

На правах рукописи



ХАРЛАМПИДИ ДАРЬЯ ДМИТРИЕВНА

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СТАБИЛИЗАЦИИ К ИССЛЕДОВАНИЮ  
МЕТАСТАБИЛЬНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СОСТОЯНИЙ**

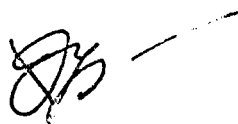
/специальность 02.00.01 – неорганическая химия,  
02.00.04 – физическая химия/

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата химических наук

- 3 ИЮН 2010

Москва-2010



**Работа выполнена на кафедре неорганической химии и методики преподавания химии химического факультета Московского педагогического государственного университета**

**Научные руководители:**

Доктор физико-математических наук, профессор Дементьев Андрей Игоревич

Кандидат химических наук Адамсон Сергей Олегович

**Официальные оппоненты:**

Доктор химических наук, профессор Годунов Игорь Андреевич

Доктор химических наук, профессор Багатурьянц Александр Александрович

**Ведущая организация:**

Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН)

Защита диссертации состоится 7 июня 2010 г. в 15 ч. 30 мин. на заседании Диссертационного Совета Д 212.154.25 при Московском педагогическом государственном университете по адресу: 119021, Москва, Несвижский переулок, д.3.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МПГУ по адресу: 119991, Москва, ул. Малая Пироговская, д.1.

Автореферат разослан «27» апреля 2010 г.

Ученый секретарь  
Диссертационного Совета



Пугашова Н.М.

### Актуальность темы

В последнее время в экспериментальной и теоретической науке наблюдается повышенный интерес к резонансным (метастабильным) состояниям атомных и молекулярных систем. Из всех метастабильных состояний наиболее важными являются анионные системы с конечным временем жизни  $\sim 10^{-12}$ - $10^{-5}$  сек., образующиеся при взаимодействии нейтральных атомов и молекул с электронами. Интерес к подобным системам связан с приоритетными направлениями развития науки и техники – индустрией наносистем и материалов, в частности с микро- и нанолитографией, а также с фундаментальными проблемами низкотемпературной плазмы. Для вычисления констант скоростей процессов, протекающих с участием резонансных состояний, необходимо располагать информацией о резонансных параметрах: энергиях и ширинах (временах жизни). Одним из наиболее перспективных методов, позволяющих вычислить эти параметры, является метод стабилизации, основанный на принципе дискретизации непрерывного спектра [1-2].

Стабилизация обладает важным преимуществом перед другими методами. Она может быть объединена с методами квантовой химии, что во многих случаях значительно упрощает процедуру расчета параметров резонансных состояний (в том числе, отрицательных ионов). При этом можно использовать пакеты современных квантово-химических программ с минимальной модификацией их исходного кода.

В настоящее время существует несколько различных вариантов стабилизации, из которых, на наш взгляд, наиболее значимой является стабилизация однородно заряженной сферой [1, 3-4]. Большинство других видов стабилизации требуют точного или приближенного соблюдения граничных условий Дирихле, налагаемых на волновую функцию системы. Приближенное соблюдение условий приводит к ошибкам в вычислениях, а точное затруднительно использовать для решения электронной задачи с параметризованными базисами безузловых гауссовых функций, которые применяются в большинстве современных методов квантовой химии. Метод стабилизации однородно заряженной сферой лишен этих недостатков, поскольку предполагает дискретизацию непрерывного спектра за счет наложения потенциала однородно заряженной сферы. В этом случае можно точно записать условия непрерывности волновой функции (граничные условия) на поверхности сферы.

В формализме стабилизации заряженной сферой существует ряд нерешенных проблем. Во-первых, на сегодняшний день теоретический аппарат метода не развит настолько, чтобы связать основные этапы стабилизации: построение зависимости энергий стабилизированных состояний непрерывного спектра от некоторого параметра (стабилизационного) и вычисление резонансных параметров по полученным зависимостям. Во-вторых, известно, что оценки резонансных параметров зависят от выбора стабилизированного корня и значений параметров стабилизирующего потенциала. Для подавления первой проблемы на практике делают усреднение результатов от нескольких стабилизированных корней в отсутствие какого-либо обоснования. А причины возникновения второй проблемы на данный момент не выявлены.

В связи с изложенным, актуальной является разработка методики применения стабилизации однородно заряженной сферой (в общем случае – стабилизации асимптотическим потенциалом) для точной оценки параметров резонансных состояний, что определяет цель и задачи диссертационной работы.

**Цель исследования** состоит в разработке математического аппарата и схемы проведения расчетов с использованием стабилизации асимптотическим потенциалом для точной оценки параметров молекулярных резонансных (метастабильных) состояний в случае одного открытого канала.

Для реализации цели были поставлены следующие задачи:

- а) разработать математический аппарат стабилизации асимптотическим потенциалом для вычисления энергий и ширины резонансных состояний в случае одного открытого канала;
- б) проверить схему расчета, разработанную на основе данного математического аппарата, на примерах модельных систем с целью выявления причин возникновения ошибок в получаемых параметрах резонансных состояний;
- в) применить созданную схему для расчета резонансного состояния реальной системы – аниона водорода  $\text{H}^-$ .

#### **Научная новизна работы**

1. Впервые разработан математический аппарат расчета функций фазового сдвига с помощью техники стабилизации резонансных состояний асимптотическим потенциалом путем явного учета граничных условий, накладываемых на волновую функцию непрерывного спектра.
2. Проведено сравнение эффективности методов стабилизации модифицированным потенциалом сферы переменного и постоянного зарядов.
3. Впервые сопоставлены результаты расчетов, полученные с использованием различных типов стабилизирующих потенциалов.
4. Проанализирована эффективность различных способов расчета функции фазового сдвига по стабилизационным зависимостям.

#### **Практическая значимость**

Показана возможность применения разработанной методики (схемы расчета) для моделирования процессов одноканального рассеяния нерелятивистских частиц для потенциала мишени ( $V(r)$ ), затухающего на бесконечности быстрее чем  $1/r^2$ . Кроме того, данная методика может быть расширена на процессы многоканального рассеяния. Результаты, полученные в настоящей работе, могут быть применены в организациях, занимающихся химией низкотемпературной плазмы, изучением процессов рассеяния, химической кинетикой. Диссертация выполнена при поддержке грантов РФФИ № 06-03-32346 «Развитие неэмпирических методов расчета возбужденных и метастабильных состояний молекул» и № 09-03-00655 «Развитие новых численных методов квантовохимического моделирования основных, возбужденных и резонансных состояний молекул и кластеров».

#### **На защиту выносятся**

1. Математический аппарат стабилизации асимптотическим потенциалом и методика его применения для вычисления параметров резонансных состояний.
2. Результаты численной проверки разработанной методики на примере трех различных одноканальных модельных систем.
3. Результаты расчетов параметров низшего резонансного  $^1\text{S}$  состояния аниона водорода  $\text{H}^-$ .

