

УДК 539.194

ДВУХПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛ

А. П. Копцев, А. В. Нявро, В. Н. Черепанов

Томский государственный университет
Федеральное агентство по образованию
634050 Россия, Томск, пр. Ленина, д. 36
rafting@sibmail.com

Предложена новая физическая модель определения параметров двухпараметрического псевдопотенциала, основанного на подходе Хейне–Абаренкова, что позволило фактически перейти к однопараметрическому псевдопотенциалу. Определены параметры псевдопотенциала для атомов и ионов второго и третьего периодов и иона Sr II. Показано, что предложенный двухпараметрический псевдопотенциал с найденными параметрами позволяет рассчитывать положение возбужденных одноэлектронных уровней ионов с хорошей точностью.

Ключевые слова: псевдопотенциал, атомно-молекулярные системы, спектроскопия.

Современная теория исследования электронных свойств сложных атомно-молекулярных систем, включая наноразмерные структуры, требует развития простых и эффективных моделей. Среди них широко используется метод модельного псевдопотенциала [1–3]. В частности, предложенный в [3] псевдопотенциал показал свою эффективность при расчете электронных свойств полупроводников [4]. В данной работе предлагается провести модернизацию псевдопотенциала [3] с целью его использования для расчета свойств молекулярно-кластерных систем произвольного состава и структуры с различным видом связи.

Модельный ионный псевдопотенциал [3] имеет вид непрерывной функции, которая в области, ограниченной некоторым эффективным радиусом R_m , является параболической, а вне её имеет кулоновский вид:

$$v_{\text{ион}}(r) = \begin{cases} V_0 \left(1 - \frac{r}{R_m}\right) - Zr \left[\frac{1}{R_m^2} + C(r - R_m) \right], & r \leq R_m \\ -\frac{Z}{r}, & r > R_m \end{cases}, \quad (1)$$

где V_0 , R_m – параметры псевдопотенциала, Z – заряд иона. В данной работе предлагается выбирать значение параметра R_m равным значению r , при котором плотность остовных электронов становится меньше 0.1. В этом случае подгоночным остается только один параметр V_0 , определяющий глубину потенциальной ямы. Таким образом, фактически мы получаем однопараметрический псевдопотенциал. В рамках развиваемого подхода были определены параметры R_m и V_0 для атомов и ионов второго и третьего периодов и иона Sr II. Результаты расчетов параметров псевдопотенциала (1) представлены в табл. 1.

Т а б л и ц а 1

Значение параметров псевдопотенциала V_0 , R_m
для атомов и ионов 2-3 периодов и иона Sr II (все единицы в а.е.)

| nl | Li I | Sr II | B III | C IV | N V | O VI | F VII | Ne VIII |
|----|-----------------------------|-----------------------------|----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|----------------------------|
| | V_0 ($R_m =$ 1.6) | V_0 ($R_m =$ 3.5) | V_0 ($R_m =$ 1) | V_0 ($R_m =$ 0.83) | V_0 ($R_m =$ 0.75) | V_0 ($R_m =$ 0.7) | V_0 ($R_m =$ 0.65) | V_0 ($R_m =$ 0.6) |
| nS | -9.0 | 151.6 | -6.3 | -6.3 | -14.35 | -20.84 | -29.17 | -40.4 |
| nP | 4.6 | 88.1 | -1.78 | -7.35 | -14.27 | -21.69 | -32.34 | -42.97 |
| nD | 5.0 | 17.17 | -3.74 | -7.9 | -13.15 | -18.7 | -32.45 | -63.5 |
| | Na I | Mg II | Al III | Si IV | P V | S VI | Cl VII | Ar VIII |
| | V_0 ($R_m =$ 2.35) | V_0 ($R_m =$ 2.07) | V_0 ($R_m =$ 1.8) | V_0 ($R_m =$ 1.63) | V_0 ($R_m =$ 1.5) | V_0 ($R_m =$ 1.35) | V_0 ($R_m =$ 1.25) | V_0 ($R_m =$ 1.2) |
| nS | -48.44 | -92.44 | 41.0 | 1.23 | -12.2 | -33.77 | -28.23 | -37.53 |
| nP | -51.6 | -97.12 | 12.1 | -1.13 | -11.12 | -32.93 | -27.55 | -36.4 |
| nD | -4.3 | 0.90 | -1.2 | -3.74 | -7.04 | -24.16 | -14.17 | -19.51 |

