

ДВУХШАГОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ОСТОВНЫХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ СОДЕРЖАЩИХ ТЯЖЕЛЫЕ АТОМЫ

А.Н. Петров^{1,2}, Н.С. Мосягин¹, Л.В. Скрипников¹, А.В. Титов¹

¹ ПИЯФ, г. Гатчина

² СПбГУ, Петродворец

Хорошо известно, что гамильтониан Дирака-Кулона-(Брейта) обеспечивает очень высокую точность расчета физико-химических свойств тяжелых атомов и молекул, содержащих такие атомы. Однако эти методы не самым активным образом применяются к молекулярным расчетам соединений тяжелых элементов из-за больших вычислительных затрат, что обусловлено как большим числом остовных электронов у тяжелых элементов, так и особенностями данного гамильтониана.

Весьма успешным для расчета спектроскопических и других валентных свойств молекул содержащих тяжелые атомы, оказалось применение метода релятивистского эффективного потенциала остова (РЭПО). Однако, существенным недостатком метода является его низкая точность. Эта проблема решена в рамках метода обобщенного РЭПО (ОРЭПО) который позволяет достигать практически любой заданной точности при минимальных вычислительных затратах.

Однако при вычислении таких свойств как сверхтонкая структура, другие магнитные свойства, изотопические и химические сдвиги, и других, описываемых операторами, действие которых сконцентрировано во внутренней остовой области атома-в-молекуле, прямое применение метода (О)РЭПО оказывается невозможным, так как необходимо использовать соответствующие четырехкомпонентные молекулярные спиноры. В работе [1] была предложена схема расчета, в которой перед вычислением средних значений таких величин восстанавливается правильная форма валентных и внешних остовных четырехкомпонентных молекулярных спиноров во внутренней остовой области тяжелого атома после двухкомпонентного ОРЭПО расчета молекулы. Методы восстановления были развиты и использованы нашей группой в ряде работ (см. [2] и ссылки). Как показали многочисленные расчеты [2], их использование на сегодняшний момент является существенно более экономичным и в то же время более точным даже для двухатомных молекул, чем применение «прямых» релятивистских методов.

Работа поддержана грантом РФФИ 09-03-01034-а. АП благодарит Минобрнауки РФ (Программа Развитие научного потенциала высшей школы, грант № 2.1.1/1136)

1. A.V.Titov, IJQC, v.57, 453-463 (1996).

2. Titov A.V., Mosyagin N.S., Petrov A.N., Isaev T.A., DeMille D.P. Progr. Theor. Chem. Phys. B~15 253-283 (2006).