#### **Апробация работы**

Материалы исследований были представлены и обсуждены на научных конференциях: на XI-м Европейском форуме по квантовым системам в химии и физике (QSCP-XI, Санкт-Петербург, 2006); на XIV-й международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» (Москва, 2007); на XVII-й

Европейской конференции по динамике молекулярных систем (MOLEC-XVII, Санкт-Петербург, 2008); на IV-ой школе-семинаре молодых ученых по квантово-химическим расчетам структуры и реакционной способности органических и неорганических молекул (Иваново, 2009).

### Публикации

По результатам диссертации опубликовано 2 статьи в журналах (из перечня ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертации на соискание ученой степени доктора и кандидата наук), 5 работ в сборниках тезисов научных конференций.

### Объем и структура работы

Диссертация состоит из введения, литературного обзора (глава 1), описания теоретического аппарата используемого метода (глава 2), исследования метода на примерах модельных задач и реальной системы (главы 3-4), заключения, списка использованных литературных источников, приложений и списка использованных в тексте сокращений. Работа изложена на 126 страницах машинописного текста, содержит 21 рисунок и 25 таблиц. Библиография включает 121 наименование.

### Основное содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность исследования метастабильных (резонансных) состояний с помощью стабилизационного метода; сформулированы цели и задачи настоящей работы.

В **главе 1** представлен литературный обзор, посвященный исследованию резонансных состояний с помощью стабилизационного метода. В первом параграфе этой главы дано краткое описание сущности метода, рассмотрены возможные типы его реализации и их особенности. В результате анализа различных вариантов стабилизации сделан вывод о наибольшей перспективности среди них метода стабилизации однородно заряженной сферой [1, 3-4]. Этот метод взят в настоящей работе за основу при разработке методики вычисления параметров резонансных состояний (их энергий  $E_{res}$  и ширин  $\Gamma$ ) для случая одного открытого канала.

Во втором параграфе дано описание вариантов численной процедуры расчета резонансных энергий и ширин на основании данных о зависимостях энергии стабилизированного состояния непрерывного спектра от стабилизационного параметра (так называемых «стабилизационных зависимостях»).

В завершающем параграфе первой главы представлен обзор применения метода стабилизации к исследованию низшего резонансного  $^1S$  состояния аниона  $H^-$ , который был выбран в настоящем исследовании в качестве реально существующей системы для апробации разработанной методики.

В **главе 2** представлен разработанный теоретический аппарат метода стабилизации асимптотическим потенциалом для одночастичной системы, состоящей из одного открытого канала, с рассеивающим потенциалом  $V(r)$ , который при больших значениях переменной  $r$  убывает быстрее чем  $\sim 1/r^2$ . В настоящей работе асимптотический потенциал однородно заряженной сферы был заменен на

$$V_{\alpha\alpha}(r) = \begin{cases} V_0 - \frac{Ze^2}{r^m} & r \geq R, \\ 0 & r \leq R \end{cases}, \quad m=1, 2, \infty \quad (1)$$

во избежание искажения дискретного спектра при варьировании стабилизационного параметра - заряда сферы или ее радиуса. Для формулы (1):  $0 \leq E_{res} \leq V_0$ ;  $V_0 = Ze^2/R^m$

для  $m=1, 2$  и  $V_0=Const$  для  $m \rightarrow \infty$ ;  $V_0$  – параметр, соответствующий высоте потенциала;  $R$  и  $Z$  – параметры, аналогичные радиусу и заряду сферы;  $e$  – абсолютная величина заряда электрона. Потенциал (1) разбивает область определения волновой функции на два интервала: внутренний (I,  $0 < r < R$ ) и внешний (II,  $r > R$ ) (Рис. 1).

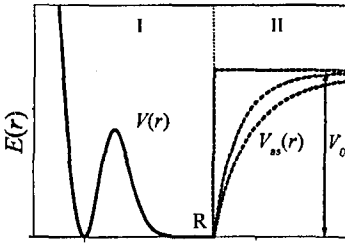


Рис. 1. Разбиение области определения волновой функции. Штриховые линии обозначают асимптотические потенциалы для  $m=1, 2, \infty$ .

Разбиение области определения проводилось таким образом, чтобы волновая функция для внутренней области  $\varphi(r)$  могла быть представлена в виде

$$\varphi_1(r)|_{r \rightarrow R} = A \sin(kr + \theta - l\pi/2), \quad (2)$$

где  $k^2 = 2ME/\hbar^2$ ,  $\hbar$  – циклическая константа Планка,  $M$  – масса частицы,  $\theta$  – фазовый сдвиг,  $E$  ( $E > 0$ ) – энергия квазидискретного состояния,  $A$  – нормировочный множитель,  $l=0$ . Для внешней области волновая функция будет иметь разный вид в зависимости от типа потенциала (1):

$$\varphi_{II}(r) = xU(1-a, 2, x) \exp(-x/2) \quad m=1, \quad (3a)$$

$$\varphi_{II}(r) = x'U(t, 2t, x) \exp(-x/2) \quad m=2, \quad (3b)$$

$$\varphi_{II}(r) = \exp(-r\sqrt{2M(V_0 - E)/\hbar^2}) \quad m \rightarrow \infty. \quad (3b)$$

Здесь  $U(\beta, \gamma, x)$  – функция Трикоми [5], параметры которой ( $\beta$  и  $\gamma$ ) определены для каждого вида потенциала отдельно;  $x = r/\lambda$ ;  $\lambda = \hbar(8M(V_0 - E))^{-1/2}$ ;  $a = 2MZe^2\lambda/\hbar^2$ ;  $t = 1/2 \pm i\sqrt{a-1/4}$ . Воспользовавшись условием непрерывности волновой функции в виде равенства ее логарифмических производных в точке  $r=R$ , получим выражения, связывающие фазовый сдвиг  $\theta$  с энергией  $E$  и параметрами асимптотического потенциала  $R, V_0$  (или  $Z$ ):

$$\operatorname{tg}(kR + \theta) = \frac{1}{2} x \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} \left[ 1 + \frac{x}{U(1-a, 2, x)} \frac{dU(1-a, 2, x)}{dx} - \frac{x}{2} \right]^{-1} \Bigg|_{x=R/\lambda}, \quad m=1 \quad (4a)$$

$$\operatorname{tg}(kR + \theta) = \frac{1}{2} x \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} \left[ t + \frac{x}{U(t, 2t, x)} \frac{dU(t, 2t, x)}{dx} - \frac{x}{2} \right]^{-1} \Bigg|_{x=R/\lambda}, \quad m=2 \quad (4b)$$

$$\operatorname{tg}(kR + \theta) = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}. \quad m \rightarrow \infty \quad (4b)$$

Формулы (4a-в) позволяют построить функции фазового сдвига  $\theta(E)$  на основе стабилизационных зависимостей. Используя эти зависимости, возможно вычислить резонансные параметры, поскольку функция фазового сдвига связана с энергией ( $E_{res}$ ) и шириной ( $\Gamma$ ) резонансного состояния соотношением [6]

$$\frac{d\theta}{dE} = \frac{d\eta}{dE} + \frac{d\delta}{dE} = \frac{d\eta}{dE} + \frac{\Gamma/2}{(E - E_{res})^2 + \Gamma^2/4}, \quad (5)$$

где  $\delta$  и  $\eta$  – резонансная и нерезонансная компоненты фазового сдвига  $\theta$ . В окрестности энергии резонансного состояния резонансная компонента изменяется гораздо быстрее нерезонансной компоненты, и изменениями последней можно пренебречь, как это было сделано в [2]. Однако можно считать функцию  $\eta(E)$  линейной, что позволяет рассматривать ее производную  $d\eta/dE$  как постоянную величину.

