

## 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)<sup>1</sup>, 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.