409	22.396	-6.8639	9.3345	-6.6769	16.258	-	-
Ar^+	1.4090	2.2273	-0.4090	32.404	-4.5817	4.9846	-9.6703	19.847	-	-
K^{2+}	1.5100	2.5601	-0.5100	33.065	-5.5808	5.5954	-11.847	20.851	-	-
Kr^+	1.8732	6.0399	-0.8732	54.845	-15.433	14.229	-27.312	39.334	0.7608	2.3096
Rb^{2+}	2.0016	6.5394	-1.0016	55.364	-17.841	14.912	-30.985	40.118	0.8476	2.5362

Таблиця 3. Параметри апроксимації радіальної електронної густини для конфігурацій збуджених діркових (nl^{-1}) станів деяких ізоелектронних іонів

Іон	nl^{-1}	A_1	B_1	A_2	B_2	C_1	D_1	C_2	D_2	C_3	D_3	
Ne^+ Na^{2+}	1s	1.637	3.422	-0.637	19.847	-5.158	9.163	-4.518	15.21			
		1.882	4.144	-0.882	21.335	-7.311	10.01	-6.666	16.70			
	2s	1.385	3.093	-0.385	21.638	-3.762	8.316	-3.656	14.37			
		1.656	3.855	-0.656	22.479	-5.774	9.058	-6.366	15.92			
	2p	1.451	3.171	-0.451	21.500	-4.682	8.645	-3.785	14.94			
		1.741	3.938	-0.741	22.396	-6.864	9.335	-6.677	16.26			
Ar^+ K^{2+}	1s	1.669	2.456	-0.669	28.333	-6.226	5.506	-11.92	19.44			
		1.836	2.818	-0.836	28.942	-7.815	6.125	-14.74	20.23			
	2s	1.463	2.291	-0.463	31.576	-5.085	5.409	-10.21	19.89			
		1.590	2.631	-0.590	32.124	-6.365	6.034	-12.72	20.84			
	2p	1.508	2.321	-0.508	31.316	-5.293	5.401	-11.16	19.73			
		1.639	2.663	-0.639	31.952	-6.597	6.022	-13.78	20.70			
	3s	1.384	2.190	-0.384	32.754	-4.425	4.926	-9.246	19.92			
		1.477	2.519	-0.477	33.433	-5.353	5.534	-11.29	20.94			
	3p	1.409	2.227	-0.409	32.404	-4.582	4.985	-9.670	19.85			
		1.510	2.560	-0.510	33.065	-5.581	5.595	-11.85	20.85			
	Іон	nl^{-1}	A_1	B_1	A_2	B_2	C_1	D_1	C_2	D_2	C_3	D_3
	Kr^+ Rb^{2+}	1s	2.270	6.738	-1.270	49.636	-20.75	14.74	-32.45	37.54	0.964	2.484
2.477			7.307	-1.477	50.073	-24.33	15.42	-37.25	38.19	1.068	2.709	
2s		2.035	6.425	-1.035	53.226	-18.14	14.84	-30.05	38.95	0.915	2.420	
		2.201	6.969	-1.201	53.665	-21.19	15.51	-34.41	39.67	1.017	2.645	
2p		2.060	6.459	-1.060	53.491	-18.28	14.79	-31.30	38.93	0.919	2.426	
		2.225	7.000	-1.225	53.978	-21.32	15.48	-35.73	39.69	1.020	2.650	
3s		1.882	6.243	-0.882	54.706	-15.45	14.43	-27.33	39.34	0.912	2.407	
		2.022	6.776	-1.022	55.161	-18.02	15.14	-31.23	40.10	1.014	2.631	
3p		1.933	6.302	-0.933	54.288	-16.18	14.43	-28.58	39.13	0.915	2.408	
		2.120	6.896	-1.120	54.333	-19.43	15.15	-33.44	39.69	1.027	2.643	
3d		1.998	6.358	-0.998	53.746	-17.24	14.45	-30.02	38.92	0.909	2.401	
		2.153	6.894	-1.153	54.233	-20.07	15.14	-34.25	39.69	1.010	2.624	
4s		1.862	6.004	-0.862	54.926	-15.27	14.21	-27.04	39.36	0.743	2.267	
		1.988	6.500	-0.988	55.450	-17.64	14.89	-30.65	40.15	0.829	2.493	
4p		1.873	6.040	-0.873	54.845	-15.43	14.23	-27.31	39.33	0.761	2.310	
		2.002	6.539	-1.002	55.364	-17.84	14.91	-30.99	40.12	0.848	2.536	