Во второй главе также подробно проанализирована и показана возможность приближенного вычисления производной фазового сдвига (5) с использованием производной по стабилизационному параметру  $R$

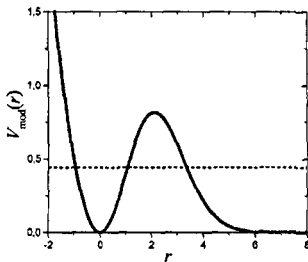
$$\left| \frac{dE}{dR} \right|^{-1} \Big|_{E=E_{res}} \approx \left( \frac{d\theta}{dE} \right)_{E=E_{res}}. \quad (6)$$

**Глава 3** посвящена исследованию метода стабилизации асимптотическим потенциалом на примерах решения модельных задач.

### 3.1. Исследуемые модельные системы

Первый объект (Система I) – одноканальная система с модельным потенциалом Хейзи-Тейлора [2] – (7). Для нее известны точные значения энергии и ширины резонанса, а также функция фазового сдвига  $\theta(E)$  [2].

$$V_{mod}(r) = \begin{cases} 0.5r^2, & r \leq 0 \\ 0.5r^2 \exp(-\lambda r^2), & r \geq 0 \end{cases}, \quad \lambda = 0.225. \quad (7)$$

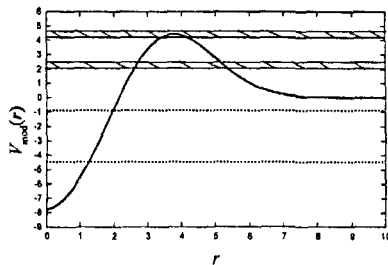


**Рис. 2.** Модельный потенциал Хейзи-Тейлора ( $\lambda=0.225$ ). Пунктирной линией показано положение резонансного состояния.

Система II – также одноканальная, использовавшая модельный потенциал, взятый из работы [7]

$$V_{mod}(r) = A \exp(-\alpha(r-r_0)^2) - B \exp(-\beta r^2). \quad (8)$$

Параметры потенциала:  $A = 5$ ,  $B = 8$ ,  $\alpha = 0.25$ ,  $\beta = 0.2$ ,  $r_0 = 3.5$ . Для этого потенциала существуют независимые расчеты энергий и ширин резонансных состояний [7], что позволяет оценить надежность полученных нами данных.



**Рис. 3.** Модельный потенциал Системы II. Пунктирными линиями отмечены положения связанных состояний, заштрихованные области соответствуют резонансным состояниям.

Система III – двухканальная с резонансными состояниями, возникающими за счет связывания открытого и закрытого каналов. Вид и параметры потенциалов

выбраны по аналогии с работой [8].

$$V_{closed}(r) = D_e(1 - \exp(-\alpha(r - r_e)))^2 \text{ и } V_{open}(r) = A \exp(-\beta(r - r_c)), \quad (9)$$

где  $D_e = 2.0$ ,  $\alpha = 0.5$ ,  $r_e = 3.2$ ,  $A = 1.0$ ,  $\beta = 2.5$ ,  $r_c = 4.45$ . В качестве связывающего был выбран потенциал  $V_{12} = 0.113908$  а.е.

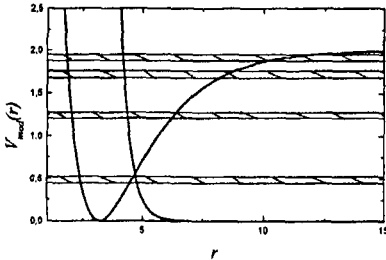


Рис. 4. Модельная Система III. Штрихованные области соответствуют резонансным состояниям.

### 3.2. Детали численной процедуры

Для нахождения функции фазового сдвига и параметров резонансных состояний строились два типа стабилизационных зависимостей: с варьированием радиуса сферы ( $R$ ) при фиксированной высоте потенциала  $V_0$  (или при фиксированном заряде  $Z$ ) и с варьированием параметра  $V_0$  (или  $Z$ ) — при фиксированном радиусе сферы. Первый тип построения стабилизационных зависимостей далее будем называть радиальной стабилизацией, а второй — зарядовой стабилизацией.

Для всех рассматриваемых нами модельных задач уравнение Шредингера может быть представлено в виде системы связанных дифференциальных уравнений второго порядка

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + V_{ii}(r) + V_{as}(r) - E \right] \varphi_i(r) = \sum_{j=1}^K V_{ji}(r) \varphi_j(r), \quad i = 1, \dots, K \quad (10)$$

где  $V_{as}(r)$  — стабилизирующий потенциал,  $V_{ii}(r)$  — потенциал  $i$ -го канала (в настоящей работе  $V_{ii}(r)$  соответствует выбранному модельному потенциалу),  $V_{ji}(r)$  — потенциал, связывающий  $j$ -й и  $i$ -й каналы,  $K$  — число каналов,  $M$  — масса квазичастицы ( $M = 1$  а.е.). Для двухканальной Системы III за нулевое значение энергии  $E$  было взято положение границы непрерывного спектра для открытого канала (9).

Система уравнений (10) решалась с помощью пятиточечной конечно-разностной схемы (Метод А). В этом случае диагональные блоки  $H^{\mu}$  матрицы гамильтониана ( $H$ ) представляют собой пятидиагональные матрицы размерности  $N \times N$  с ненулевыми элементами вида

$$\begin{aligned} H_{n-2,n}^{\mu} &= H_{n,n-2}^{\mu} = \frac{\hbar^2}{24M\xi^2}, \\ H_{n-1,n}^{\mu} &= H_{n,n-1}^{\mu} = -\frac{16\hbar^2}{24M\xi^2}, \\ H_{n,n}^{\mu} &= \frac{30\hbar^2}{24M\xi^2} + V_{ii}(r_n) + V_{as}(r_n), \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\xi$  — шаг интегрирования,  $N$  — число точек интегрирования. Недиагональные блоки  $H^{\mu}$  задаются связывающими потенциалами  $H_{n,n}^{\mu} = -V_{ji}(r_n)$ .



Кроме того, система уравнений (10) решалась разложением волновой функции по базисам интегрируемых с квадратом функций. Первый тип базисного набора – это собственные функции гармонического осциллятора (функции Эрмита – Метод Б)

$$\chi_n(r) = (b/\pi)^{1/4} (2^n n!)^{-1/2} \exp(-br^2/2) H_n(r\sqrt{b}), \quad (12)$$

где  $H_n(r\sqrt{b})$  – полином Эрмита  $n$ -й степени,  $b$  – положительный параметр.