Таблица 2
 Одноэлектронные уровни энергии для C IV, Sr II, Si IV

| C IV | | | Sr II | | | Si IV | | |
|------|---------------|-------|-------|---------------|-------------------|-------|---------------|-------|
| nl | Расчет по (1) | [5] | nl | Расчет по (1) | Наш прямой расчет | nl | Расчет по (1) | [5] |
| 3d | 0.888* | 0.888 | 4d | 0.326* | 0.326 | 3d | 0.926* | 0.926 |
| 4d | 0.499 | 0.499 | 5d | 0.144 | 0.177 | 4d | 0.514 | 0.519 |
| 5d | 0.319 | 0.319 | 6d | 0.087 | 0.105 | 5d | 0.327 | 0.330 |
| 6d | 0.222 | 0.222 | 7d | 0.059 | 0.105 | 6d | 0.226 | 0.228 |
| 2p | 2.073* | 2.073 | 5p | 0.295* | 0.295 | 3p | 1.332* | 1.332 |
| 3p | 0.901 | 0.910 | 6p | 0.150 | 0.157 | 4p | 0.625 | 0.622 |
| 4p | 0.505 | 0.508 | 7p | 0.091 | 0.097 | 5p | 0.400 | 0.398 |
| 5p | 0.321 | 0.324 | 8p | 0.061 | 0.065 | 6p | 0.266 | 0.265 |
| 2s | 2.366* | 2.366 | 5s | 0.392* | 0.392 | 3s | 1.656* | 1.656 |
| 3s | 1.020 | 0.988 | 6s | 0.177 | 0.194 | 4s | 0.790 | 0.774 |
| 4s | 0.557 | 0.540 | 7s | 0.103 | 0.114 | 5s | 0.455 | 0.448 |
| 5s | 0.340 | 0.340 | 8s | 0.068 | 0.074 | 6s | 0.295 | 0.293 |

Эффективность обсуждаемой модели с найденными параметрами проиллюстрирована в табл. 2 на примере ионов C IV, Si IV, Sr II. Из табл. 2 видно, что уровни энергии, рассчитанные с псевдопотенциалом (1), согласуются с точностью до нескольких тысячных а.е. (максимальная погрешность не превышает нескольких сотых а.е.) с данными [5], а также с результатами наших прямых расчетов, основанных на методе Хартри-Фока с локальными обменно-корреляционными потенциалами [4]. Аналогичные результаты имеют место и для других ионов и атомов, приведенных в табл. 1.

* уровни, используемые для нахождения параметра V_0

Таким образом показано, что предложенная в настоящей работе модель позволяет предсказывать положение одноэлектронных уровней энергии с точностью до нескольких сотых а.е.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] И. И. Абаренков, В. Ф. Братцев, А. В. Тулуб, *Начала квантовой химии* (М., Высшая Школа, 1989).

- [2] I. V. Abarenkov, V. Heine, Phyl. Mag. **12**(7), 529 (1965).
- [3] С. Н. Гриняев, С. Г. Катаев, А. В. Нявро, В. А. Чалдышев, Изв. вузов. Физика N 8, 122 (1985).
- [4] А. В. Нявро, Теоретическое исследование электронных состояний атомов и атомных конденсатов методом Хартри-Фока с локальными обменно-корреляционными потенциалами. Дисс. на соиск. уч. степ. канд. физ.-мат. наук (Томск, Томский государственный университет, 2007).
- [5] http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html.

По материалам 3 Всероссийской молодежной школы-семинара "Инновационные аспекты фундаментальных исследований по актуальным проблемам физики", Москва, ФИАН, октябрь 2009 г.

Поступила в редакцию 22 октября 2009 г.