Для валентних і субвалентних одноелектронних радіальних орбіталей основних конфігурацій деяких атомів отримано параметри апроксимації виразу (7). Вони наведені в таблиці 4 для всього інтервалу відстаней.

Апроксимація валентної $6s$ -орбітали атома Yb на двох інтервалах відстаней дала наступні значення параметрів: для $r < 0.9606a_0$: $a_1 = -87.612$, $b_1 = 1.7832$,

$c_1 = 7.6482$; $a_2 = -110.43$, $b_2 = 0.8221$,
 $c_2 = 26.157$; $a_3 = 1.9500$, $b_3 = -0.11979$,
 $c_3 = 2.8448$; для $r \geq 0.9606a_0$: $a_1 = 3.2425$, $b_1 = -0.38185$, $c_1 = 1.2827$; $a_2 = -1.1682$, $b_2 = -1.3198$,
 $c_2 = 0.34363$.

Субвалентна $4f$ -орбіталь атома іттербія не перетинає вісь r , тобто не має нулів. Тому можна було провести апроксимацію

Таблиця 4. Параметри апроксимації одноелектронних радіальних nl -орбіталей основних станів атомів

Параметри	Mg	Kr		In		Xe	Yb		Rn
	3s	4p		5s	5p	5p	4f	6s	6p
a_1	1.6115	-44.62	-18.22	164.0	-94.35	-235.69	19.3569	-115.9	-528.24
b_1	0.02236	2	1.36	1.6522	1.9	1.88	1.25483	1.9160	1.5
c_1	8.7439	6.7764	5.1902	8.3117	9.9103	11.3478	5.8117	8.2186	20.6599
a_2	-1.3411	46.63	62.36	-300.0	114.8	183.507	-35.996	-108.3	136.361
b_2	0.4536	1.0621	1.17	2.8989	1.4881	1.41	1.35402	0.8160	1.02143
c_2	2.7246	17.400	17.37	9.8807	31.436	32.7476	15.2056	25.836	30.2044
a_3	0.2371	0.8430	0.7250	-3.8654	1.1995	2.63335	1.5491	1.9852	-73.479
b_3	0.8302	1.2	0.2372	0.08662	0.3	0.32	1.14149	-0.1175	2.7
c_3	0.7972	1.4838	1.0745	2.71783	2.3437	2.0122	2.3604	3.0746	5.30783
a_4	-	0.1672	-	0.2928	-0.1667	-2.0285	-	-	1.97095
b_4	-	0.0185	-	0.9594	1.3	1.26	-	-	0.20416
c_4	-	3.3667	-	1.0679	0.9183	1.73738	-	-	2.4279
a_5	-	-	-	0.26429	-0.0207	-0.03349	-	-	0.36996
b_5	-	-	-	-0.2148	0.1595	0.1	-	-	0.22515
c_5	-	-	-	0.7841	0.3018	0.42378	-	-	0.76685
a_6	-	-	-	7.2030	-	-	-	-	-
b_6	-	-	-	0.04382	-	-	-	-	-
c_6	-	-	-	36.694	-	-	-	-	-

нормованої радіальної електронної густини цієї $4f$ -підоболонки, але для різних

інтервалів відстаней. Так, для $r < 0.181a_0$ справедливою є формула

$$\bar{\rho}_{4f}(r) = \exp[-7.0987 + 7.4223 \ln(r) + 24.984 \exp(-r)] \quad (8)$$

Для відстаней $r > 181a_0$ по формулі (5) маємо: $0.181a_0 < r \leq 1.321a_0$: $A_1 = 1.3543$, $B_1 = 11.657$; $A_2 = -0.35433$, $B_2 = 2.0096$; $C_1 = 1.4410$, $D_1 = 4.0342$; $C_2 = 0.12158$, $D_2 = 2.0106$; для $r > 1.321a_0$: $A_1 = 2.9326$,

$B_1 = 3.6282$; $A_2 = 9.4387$, $B_2 = 7.2300$; $C_1 = 0.31325$, $D_1 = 3.0769$.