Второй тип базиса – базис функций Лагерра (Метод В)

$$\chi_n(r) = C_n \exp(-br/2) (br)^{k+1} L_n^{2k}(br), \quad (13)$$

где  $L_n^{2k}(br)$  – присоединенный полином Лагерра;  $n, k \geq 0$ ;  $r$  – независимая переменная;  $b > 0$  – масштабирующий множитель и  $C_n$  – нормирующий множитель.

Третий тип базиса – базис негруппированных безузловых гауссовых функций (Метод Г) равномерного приближения («even-tempered»)

$$\chi_n(r) = \left( \frac{4^l b_n^l}{(2l_n - 1)!} \right)^{1/2} \left( \frac{2b_n}{\pi} \right)^{1/4} \cdot r^{l_n} \cdot \exp(-b_n r^2), \quad l_n = 0, 1, 2, \dots, \quad (14)$$

где  $b_n > 0$ ,  $b_n = b_0/c^{n-1}$  – геометрическая прогрессия со знаменателем  $1/c$  и первым членом ряда  $b_0$  ( $n=1, 2, \dots$ ).

Далее, в конце второго параграфа главы 3, приведено описание трех способов вычисления функции фазового сдвига на основе данных о стабилизационных кривых. Первые два способа основаны на построении точной производной  $d\theta/dE$  и подразумевают вычисление функции фазового сдвига из выражения

$$\theta(E) = \arctg \left( \frac{A(k) - \text{tg}(kR)}{1 + A(k) \cdot \text{tg}(kR)} \right), \quad (15)$$

где функция  $A(k)$  равна правой части выражений (4а-в) для стабилизации с потенциалами (1) и равна нулю для стабилизации с граничными условиями Дирихле. Первый способ вычисления  $\theta(E)$  (Способ А) включает в себя точный расчет функции Трикоми, входящей в  $A(k)$ , с помощью алгоритма [9] и соответствующих рекуррентных формул [5]. Второй (Способ Б) – включает приближенный расчет функции Трикоми  $U(\beta, \gamma, x)$  с использованием асимптотического разложения функции  ${}_2F_0(\beta, \beta - \gamma + 1, -1/x)$ , ограниченного первым членом ряда [5]. Последний способ (Способ В) основан на приближенном вычислении  $d\theta(E)/dE$  по значениям производной  $|dE/dR|^{-1}$  (формула (6)). Полученную тем или иным способом производную  $d\theta(E)/dE$  далее аппроксимируют функцией Лоренца (см. формулу (5)) нелинейным методом наименьших квадратов в выбранном интервале энергий в окрестности резонанса.

### 3.3. Выбор параметров базисных наборов для Системы I

Выбор оптимальных параметров проводился на примере радиальной стабилизации с кулоновским стабилизирующим потенциалом ( $m=1$ ). Под параметрами в этом случае следует понимать размер базисного набора  $N$ , множители показателей экспонент  $b$  (12, 13 и 14) и параметры геометрической прогрессии для базисного набора (14). Оптимальным считается такой набор параметров, который позволит получить оценки для энергии и ширины резонансного состояния с вычислительной ошибкой  $\sim 1\%$  по сравнению с точными значениями [2] при минимальном количестве базисных функций. На основании полученных результатов были выбраны для Системы I следующие оптимальные значения параметров базиса функций Эрмита (Метод Б) для дальнейших расчетов:  $N=70$  и  $b=0.2$ ; а для базиса

функций Лагерра (Метод В):  $k=1$ ,  $b=4.0$ ,  $N=70$ .

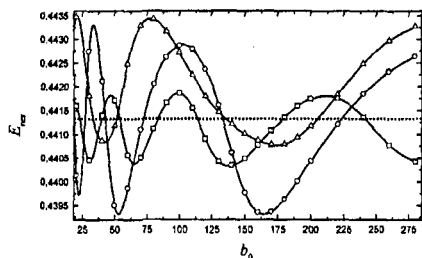


Рис. 5. Энергии резонансного состояния Системы I для  $Z=25$  а.е. Метод Г. Результаты для  $c=2.10$ , отмечены ( $\square$ ),  $c=3.10$  — ( $\circ$ ),  $c=4.0$  — ( $\triangle$ ). Пунктиром обозначено точное значение энергии резонансного состояния.

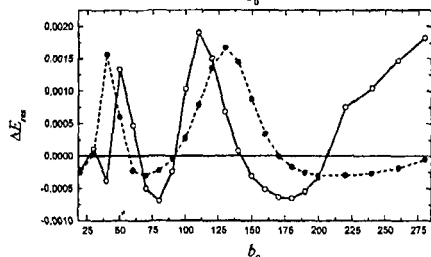


Рис. 6. Разности энергий  $\Delta E_{res}$  для двух низших стабилизированных решений резонансного состояния Системы I для  $Z=25$  а.е. Метод Г. Сплошная линия с ( $\circ$ ) —  $c=2.10$ ; пунктирная с ( $\bullet$ ) —  $c=3.10$ .

В базис гауссовых функций (Метод Г) включалось 15 функций с  $l_n=0$  и 15 функций с  $l_n=1$ , а степени экспонент  $b_n=b_0/c^{n-1}$  ( $n=1,2,\dots$ ) изменялись в геометрической прогрессии ( $c>1$ ). Варьировались значения первого члена прогрессии ( $0.5 \leq b_0 \leq 260$ ) и параметра  $c$  ( $1.9 \leq c \leq 4.0$ ). Для этого базиса было обнаружено, что параметры резонансного состояния, рассчитанные с одинаковыми знаменателями  $c$ , осциллируют в зависимости от значения первого члена прогрессии  $b_0$ . На Рис. 5 показан вид зависимости для энергии. Аналогичная картина наблюдается и для ширины.

Кроме того, соседние стабилизированные корни дают различные значения энергии и ширины. На Рис. 6 показана зависимость для энергии — для ширины аналогично. Таким образом, расчеты резонансных параметров невозможны в наборах безузловых гауссовых функций равномерного приближения из-за систематических ошибок. Поэтому в дальнейших вычислениях этот базисный набор не использовался.

### 3.4. Сравнение способов вычисления резонансных параметров

Проводилось сравнение трех описанных выше способов вычисления резонансных параметров. Найдено, что точность вычисления уменьшается от Способа А к Способу В. В дальнейшем было использовано только точное представление функции Трикоми (Способ А). Приближенный расчет (Способ В) производной  $d\theta(E)/dE$  без вычисления фазового сдвига может применяться в качестве быстрого, но менее точного варианта вычисления энергии и ширины резонансного состояния. Например, для инициализации метода наименьших квадратов.

