

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛИЗАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ВАЛЕНТНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ СВЕРХТЯЖЁЛЫХ АТОМОВ И ИОНОВ

Кайгородов М.Ю., Тупицын И.И., Шабает В.М.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
199304, Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9,
e-mail: st031727@student.spbu.ru*

В данной работе исследуются локализационные свойства валентной электронной плотности сверхтяжелых атомов с $112 \leq Z \leq 120$ и ионов с конфигурацией ns^2np^6 , где $n \leq 6$. Одним из методов изучения данных свойств является электронная локализирующая функция (ЭЛФ)¹, которая характеризует насколько электронная плотность в определённой точке пространства отличается от электронной плотности свободного электронного газа.

Предсказания участков высокой степени локализации, основанные на ЭЛФ в приближении Дирака-Хартри-Фока (ДХФ), сравниваются с вычисленными среднеквадратичными радиусами ДХФ орбиталей и их среднеквадратичными отклонениями – величинами, характеризующими структуру оболочек атомной системы. Для оценки влияния релятивистских эффектов на распределение электронной плотности расчёты были проведены также и в нерелятивистском пределе.

Литература

1. Becke, A.D., Edgecombe, K.E. J. Chem. Phys. 1990, 92, 5397.
2. Jerabek, P., et al. Phys. Rev. Lett. 2018, 120, 053001.