

О методе построения штурмовских базисов в римановом пространстве для моделирования состояний атомов

© Новосадов Борис Константинович

Лаборатория математического моделирования природных процессов. Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН. ул. Косыгина, 19. г. Москва, 119991.

Россия. Тел.: +7 (916) 657-55-47. E-mail: bk.novosadov@mail.ru

Ключевые слова: квантовая механика, штурмовские базисы, многоэлектронная задача, полисферические гармоники, риманово пространство.

Аннотация

Дано обобщение метода Шрёдингера построения штурмовских базисных функций для многоэлектронного атома в пространстве положительной кривизны, позволяющий моделировать решение проблемы корреляций электронов в атомах. На примере атома гелия показано, как провести разложение волновой функции уравнения Шрёдингера по штурмовскому базису полисферических гармоник. Получено разложение кулоновского потенциала взаимодействия электронов в виде билинейного разложения по полисферическим гармоникам $O(4)$, которое используется для вычисления двух-электронных матричных элементов. Обсуждается применение расширенных базисов штурмовских полисферических функций с разными весами ортогональности в рассматриваемых модельных задачах об атомах водорода и гелия в пространстве положительной кривизны.

Изучение стационарных состояний атомов и молекул в базисе штурмовских функций позволяет ограничиться дискретным спектром модельной задачи и, соответственно, упростить алгебраическую модель гамильтониана в приближенных вычислениях вероятностей оптических переходов. Модельные потенциальные функции многоэлектронных систем, для которых энергетические состояния ограничиваются дискретным спектром, оказываются удобными при построении разложений стационарных волновых функций молекулярных систем по штурмовским базисным элементам также при решении задачи по учету электронных корреляций, при котором достигается вариационный минимум электронного функционала энергии многоэлектронной системы. Обобщение метода Шрёдингера, первоначально разработанного для модели атома водорода в римановом пространстве, на многоэлектронные системы дает новый теоретический подход к решению множества задач квантовой химии и теории химических реакций в более простом алгоритмическом варианте, способствующем алгебраизации задачи решения сложного дифференциального уравнения Шрёдингера для молекулы. В работе предложен новый метод разложения волновых функций многоэлектронных систем по штурмовским базисным элементам, основывающийся на методе последовательных приближений, формально соприкасающийся с методом теории возмущений. Также дано явное выражение волновых функций атома водорода в пространстве римановой кривизны через линейные комбинации полисферических функций.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Новосадов Б.К. О методе построения штурмовских базисов в римановом пространстве для моделирования состояний атомов. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.76. №11. С.75-86. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-76-11-75

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Новосадов Б.К. О методе построения штурмовских базисов в римановом пространстве для моделирования состояний атомов. *Бутлеровские сообщения В*. 2023. Т.6. №4. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-76-11-75/ROI-jbc-RB/23-6-4-3