### 3.5. Результаты вычисления резонансных параметров

#### 3.5.1. Модельная Система I

Для Системы I проведен подробный расчет для трех типов асимптотических потенциалов (1) функции фазового сдвига и резонансных параметров в случае как радиальной, так и зарядовой стабилизации. На Рис. 7 представлены различия между точной [2] и вычисленными функциями фазового сдвига ( $\Delta\theta$ ) для случая  $m=1$  при максимальном и минимальном значении  $V_0$  (стабилизация радиальная). Наиболее точный результат дает конечно-разностное решение независимо от величины  $V_0$ .

Менее точные результаты получены с использованием базиса функций Эрмита, а максимальная ошибка найдена для базиса функций Лагерра. Для стабилизирующих потенциалов с  $m=2$  и  $m \rightarrow \infty$  сохраняется последовательность величины отклонения от точного значения: конечно-разностный метод < функции Эрмита < функции Лагерра. Ошибка возрастает при переходе от  $m=1$  к  $m=2$  и от  $m=2$  к  $m \rightarrow \infty$ .

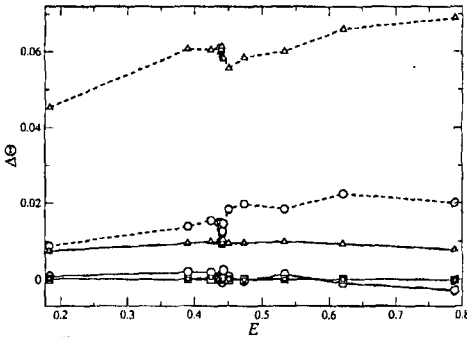


Рис. 7. Зависимость  $\Delta\theta$  (в рад.) от энергии  $E$  (в а.е.). Стабилизация с потенциалом  $m=1$ . Результаты получены с помощью Метода А (□), Метода Б (○), Метода В (△). Сплошные линии соответствуют  $V_0=50$ , а штриховые –  $V_0=400$  а.е.

Полученные на основе данных о фазовом сдвиге параметры резонансного состояния хорошо согласуются с точным ответом. Например, для параметров  $V_0(Z)=50 \div 400$  а.е. при расчете Методами Б и В энергия и ширина резонансного состояния составляют  $0.44130 \div 0.44134$  а.е. и  $0.00896 \div 0.00906$  а.е., соответственно (точное значение:  $E_{res}=0.441333$  и  $\Gamma=0.008996$  а.е. [2]). Наибольшие отклонения значений от точных наблюдаются лишь для потенциала с  $m \rightarrow \infty$ . Обнаружено, что стабилизация потенциалом (1) с определенным значением параметра  $m$  будет давать оценки фазового сдвига высокой точности при условии оптимизации базисного набора под соответствующее значение  $m$  стабилизирующего потенциала. Для дальнейших расчетов нами был выбран потенциал с  $m=1$ , так как именно для него были оптимизированы базисные наборы (12-13).

Зарядовая стабилизация, по сравнению с радиальной, позволяет использовать базисы меньшей размерности (достаточно 50 функций) и приводит к меньшим ошибкам в функции фазового сдвига применительно к Системе I.

### 3.5.2. Модельная Система II

Исследование модельной Системы II проводилось с использованием базисного набора функций Лагерра (Метод В) с параметрами  $b=6.0$  и  $k=1$ , размер базиса варьировался от 60 до 120 функций. Стабилизация проводилась с помощью асимптотического потенциала с  $m=1$  при фиксированном параметре  $V_0=50$  а.е., а также при фиксированном  $R=6 \div 14$  а.е.

Найдено, что энергии и ширины обоих резонансных состояний, полученные методами радиальной и зарядовой стабилизации, выходят с ростом числа базисных функций на определенный предел значений с точностью до  $\sim 1 \cdot 10^{-3}$  а.е. Кроме того, расхождения в оценке энергии и ширины (радиальная стабилизация) для различных стабилизированных решений практически отсутствуют или не превышают  $5 \cdot 10^{-4}$ . Энергии резонансных состояний, полученные в рамках зарядовой стабилизации, в пределах одного и того же числа базисных функций устойчивы на интервале  $R=6-14$  а.е., за исключением второго резонансного состояния при значении радиуса  $R=6$  а.е. Ширины оказались более чувствительными по отношению к изменению радиуса: при  $R=6$  а.е. наблюдаются максимальные ошибки, которые уменьшаются с ростом  $R$ .

Результаты, полученные с помощью стабилизации асимптотическим

потенциалом, сравнивались как с результатами стабилизации с граничными условиями Дирихле и внешнего комплексного масштабирования, так и с литературными данными [7]. Оценки, полученные стабилизацией асимптотическим потенциалом, являются оценками сверху по отношению к результатам альтернативных вычислений. В Таблице 1 представлены значения резонансных параметров для первого состояния. Для второго резонансного состояния все описанные наблюдения также верны.

**Таблица 1.** Энергии и ширины первого резонансного состояния Системы II в зависимости от числа базисных функций ( $N$ ).

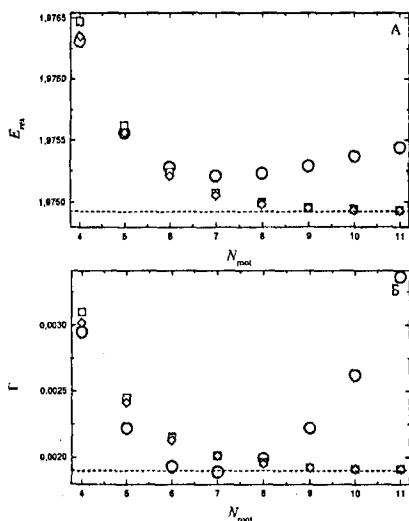
Метод $N$	Радиальная стабилизация	Зарядовая стабилизация	Стабилизация с граничными условиями Дирихле**	Внешнее комплексное масштабирование**	Работа [7]
$E_{res}$					
60	2.25511	2.25510	2.25236	2.25236	2.25238
140	2.25356	2.25355			
$\Gamma$					
60	0.00012	0.00012	0.00012	0.00012	0.00012
140	0.00012	0.00014			

\*Стабилизация асимптотическим потенциалом ( $m=1$ ).

\*\*Реализованы с помощью конечно-разностного метода.

### 3.5.3. Модельная Система III

Исследование двухканальной Системы III проводилось аналогично исследованию одноканальной Системы II, с той лишь разницей, что параметр базисной функции Лагерра  $b=4.0$ . Наблюдается значительное расхождение параметров, найденных для разных стабилизированных решений, при резонансном состоянии с энергией, близкой к границе непрерывного спектра для закрытого канала (потенциала Морзе). Максимальные отклонения энергии и ширины найдены для низших по энергии стабилизированных решений (Рис. 8).



**Рис. 8.** Зависимость энергии (Рис. 8А) и ширины (Рис. 8Б) резонансного состояния от номера стабилизированного решения ( $N_{root}$ ) для базисов различного размера (40 функций —  $\circ$ , 80 —  $\square$ ). Результаты стабилизации с граничными условиями Дирихле —  $\diamond$  и внешнего комплексного масштабирования — штриховая линия.  $V_0=50$  а.е. Низшим по энергии решениям соответствуют низшие порядковые номера.