Використання вказаних аналітичних виразів дуже важливе для якісного та швидкого розрахунку характеристик розсіювання. В роботах [9,25,26,33,34] знай-

дені параметри застосовуються для визначення потенціальних складових ОП при обчисленні диференціальних перерізів при малих і середніх енергіях зіткнення. Вони також були використані при дослідженні розсіювання атомами легких частинок. Так, в [9,25,26,34] при розсіюванні електронів на атомах Kr, In, Yb, а в [33,35] електронів і позитронів на атомі Ca.

ВИСНОВКИ

За допомогою метода найменших квадратів знайдено задовільні значення параметрів апроксимації для статичного потенціалу та електронної густини збуджених станів деяких атомних систем із зміною значень атомного номера в широкому діапазоні. Для основного стану деяких атомів знайдено параметри апроксимації одноелектронних валентних і субвалентних орбіталей. Вказані фізичні характеристики атомних систем розраховані в локальному наближенні теорії функціонала густини. Знайдені параметри вже використовуються для розрахунків характеристик розсіювання електронів та позитронів деякими багатоелектронними атомами.

В подальшому важливим є проведення систематичної апроксимації повних та підоболонкових електронних густин і статичних потенціалів за різними аналітичними виразами, або за їхніми комбінаціями для атомів, позитивних і від'ємних іонів. Доцільно також провести дослідження по знаходженню аналітичних виразів для параметрів апроксимації, залежних від заряду ядра (в тому числі, і від ефективного заряду ядра для цієї підоболонки), повної, спінової і підоболонкової кількості електронів.

Присвячується світлій пам'яті професора І.С. Алексахіна, згадуючи наші прекрасні результативні та дуже стимулюючі наукові дискусії.

ЛІТЕРАТУРА

1. Теория неоднородного электронного газа (Под ред. С.Лундквиста, Н.Марча. М: Мир, 1987).
2. A.Zangwill, P.Soven, *Phys. Rev. A* 21, 1561 (1980).
3. М.М.Герман, В.Я. Купершмидт, Е.Ю. Ремета, О.В.Фарберович, Оптические свойства атомов и ионов в нестационарной теории функционала локальной плотности. Деп. ВИНТИ №4124-B88 (1988).
4. R.A.Bonham, T.G.Strand, *J. Chem. Phys.* 39, 2200 (1963).
5. T.G.Strand, R.A.Bonham, *J. Chem. Phys.* 40, 1686 (1964).
6. F.Salvat, J.D. Martinez, R. Mayol, J.Parellada, *Phys. Rev. A.* 36, 467 (1987).
7. Y.F.Chen, C.M.Kwei, C.J. Tung, *J.Phys. B. At. Mol. Phys.* 26, 1071 (1993).
8. V.Kelemen, E.Remeta, E.Sabad, *J. Phys. B. At. Mol. Phys.* 28, 1527 (1995).
9. В.І.Келемен, М.М. Довганич, Е.Ю. Ремета, Науковий вісник Ужгородського університету. Сер. фіз. вип.19, 105 (2006).
10. Е.Ю.Ремета, В.І.Келемен, Науковий вісник Ужгородського університету. Сер. фіз. вип.19, 119 (2006).
11. Л.Шифф, Квантовая механика (Иностран. литер., Москва, 1957).
12. И.И.Собельман. Введение в теорию атомных спектров (Наука, Москва, 1963).
13. S.Raimes, Many-Electron Theory (North-Holland, Amsterdam, 1972).
14. J.K.O'Connell, N.F.Lane, *Phys. Rev.* A27, 1893 (1983).
15. N.T.Padial, D.W.Norcross, *Phys. Rev.* A29, 1742 (1984).
16. О.В.Фарберович, С.В. Власов, Г.П. Нижникова, Программа самосоглас. релятив. расчета атом. и ион. структур в прилбл. локаль. спин. плот. 1. Численные методы и опи-

