

MSC 81V45

О ПРОБЛЕМЕ РАЗМЕРА АТОМА

И.Н. Полякова, А.Г. Шкловский

Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
ул. Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия, e-mail: polyakova_i@bsu.edu.ru
shklovsky@bsu.edu.ru

При численном решении дифференциального уравнения в частных производных большое значение имеет выбор равномерной или неравномерной сетки. Этот выбор существенно зависит от размера исследуемой системы. Построение сетки при решении уравнения Кона-Шема для атомов или молекул начинается с определения их характерного размера. В настоящем докладе для исследования эффективного размера атома решалась сферически симметричная задача для атома аргона [1,2]:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 u_{n,l}(r)}{dr^2} + \left(\frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z(r)}{r} \right) \cdot u_{n,l}(r) = E_{n,l} u_{n,l}(r) \quad (1)$$

с граничными условиями $u_{n,l}(0) = 0, u_{n,l}(r_{at}) = 0$. Для аргона $Z(0) = 18, Z(r_{at}) = 1$

Здесь и далее используется атомная система единиц, расстояния измеряются в радиусах Бора, а энергии - в Ha (для удобства мы переводим их в эВ). Были рассмотрены $r_{at} = 12.07060, 12.54991, 12.93152, 13.32473, 17.97832, 24.25718$

В докладе приводятся графики наиболее протяженной функции — Зр-функции аргона и эффективного заряда $Z(r)$. Если нанести на один график все эффективные заряды, самосогласованные для различных r_{at} , то все графики визуальнo совпадают. Аналогично совпадают и графики $u_{3,1}(r)$. Поэтому, чтобы увидеть получившуюся разницу, пришлось построить графики разности функций $u_{3,1}(r)$, вычисленных для $r_{at} = 12.07060$, и для оставшихся r_{at} . Аналогично построены графики разности эффективных зарядов $Z(r)$, самосогласованных для $r_{at} = 12.07060$.

Учитывая, что получившиеся разности очень малы по величине, можно считать, что $r_{at} = 12.07060$ является характерным размером атома аргона и далее использовать в расчетах именно эту величину.

Литература

1. Старовойтов А.С., Шкловский А.Г. Модифицированный локальный потенциал для вычисления энергии ионизации атомов // Научные ведомости БелГУ. Серия Математика. Физика. – 2010. – Вып.19, №11(82). – С.126-134.

2. Береговой А.В., Плесканев А.А., Шкловский А.Г. Приближение локального функционала плотности с обменно-корреляционной энергией для релятивистских атомов // Научные ведомости БелГУ. Математика. Физика. – 2012. – Вып.29, №23 (142). – С.17-42.