Расхождение энергий и ширин, полученных для разных стабилизированных решений, не обусловлено разложением волновой функции по базису, поскольку этот эффект наблюдается и для метода стабилизации с граничными условиями Дирихле, реализованного с помощью конечных разностей. Эффект связан с медленным выходом волновой функции на асимптотический предел, вследствие чего для низших по энергии решений возникает систематическая ошибка в функции фазового сдвига. Эта ошибка уменьшается с увеличением радиуса сферы, что соответствует переходу к решениям с большей энергией. У остальных резонансных состояний подобный эффект практически отсутствует, и расхождение в энергиях и ширинах не превышает 0.1% для соседних решений.

Для зарядовой стабилизации также было обнаружено, что с изменением радиуса  $R$  резонансные параметры значительно изменяются – и наиболее сильно для вышележащего (четвертого) резонансного состояния. Полученные значения резонансных параметров отклоняются от точных гораздо сильнее, нежели те значения, что были вычислены с помощью стабилизации с фиксированным параметром  $V_0$ .

#### 3.5.4. Особенности зарядовой стабилизации

При работе с зарядовой стабилизацией возникли технические трудности с построением функции фазового сдвига и его производной  $d\theta(E)/dE$ . Во-первых, при малых значениях параметра  $R$  наблюдались разрывы на функциях  $\theta(E)$  и  $d\theta(E)/dE$ , полностью или частично исчезающие при увеличении радиуса (как уже было сказано, волновая функция медленно выходит на асимптотический предел). Подобные разрывы не вносили значительную ошибку в полученные параметры резонансных состояний в случае Системы II, но сильно искажали ответ для Системы III, особенно для состояния, расположенного ближе всего по энергии к границе непрерывного спектра закрытого канала. Во-вторых, для узких резонансных состояний (для первого состояния в Системе II) сплайн-интерполяция функции фазового сдвига, применявшаяся для построения производной  $d\theta(E)/dE$ , обнаруживает неустойчивости, что может нивелироваться дальнейшей аппроксимацией методом наименьших квадратов. Таким образом, найденный в двухканальной задаче и слабо проявившийся в Системе II эффект искажения резонансных параметров при малых  $R$  возникает вследствие неправильного выбора области его значений. Использование зарядовой стабилизации возможно только при аккуратном выборе параметра  $R$ , чтобы избежать разрывов на кривой фазового сдвига. Однако и в этом случае процедура остается достаточно неустойчивой, что затрудняет ее применение. Вследствие этих технических затруднений, считаем радиальную стабилизацию более удобной для дальнейшего применения.

#### 3.6. Выводы по итогам решения модельных задач.

В случае применения метода стабилизации асимптотическим потенциалом при оценке фазового сдвига, а следовательно, энергий и ширин резонансных состояний, ошибки возникают благодаря нескольким факторам. Главным из них является выбор метода и точность решения уравнения Шредингера. Наиболее точным из опробованных нами является метод конечных разностей. В случае использования разложения волновой функции по базисным функциям основным источником ошибок является неполнота базисного набора. В этом случае возникает необходимость оптимизировать размер базисного набора (количество базисных функций) и параметр(ы), определяющие степень их локализации. Кроме того, неудачный выбор типа базисных функций, в частности несгруппированных безузловых гауссовых

функций равномерного приближения, может привести к систематическим ошибкам в функции фазового сдвига.

Глава 4 посвящена применению метода стабилизации к исследованию низшего резонансного  $^1S$  состояния аниона водорода  $H^-$ . За последние 40 лет анион многократно исследовался, что позволяет сравнить наши результаты с данными независимых исследований.

#### 4.1. Исследуемая система

В атомной системе единиц электронный гамильтониан для аниона  $H^-$  имеет вид (в приближении бесконечно тяжелого ядра)

$$H_e = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \Delta_i - \sum_{i=1}^2 \frac{Z_N}{r_i} + \sum_{i=1}^2 V_{as}(r_i) + \frac{1}{r_{12}}, \quad (16)$$

где  $r_i$  – абсолютная величина радиус-вектора  $\vec{r}_i$ ,  $Z_N$  – заряд ядра ( $Z_N = 1$ ),  $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$  – расстояние между электронами и  $V_{as}(r_i)$  – стабилизирующий потенциал, представляющий собой частный случай потенциала (1) с  $m=1$

$$V_{as}(r_i) = \begin{cases} V_0 - \frac{Z}{r_i} & r_i \geq R, \\ 0 & r_i \leq R \end{cases}, \quad (17)$$

где  $R$  и  $Z$  – положительные параметры, связанные условием  $V_0 = Z/R$ .

#### 4.2. Детали численной процедуры

В первой части Параграфа 4.2 описан вид волновой функции  $\Psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2)$  и составляющих ее конфигурационных функций состояния (КФС)  $\Phi_n(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2)$ , собственных для операторов  $\hat{S}_2$  и  $\hat{S}^2$

$$\Psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \sum_n C_n \Phi_n(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2), \quad (18)$$

где  $\vec{r}_i$  и  $\sigma_i$  – радиальные и спиновые переменные электронов;  $\langle \Psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) | \Psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) \rangle = 1$ . КФС в базисе ортонормированных одночастичных функций  $\{\varphi_i\}$  ( $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$ ), зависящих от пространственных координат частиц:

$$\Phi_n^1 = \Phi_n^1 = 1/\sqrt{2} \varphi_i(1)\varphi_j(2) [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)], \quad (19a)$$

$$\Phi_n^2 = \Phi_n^2 = 1/2 [\varphi_i(1)\varphi_j(2) + \varphi_j(1)\varphi_i(2)] [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)], \quad (19b)$$

Индексы «1» и «2» обозначают пространственные или спиновые переменные электронов. Во избежание дублирования КФС в разложении (18) на индексы орбиталей  $\varphi_i$  для КФС вида (19b) наложено условие  $i < j$ .

Далее в Параграфе 4.2 приведены выражения для интегралов одноэлектронного и двухэлектронного операторов в базисе КФС, а затем – в базисе одночастичных функций (20).

$$\varphi_i \equiv |\varphi_{NLM}(br, \theta, \varphi)\rangle = R_N^L(br) Y_L^M(\theta, \varphi), \quad (20)$$

$$R_N^L(br) = N(N, L)(br)^L e^{-\frac{br}{2}} L_N^{2L+2}(br), \quad (21a)$$

$$Y_L^M(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{|M|-M}{2}} N(L, M) P_L^{|M|}(\cos\theta) e^{iM\varphi}, \quad (21b)$$

где  $L_N^{2L+2}(br)$  – присоединенный полином Лагерра;  $b$  – масштабирующий множитель;  $N(N, L) = \sqrt{b^3 N! / (N+2L+2)!}$ ;  $Y_L^M(\theta, \varphi)$  – сферическая гармоника;  $P_L^{|M|}(\cos\theta)$  –

присоединенный полином Лежандра;  $N(L, M) = (4\pi)^{-1/2} \sqrt{(2L+1)(L-|M|)!/(L+|M|)!}$ . На индексы полинома  $P_L^{LM}(\cos\theta)$  наложено условие  $-L \leq M \leq L$ .

