

019.941:530.145

О МЕТОДЕ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

P. Gombas, T. Szondy.

Solutions of the Simplified Self-Consistent Field for All Atoms of the Periodic System of Elements from $Z = 2$ to $Z = 92$.

Lösungen des Vereinfachten Self-Consistent Field für Alle Atome des Periodischen Systems der Elemente von $Z = 2$ bis $Z = 92$. Akademiai Kiado, Budapest, 1970, 82 pp.

В книге излагается основанный на статистической теории атома разработанный П. Гомбашем метод упрощенного самосогласованного поля. Метод состоит из двух этапов. На первом этапе электроны группируются по главным квантовым числам (независимо от орбитальных квантовых чисел) и описываются системой слейтеровских аналитических радиальных волновых функций, параметры которых определяются из вариационного принципа. На втором этапе полученная система одноэлектронных волновых функций ортогонализируется в зависимости от орбитальных квантовых чисел.

Приводятся полученные этим методом значения для энергий, а также одноэлектронные волновые функции для основных конфигураций нейтральных атомов периодической системы Менделеева для $Z = 2$ до $Z = 92$.

Приведенные таблицы могут быть полезны для приближенного определения атомных величин, а также как исходные данные для решения более точных уравнений самосогласованного поля Хартри — Фока.

А. П. Юцис, И. И. Глембоцкий