

УДК 539.194.01

# О ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ЭЛЕКТРОННО-ЯДЕРНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ МОЛЕКУЛ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ИНТЕГРАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА ЭЛЕКТРОННО-ЯДЕРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Л.А. Грибов, Б.К. Новосадов

Институт геохимии и аналитической химии им В.И. Вернадского РАН, Москва  
E-mail: l\_gribov@mail.ru

Статья поступила 29 марта 2012 г.

Описан алгоритм численного решения предложенного в [ 1—5 ] уравнения Шредингера, в котором оператор электронно-ядерного взаимодействия имеет интегральную форму по ядерному распределению, а само уравнение записывается в разделяющихся переменных электронов и ядер.

**Ключевые слова:** уравнение Шредингера, гамильтониан молекулы, квантовая химия, численное решение.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Напомним некоторые важные особенности общепринятого решения задачи об уровнях энергии и волновых функциях для многоатомной молекулы.

Уже неоднократно отмечалось, что уравнение Шредингера с оператором

$$\hat{H}_{en} = \hat{T}_e + V_{ee} + V_{en} + \hat{T}_n + V_{nn} \quad (1)$$

(индекс е относится к электронам, а индекс n — к ядрам), где учитываются только кулоновские взаимодействия частиц, не отражает конкретную химическую структуру молекулы и поэтому его фактически никогда для сложных молекул и не решают. Пользуются отвечающим классике модельным подходом, согласно которому устойчивость той или иной структурно-изомерной формы определяется равенством действующей на любое ядро кулоновской силы отталкивания от других ядер и противоположно направленной силы притяжения к непрерывно распределенному в пространстве молекулы отрицательному заряду ("облако" электронов).

Условие такого равенства сил приводит к поиску минимума функции

$$F = V_{nn}(Q) + E_0(Q),$$

где  $E_0$  — уровень энергии для основного состояния в уравнении с гамильтонианом

$$\hat{H}_{en} = \hat{T}_e + V_{ee} + V_{en}. \quad (2)$$

Задача решается при фиксированных положениях ядер. Изменение их взаимного расположения приводит к параметрической зависимости  $E_0$  и  $V_{nn}$  от относительных координат ядер —  $Q$ . Точка, при которой силы ядерно-ядерного отталкивания точно компенсируются силами электронно-ядерного взаимодействия, определяется условием  $\frac{\partial F(Q)}{\partial Q} = 0$ . Здесь и ниже простой

символ дифференцирования по  $Q$  введен с целью упрощения записи. Дифференцирование ведется, разумеется, по многим переменным.