Параметры резонансного состояния  $^1S$  аниона  $H^-$  были получены радиальной стабилизацией ( $V_0=50$  а.е.) с использованием вычислительной процедуры, описанной в главе 3. Задача на собственные значения с гамильтонианом (16) решалась в приближении полного конфигурационного взаимодействия (ПКВ). Базисы одночастичных функций (20) строились из  $N_L$  присоединенных полиномов Лагерра со степенями  $0, 1, 2, \dots, N_L-1$  для угловых частей с моментами  $0, 1, 2, \dots, L$  и проекциями момента  $M (-L \leq M \leq L)$ .

#### 4.3. Результаты вычислений

Для проверки вычислительной схемы были найдены энергии основного  $^1S$  состояния аниона  $H^-$ , и только затем – энергии низшего резонансного  $^1S$  состояния.

Первоначально энергии и ширины резонансного состояния были вычислены для трех фиксированных значений масштабирующего множителя  $b=1.0, 1.5, 2.0$  (Рис. 9). Оказывается, энергия и ширина зависят не только от стабилизированного решения, но и от величины параметра  $b$ . Подобные зависимости уже наблюдались ранее при использовании методов квантовой химии и описаны в литературе [4], и именно они являются серьезным препятствием на пути применения метода стабилизации.

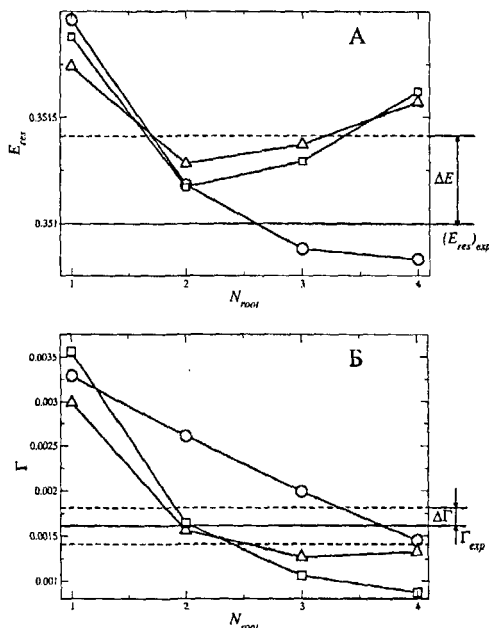


Рис. 9. Зависимость энергии (Рис. 9А) и ширины (Рис. 9Б) резонансного состояния  $^1S$  аниона  $H^-$  (в а.е.) от номера корня ( $N_{root}$ ) для  $V_0=50$  а.е. в базе  $19s18p17d$ . (○) отмечены результаты для  $b=1.0$ , (□) – для  $b=1.5$ , (△) – для  $b=2.0$ . Прямой горизонтальной линией показано экспериментальное значение:  $(E_{res})_{exp} \pm \Delta E = 0.351 \pm 0.0004$  а.е.,  $\Gamma_{exp} \pm \Delta \Gamma = 0.0016 \pm 0.0002$  а.е. [10].

В связи с этим мы провели серию дополнительных расчетов с малым шагом по параметру  $b$  (Рис. 10). Анализ результатов этих расчетов показывает, что при варьировании величины масштабирующего множителя  $b$  значения  $E_{res}$  и  $\Gamma$  осциллируют с амплитудой  $\sim 0.0005$  и  $\sim 0.001$  а.е. Причем, для второго и третьего стабилизированных решений в базе функций с максимальным  $L \geq 2$  эти осцилляции попадают в окрестность экспериментальных значений:  $E_{res} = 0.351 \pm 0.0004$  а.е.,  $\Gamma = 0.0016 \pm 0.0002$  а.е. [10].

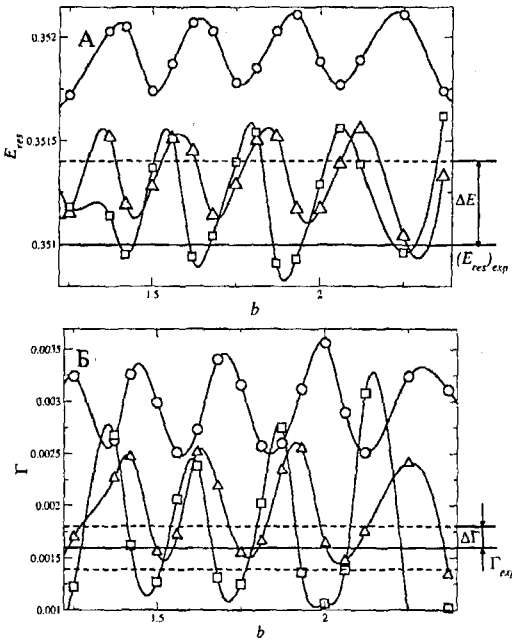


Рис. 10. Зависимость энергии (Рис. 10А) и ширины (Рис. 10Б) резонансного состояния  $^1S$  аниона  $H^-$  (в а.е.) от параметра  $b$  для  $V_0=50$  а.е. в базисе  $19s18p17d$ . (○) отмечены результаты для 1-го корня, (△) – для 2-го, (□) – для 3-го. Прямой горизонтальной линией показано экспериментальное значение:  $(E_{res})_{exp} \pm \Delta E = 0.351 \pm 0.0004$  а.е.,  $\Gamma_{exp} \pm \Delta \Gamma = 0.0016 \pm 0.0002$  а.е. [10].

Наибольшее отклонение от экспериментального значения в оценках энергии резонансного состояния наблюдается для базисов с  $s$ - и  $p$ -функциями. Более точный ответ получен для базисов с  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -функциями. Включение функций со старшими моментами к заметным изменениям в значениях энергии не приводит. Аналогичная картина наблюдается и для ширины резонанса, отличающаяся лишь тем, что расширение базисного набора уже за счет функций с  $L \geq 2$  практически не влияет на значения ширины.

Для второго и третьего корней (при  $L \geq 2$ ) в окрестностях значений  $b \sim 1.5, 1.75, 2.0$  оценки энергии и ширины практически совпадают в пределах одного и того же значения  $b$  и оказываются наиболее близкими к точному ответу (Таблица 2 и Рис. 10).

Таблица 2. Энергии и ширины в точках пересечения значений резонансных параметров для соседних корней. Базис  $19s18p17d$ .

