

СТАТИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ АТОМОВ В МОДЕЛЯХ С АСИМПТОТИЧЕСКИ НЕ НУЛЕВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ

Винокурский Д.Л.^{1}, Кяров А.Х.², Темроков А.И.¹*

¹НИИПМА КБНЦ РАН, Нальчик, ²КБГУ, Нальчик

*niipma@mailru.com

Анализ опубликованных теоретических и экспериментальных работ по исследованию статической поляризуемости позволяет сделать вывод о том, что статистические модели приводят к завершению в несколько раз дипольной (квадрупольной и т.д.) поляризуемости атомов (ионов). Ряд попыток можно назвать успешными с точки зрения количественного совпадения с экспериментом, однако, лежащие в основе моделей предположения, особенно выбор возмущенной электронной плотности (ЭП), не являются достаточно убедительно обоснованными.

В настоящей работе в рамках теории функционала плотности (ТФП) создана модель расчета поляризуемости атома (МРПА) любой мультипольности. Электронная плотность в МРПА — хартри-фоксовская ЭП из-за удобства при расчетах. При этом выхода за рамки ТФП не произойдет, а стремление граничного радиуса $r_0 \rightarrow \infty$, в отличие от модели Томаса–Ферми (Томаса–Ферми–Дирака и т.п.) не приводят к драматическому ухудшению результатов расчетов.

Мультипольная поляризуемость в МРПА в атомных единицах:

$$\alpha^{(n)} = \frac{1}{2} \left[\int \frac{\rho(r)}{\beta(r)} \cdot r^{2n+2} \cdot P_n(\cos \theta) dr \right]^2 \left[\frac{5\chi_k}{9} \int \frac{\rho^{5/3}}{\beta^2} \cdot r^{2n+2} P_n^2(\cos \theta) dr + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r)}{\beta(r)} \frac{\rho(r')}{\beta(r')} \frac{(rr')^4}{|r-r'|} P_n(\cos \theta) P_n(\cos \theta') d\vec{r} d\vec{r}' + G \right]^{-1} \quad (1)$$

где n — степень мультипольности, $\chi_k = 0.3(3\pi^2)^{2/3}$, $P_n(\cos \theta)$ — полиномы Лежандра, G — включает обменный, корреляционный и градиентные вклады,

$$\beta(r) = \frac{5\chi_k}{3} \rho^{2/3} - \frac{4}{3} \chi_a \rho^{1/3} - \delta\epsilon_c + \delta\epsilon_k \quad (2)$$

где $\chi_a = 0.75(3/\pi)^{1/3}$, $\delta\epsilon_c$ — корреляционный, $\delta\epsilon_k$ — градиентный вклад в потенциал невозмущенного атома.

В пределе больших плотностей формулы (1) и (2) переходят в стандартную модель Томаса–Ферми для расчета поляризуемости.