

**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.

**С. Н. Федоткин\***

*Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев, Украина*

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

### **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 Тайтца 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.

**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 Taytz 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-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 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