Параметр Решение	$E_{res}$			$\Gamma$		
	1	2	3	1	2	3
$b$						
1.52	0.35175	0.35137	0.35146	0.00274	0.00154	0.00141
1.77	0.35177	0.35136	0.35148	0.00287	0.00153	0.00139
2.06	0.35177	0.35138	0.35156	0.00289	0.00147	0.00138

Несовпадение параметров резонансных состояний, вычисленных для соседних решений, ранее уже было отмечено при расчетах многочастичных систем и объяснялось недостаточным учетом корреляционных эффектов [4]. Представленные в настоящей главе результаты были получены в приближении ПКВ (то есть с полным учетом корреляции для заданного базисного набора), однако эффект несовпадения резонансных параметров сохранился. Систематического варьирования значений



экспонент для базисов гауссовых функций в этих работах не проводилось, поэтому судить о присутствии в них осцилляции параметров резонансного состояния можно только по различию результатов для соседних корней. Отметим, что аналогичный эффект обсуждался нами применительно к одночастичной задаче в базисе гауссовых функций. Принимая во внимание вышесказанное, приходим к выводу, что основной причиной возникающих искажений должны быть особенности построения базисного набора, включая вид и количество базисных функций.

#### 4.4. Выводы по итогам решения задачи об анионе водорода.

Вычисленные энергии и ширины осциллируют в окрестности экспериментальных значений в зависимости от величины параметра  $b$ . Кроме того, вычисленные резонансные параметры различны для разных стабилизированных решений. Причиной осцилляций и расхождений параметров для разных корней являются особенности построения базисного набора, а не корреляционные эффекты.

#### Выводы

1. Разработана математический аппарат и схема проведения расчета функции фазового сдвига и параметров резонансных состояний методом стабилизации асимптотическими потенциалами, применяемая для моделирования процессов упругого (одноканального) рассеяния нерелятивистских частиц для потенциала мишени  $(V(r))$ , затухающего на бесконечности быстрее, чем  $1/r^2$ , т. е.  $\lim_{r \rightarrow \infty} r^2 V(r) = 0$ .

2. Разработанная схема стабилизационного расчета проверена на примерах модельных задач с одним открытым каналом. Путем варьирования параметров вычислительной схемы были выявлены факторы, влияющие на точность оценки резонансных параметров (подробное их перечисление представлено в выводах главы 3). Найдено, что при правильном выборе параметров вычислительной схемы методика позволяет проводить оценку функции фазового сдвига и параметров резонансного состояния с ошибкой не более 0.1%.

3. На примере модельной задачи с потенциалом Хейзи-Тейлора показано, что основной причиной зависимости резонансных энергий и ширин от выбора стабилизированного решения являются особенности построения базисного набора (включая тип и количество базисных функций).

4. Для простейшей реальной системы – аниона водорода  $H^-$  – получены оценки параметров низшего резонансного состояния  $^1S$ . Показано, что эти оценки близки к экспериментальным результатам. В то же время обнаружена сильная зависимость резонансных энергий и ширин от параметров базисного набора и выбора стабилизированного решения.

5. Все результаты настоящего исследования могут быть использованы для последующего расширения методики вычисления резонансных параметров с помощью метода стабилизации на случай многоканального рассеяния.

#### Список литературы

1. Watson R.E. Analytic Hartree-Fock solutions for  $O^{2-}$ . // Phys. Rev. 1958. V. 111. № 4. P. 1108.
2. Hazi A.U., Taylor H.S. Stabilization method of calculating resonance energies: model problem. // Phys. Rev. A. 1970. V.1. № 4. P. 1109.
3. Chao J.S.-Y., Falcetta M.F., Jordan K.D. Application of the stabilization method to the  $N_2^- (1^2\Pi_g)$  and  $Mg^- (1^2P)$  temporary anion states. // J. Chem. Phys. 1990. V. 93. P. 1125.

4. Izmaylov A.F., Adamson S.O., Zaitsevskii A. Multipartitioning many-body perturbation theory calculations on temporary anions: applications to  $N_2^-$  and  $CO^-$ . // J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys. 2004. V. 37. P. 2321.

5. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука. 1979. С. 832. (Гл.13).

6. Breit G. The interpretation of resonances in nuclear reactions. // Phys. Rev. 1940. V. 58. P. 506; Breit G. Handbuch der Physik, edited by S.Flügge. V.41/1. Berlin: Springer-Verlag. 1959.

7. Maier C.H., Cederbaum L.S., Domcke W. A spherical-box approach to resonances. // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1980. V. 13. P. L119.

8. Child M.S., Lefebvre R. Shifts of predissociating levels of diatomic molecules analytical and numerical determination. // Molecular Physics. 1977. V. 34. № 4. P. 979.

9. Zuo L., Humbert M., Esling C. An effective algorithm for calculation of the Clebsch-Gordan coefficients. // J. Appl. Cryst. 1993. V. 26. P. 302.

10. McGowan J. W. Lowest  $^1S$  and  $^3P$  Scattering resonances in the e-H system. // Phys. Rev. 1967. V. 156. № 1. P. 165.

**Основное содержание работы изложено в следующих публикациях**

1. Adamson S., Kharlampidi D., Dement'ev A. / Stabilization of resonance states by an asymptotic Coulomb potential // J. Chem. Phys. 2008. V. 128. PP. 0241011-0241017. (0.75 п.л., авторский вклад 40%)

2. Харлампи́ди Д.Д., Дементьев А.И., Адамсон С.О. / Стабилизация резонансных состояний однородно заряженной сферой с переменным зарядом // Журнал физической химии. 2010. Т. 84. № 4. С. 695-700. (0.63 п.л., авторский вклад 60%)

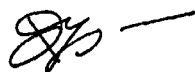
3. Adamson S.O., Dement'ev A.I., Harlampidi D.D. / Use of stabilization method for the calculations of the lowest resonance states of  $H_2^-$  and  $HCl^-$  // XI-th European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XI), Russia, St. Petersburg, August 20-25, 2006. P. 133. (0.12 п.л., авторский вклад 30%)

4. Харлампи́ди Д.Д., Адамсон С.О., Дементьев А.И. / Стабилизация резонансов кулоновским потенциалом // Международных молодежный научный форум «Ломоносов-2007»: Материалы XIV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов». Т. 2. М.: СП «Мысль», 2007. С. 398. (0.04 п.л., авторский вклад 50%)

5. Adamson S.O., Kharlampidi D.D., Dement'ev A.I. / Ab initio calculations of the lowest singlet states of the hydrogen anion // XVII European Conference on Dynamics of Molecular Systems (MOLEC – 2008), Russia, St. Petersburg, August 23-28, 2008. P. 117. (0.12 п.л., авторский вклад 30%)

6. Adamson S.O., Dement'ev A.I., Kharlampidi D.D. / Use of stabilization potentials for the calculations of resonance states // XVII European Conference on Dynamics of Molecular Systems (MOLEC – 2008), Russia, St. Petersburg, August 23-28, 2008. P. 118. (0.12 п.л., авторский вклад 50%)

7. Харлампи́ди Д.Д., Адамсон С.О., Дементьев А.И. / Стабилизация резонансных состояний модифицированным потенциалом однородно заряженной сферы. // Сборник материалов IV-ой школы-семинара молодых ученых «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул» (20-22 мая 2009г.). 2009. Иваново. С. 274-276. (0.34 п.л., авторский вклад 90%)



Подп. к печ. 21.04.2010    Объем 1 п.л.    Заказ № 50    Тир 100 экз.  
Типография МПГУ