- сание программы. Деп. ВИНТИ №2953-83 (1983).
17. G.Staszewska, D.W. Schwenke, D.G. Truhlar, *Int. J. Quant. Chem.: Quant. Chem Symp.* 17, 163 (1983).
 18. I.McCarthy, C.Noble, B.Phillips, A.Turnbull, *Phys. Rev.* A15, 2173 (1977).
 19. J.V.Furness, I.E.McCarthy, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 6, 2280 (1973).
 20. Дж.Слэтер, Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел (Мир, Москва, 1978).
 21. V.Kelemen, E.Remeta, E.Sabad, 16 ICPEAC (New York, USA, 1989) 867.
 22. E.Sabad, V.Kelemen, E.Remeta, 18 ICPEAC (Aarhus, Denmark, 1993) 134.
 23. Е.Сабад, В.Келемен, Е.Ремета, Наукові праці ІЕФ (Ужгород, 1996) 249.
 24. V.I.Kelemen, E.Yu.Remeta, E.P.Sabad, 19 ICPEAC (Whistler, British Columbia, Canada, 1995) 200.
 25. M.Pardovska, S.Milisavljevic, V.Pejcev, D.Sevic, D.M.Filipovic, B.P.Marinkovic, V.I.Kelemen, E.Yu.Remeta, E.P.Sabad. 23rd Summer School and ISPIG (Kapaonic, Serbia, 2006) 71.
 26. V.Kelemen, M.Dovhanich, E.Remeta, ICPEAC (Frieberg, Germany, 2007).
 27. А.А.Радциг, Б.М.Смирнов, Параметры атомов и атомных ионов. Справочник (Энергоатомиздат, Москва, 1986). З.Б.Рудзикас, А.А.Никитин, А.Ф. Холтыгин Теоретическая атомная спектроскопия. Руководство для астрономов и физиков. Ленинград: ЛГУ, 1990. 242 с.
 28. В.Стойка, Е.Ремета, *Вісник Львів. університету. Сер. фіз.* 39, 216 (2006).
 29. E.Yu.Remeta, 24 ICPEAC, (Rosario, Argentina, 2005) Fr136.
 30. S.Y.Yousif Al-Mulla, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 37, 305 (2004).
 31. И.С.Алексахин, Неупругие процессы парных столкновений электронов с атомами металлов. Докторская диссертация (Ужгород, 1984).
 32. В.Келемен, В.Стойка, Е.Ремета, *Вісник Львів. універ. Сер. фіз.* 39, 60 (2006).
 33. B.P.Marinkovic, V.Pejcev, D.Sevic, M. Rabasovic, D.M.Filipovic, V.Kelemen, M.Dovhanich, E.Remeta, 25 ICPEAC (Frieberg, Germany, 2007).
 34. V.Kelemen, E.Remeta, 24 ICPEAC (Rosario, Argentina, 2005) We038.

ANALYTICAL APPROXIMATION OF ELECTRON DENSITIES AND RADIAL ORBITALS FOR MANY-ELECTRON ATOMIC SYSTEMS

E. Remeta, V. Kelemen, M. Dovhanich

Institute of Electron Physics, NAS of Ukraine,
Universitetska str. 21, Uzhgorod, 88000

Some analytical formulae for static potential, total and subshell electron densities and one-electron orbitals of some many-electron atoms and ions are used for approximation by the least square method. These values are calculated for some atoms and ions in local and scalar-relativistic approach in the density functional theory (DFT). The approximated parameters thus defined are presented in the tables.