ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТА ЭФФЕКТИВНЫХ ЗАРЯДОВ ЯДЕР ОРБИТАЛЕЙ ПО ПРАВИЛАМ СЛЭТЕРА, БЕРНСА И ФИЗИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЭКРАНИРОВАНИЯ

Белоусов В.В., Ермаков А.И.
Новомосковский институт Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева, г. Новомосковск

Белоусов В.В.
Ермаков А.И.
Новомосковский институт Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева
vihtor@don.tula.net

Для описания движения электрона в атомных и молекулярных системах наиболее часто используют понятие об одноэлектронной волновой функции - орбитали, которая для проведения расчетов обычно представляется в аналитической форме. В настоящее время в качестве орбиталей используют линейные комбинации гауссовских функций, причем бывают такие комбинации, что утрачивается представление об орбитальной структуре атома. Орбитали слетеровского типа (ОСТ) свободны от такого недостатка, они лучше описывают удаленные и приближенные к ядру атома области движения электрона. ОСТ более трудоемки для практического использования и поэтому в чистом виде в обычных квантово-химических расчетах молекул применяются редко. Однако они остаются важными для качественной интерпретации ряда экспериментальных данных и полезны в учебных курсах по квантовой химии. Они важны, в качестве промежуточного средства, для модификации существующих базисных наборов гауссовских функций. Благодаря ясному физическому смыслу использование СТО показало эффективность при учете релаксации орбиталей. Основным параметром этих функций является множитель в экспоненциальной составляющей аналитического выражения - экспонента, изменение которой определяет сжатие или расширение орбитали.

Экспонента определяется на основе значений эффективных зарядов ядер орбиталей (Z^*). Существует большое количество эмпирических методов и подходов для нахождения подходящих значений Z^*. История развития этих методов и их применение на практике в полной мере описано Бацановым и Звягиной [1]. Существуют различные, отличающиеся друг от друга, схемы расчета Z^*, предназначенные для корректного описания различных свойств атомов. Для расчета Z^* наибольшее распространение получили правила Слетера, Бернса и др. Задача выбора конкретных эффективных зарядов ядер орбиталей довольно неопределенна и нередко сопровождается противоречивыми данными. Поэтому бывает полезным оценивать одновременно значения Z^* одновременно по нескольким правилам.

Предлагаемая программа (Zeffs), позволяет определить эффективные заряды ядер орбиталей атомов и ионов, находящихся в различных электронных конфигурациях, по правилам Слэтера [2], Бернса [3] и физической модели экранирования [4]. Данные правила и методики применимы практически к любым элементам периодической системы.

Для расчета Z^* любого атома или иона достаточно, на открывающейся панели с изображением длиннопериодного варианта периодической системы, указать символ элемента и, если необходимо, его заряд и различия в электронных конфигурациях атомов и ионов. Заселенности атомных орбиталей можно указать также и непосредственно.

Программа включает в себя исполняемый модуль и динамически подключаемую библиотеку (DLL), в которой находятся необходимые для расчета процедуры и функции. Такая реализация предполагает возможность ее использования в других программных продуктах.

Основные возможности программы:

- расчет Z^* для любого элемента периодической системы ($_1$H - $_{110}$Ds);
- задание требуемых заселенностей атомных орбиталей;
- сравнение результатов, полученных разными методами;
- понятный и удобный графический интерфейс.

Литература

1. *Бацанов С.С., Звягина Р.А.* Интегралы перекрывания и проблема эффективных зарядов. т.1. Новосибирск: Наука. 1966. - с.5-38.
2. *Slater J.C.* Atomic shielding constants // Phys. Rev. - 1930. - V.36. - №1. - P.57-64.
3. *Burns G.* Atomic shielding parameters // J. Chem. Phys. - 1964. V.41. - №5. - P.1521-1522.
4. *Ермаков А.И.* Расчет эффективного заряда ядра слетеровской орбитали из физических представлений об экранировании // Ж. структ. химии. - 1991. - Т. 32. - №4. - С. 3 - 10.