

Стабилизация резонансов кулоновским потенциалом

Д.Д. Харлампиди^а, А.И. Дементьев^а, С.О. Адамсон^б

*^аМосковский педагогический государственный университет, Химический факультет,
Москва, Россия*

E-mail: tascurr@gmail.com

*^бМосковский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Химический
факультет, Москва, Россия*

Для расчета энергий и ширин низших резонансных состояний атомных и молекулярных анионов исходную систему (анион) стабилизируют однородно заряженной сферой или системой точечных зарядов икосаэдрической симметрии [1]. В настоящее время эта методика часто применяется для анализа спектра резонансных состояний. В этом случае получаемые резонансные энергии и ширины не могут быть определены достаточно точно, так как их значения сильно зависят от выбора стабилизированного решения. Расходимость оценок, сделанных для разных стабилизированных решений, ранее была отмечена в литературе и отнесена за счет сильного влияния динамической корреляции [2]. Кроме того, стабилизация заряженной сферой предполагает возможность произвольного изменения асимптотической фазы волновой функции вблизи поверхности сферы, что, в свою очередь, должно приводить к систематическому искажению параметров резонанса.

Поскольку влияние этого фактора на точность оценок резонансных параметров ранее не было исследовано, в данной работе была решена одночастичная модельная система с асимптотическим потенциалом, имитирующим потенциал заряженной сферы [3]. Показано, что расхождение параметров резонанса для различных стабилизированных решений также существует и в рассмотренной модельной задаче. Причиной является дополнительный фазовый сдвиг, возникающий при введении асимптотического стабилизирующего потенциала. Также показано, что оцениваемые энергии и ширины резонансов зависят от параметра, аналогичного заряду сферы.

На основании проделанного анализа условий непрерывности волновой функции в асимптотической области был предложен способ минимизации искажений в вычисленных энергиях и ширинах резонансов. В перспективе результаты настоящего исследования должны позволить проводить с высокой точностью расчеты резонансных состояний молекулярных и атомных анионов без модификации существующих пакетов квантово-химических программ.

Работа поддержана грантом РФФИ № 06-03-32346.

1. J.S.-Y. Chao, M.F. Falcetta, K.D. Jordan, J.Chem.Phys, 1990, 93(2), 1125-1135.
2. A.F. Izmaylov, S.O. Adamson, A. Zaitsevskii, J.Phys.B, 2004, 37, 2321-2329.
3. A.U. Hazi, H.S. Taylor, Phys.Rev. A, 1970, 1, 1109-1120.