

АТОМНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛАНТАНОИДОВ И АКТИНОИДОВ© 2025 г. *Г.В. Шпатаковская*

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

shpagalya@yandex.ru

DOI: 10.20948/mm-2025-02-02

Для двух групп гомологов, лантаноидов и актиноидов, рассмотрены имеющиеся экспериментальные и теоретические данные по статической поляризуемости, атомным объемам и потенциалам ионизации, необходимые для численного моделирования различных задач химии и физики, в частности, проектов ядерной энергетики. Проверены установленные в квазиклассическом приближении связи этих характеристик друг с другом, исследованы их зависимости от атомного номера. Показано, что при последовательном водородоподобном заполнении электронных f -оболочек эта зависимость в обеих группах носит регулярный характер, что позволяет получить простые достаточно точные аппроксимации исследуемых величин, а также предсказать величины атомных объемов тяжелых актиноидов, данные по которым отсутствуют.

Ключевые слова: редкоземельные элементы, тяжелые актиноиды, водородоподобное заполнение, открытые f -оболочки, статическая поляризуемость, атомный объем, потенциал ионизации, квазиклассическое приближение, подобие по атомному номеру.

ATOMIC CHARACTERISTICS OF LANTHANOIDES AND ACTINOIDES*G.V. Shpatakovskaya*

Keldysh Institute of Applied Mathematics of the RAS

For two groups of homologues, lanthanoides and actinoides, the available experimental and theoretical data on static polarizability, atomic volumes and ionization potentials necessary for numerical simulation of various problems of chemistry and physics, in particular, nuclear power projects, are considered. The connections of these characteristics with each other established in a quasi-classical approximation have been checked, and their dependencies on the atomic number have been investigated. It is shown that with the sequential hydrogen-like filling of the electron f -shells, this dependence is regular in both groups, which makes it possible to obtain simple fairly accurate approximations of the studied quantities, as well as to estimate the atomic volumes of heavy actinides, for which data are not available.

Keywords: rare-earth elements, heavy actinoides, hydrogen-like filling, open f -shells, static polarizability, atomic volume, ionization potential, quasi-classical approximation, atomic number scaling.