

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 539.19; 533.9.15

Атомы Ar и Kr в вариационной модели функционала плотности

**Аслан Хасанович Кяров¹, Оксана Хусеновна Канаметова², Алексей Петрович Савинцев³,
Артур Альбекович Дышеков⁴, Алина Валериевна Бариева⁵, Сати Султановна Калова⁶**

^{1,2,3,4,5,6}Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия

¹aslan.kyarov.61@mail.ru

²kyasova16@mail.ru

³savinal@mail.ru

⁴dyshekov@yandex.ru

⁵barieva.alina2002@icloud.com

⁶sati.kalova@mail.ru

Аннотация. В работе в рамках теории функционала плотности с использованием многопараметрического вариационного принципа исследованы полные энергии, электронные распределения и квантовые поправки к атомам Ar и Kr.

Ключевые слова: электронная плотность, квантовая поправка к кинетической энергии, вариационный принцип, функционал электронной плотности

Для цитирования: Кяров А.Х., Канаметова О.Х., Савинцев А.П., Дышеков А.А., Бариева А.В., Калова С.С. Атомы Ar и Kr в вариационной модели функционала плотности // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, № 2. С. 21–25.

PHYSICS

Original article

Ar and Kr atoms in the density functional variational model

Aslan Kh. Kyarov¹, Oksana Kh. Kanametova², Alexey P. Savintsev³, Artur A. Dyshekov⁴, Alina V. Barieva⁵, Sati S. Kalova⁶

^{1,2,3,4,5,6}Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal'chik, Russia

¹aslan.kyarov.61@mail.ru

²kyasova16@mail.ru

³savinal@mail.ru

⁴dyshekov@yandex.ru

⁵barieva.alina2002@icloud.com

⁶sati.kalova@mail.ru

Abstract. The total energies, electron distributions, and quantum corrections to Ar and Kr atoms are investigated within the framework of density functional theory using the multiparameter variational principle.

Keywords: electron density, quantum correction to kinetic energy, variational principle, electron density functional

For citation: Kyarov A.Kh., Kanametova O.Kh., Savintsev A.P., Dyshekov A.A., Barieva A.V., Kalova S.S. Ar and Kr atoms in the density functional variational model. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026; 16(2):21–25. (In Russ.).

Введение

В связи с бурным развитием нанотехнологий и ее широким применением в медицине и биологии возникает необходимость углубленного изучения и уточнения физических основ, структуры и свойств конденсированных сред.

Целью работы является использование вариационного принципа Ритца в рамках метода функционала электронной плотности для изучения возможностей применения кинетической энергии в локальном приближении и квантовой поправки в форме Киржница при расчете характеристик конденсированных сред на примере атомов инертных газов.

Данная публикация является продолжением работ, начатых в [1–6].

Результаты и обсуждение

Теория неоднородного электронного газа является в настоящее время одним из наиболее мощных методов для различных расчетов во многих разделах физики. Однако теоретическое изучение вызывает значительные сложности.

Одним из методов, позволяющих обойти возникающие сложности, является метод Ритца, применяемый непосредственно к функционалу энергии, зависящему от электронной плотности, содержащей в себе вариационные параметры.

Общие вопросы теории функционала плотности (ТФП) и, в частности, метода Томаса – Ферми, рассмотрены в монографиях [7, 8].

Формально ТФП была завершена в 1964 году работой Пьера Хохенберга и Кона Уайера [8], которые показывали, что все свойства электронной структуры системы в невырожденном основном состоянии полностью определяются ее электронной плотностью.

Выберем наиболее точную аппроксимацию для функционала энергии.

$$E[\rho(r)] = U + K + E_e + E_c + E_q, \quad (1)$$

где $U = U_{en} + U_{ee}$ – классическая кулоновская энергия, K – кинетическая энергия однородного электронного газа.

Градиентная поправка к кинетической энергии выбиралась в форме Киржница [9]:

$$E_q = \frac{1}{72} \int \frac{|\nabla \rho(\vec{r})|^2}{\rho(\vec{r})} d\vec{r}. \quad (2)$$

Необходимость поправки на градиент электронной плотности связана с присущим квантово-статистическим теориям недостатком, обусловленным локальным использованием соотношений для свободных электронов [10].

Электронная плотность атома выбиралась в виде:

$$D(r) = 4\pi r^2 \rho(r) = Nr \left[\sum_{i=1}^2 {}^a\gamma_i {}^a\lambda_i^2 \exp(-{}^a\lambda_i r) + \sum_{j=1}^3 {}^b\gamma_j {}^b\lambda_j ({}^b\lambda_j r - 2) \exp(-{}^b\lambda_j r) \right], \quad (3)$$

где N – число электронов, λ, γ – вариационные параметры. Условия нормировки приводит к связи:

$${}^a\gamma_1 = 1 - {}^a\gamma_2. \quad (4)$$

В функционале энергии градиентная поправка расходится при стремлении $r \rightarrow 0$ как $\ln r$. Необходимо наложить ограничение на электронную плотность:

$$\left. \frac{dD(r)}{dr} \right|_{r=0} = 0. \quad (5)$$

Использование электронных плотностей в виде (3) позволило получить кулоновскую часть энергии в аналитическом виде, что облегчило последующее вычисление функционала энергии и необходимую точность. Значения параметров электронной плотности приведены в *таблице 1*.

Таблица 1 – Параметры электронной плотности (в единицах a_0^{-1} , a_0 – первый Боровский радиус)

Атом	Ar	Kr
$^a\gamma_1$	1,3475	1,9357
$^a\lambda_1$	2,0636	6,029
$^a\gamma_2$	–0,3475	–0,9357
$^a\lambda_2$	32,485	52,84
$^b\gamma_1$	–4,152	–16,31
$^b\lambda_1$	5,045	14,164
$^b\gamma_2$	–8,04	–27,205
$^b\lambda_2$	19,84	38,306
$^b\gamma_3$	0,0	0,8912
$^b\lambda_3$	0,0	2,206

Результаты расчетов показывают высокую точность данной модели при вычислении энергии ионизации любых атомов, включая легкие, что является нетривиальным результатом, учитывая использование квантово-статистической модели. Для атомов инертных газов результаты наших расчетов энергии ионизации оказываются ближе к экспериментальным данным, чем результаты Хартри – Фока (таблица 2).

Таблица 2 – Полная энергия ионизации атомов инертных газов (в атомных единицах)

Атом	Метод ХФ	Данная работа	Эксперимент
Ar	–526,82	–527,67	–527,6 (0,5)
Kr	–2752,05	–2729,7	-

В работе рассчитаны значения кинетической энергии атомов инертных газов. Приведено сравнение с результатами расчетов методом Хартри – Фока (таблица 3).

Таблица 3 – Полная кинетическая энергия (в единицах Хартри)

Атом	Хартри-Фок	Наша модель
Ar	531,1	527,7
Kr	2760	2730

Электронные плотности, полученные в рамках представленной модели, хорошо согласуются с данными Хартри – Фоковской модели: положения минимумов и максимумов практически совпадают (рисунок 1 и 2). Часть электронной плотности из внешней области атома перетягивается во внутреннюю область, обеспечивая за счет электрон-ядерного взаимодействия минимум функционалу. Вблизи ядра Хартри – Фоковская электронная плотность выше, что связано с наложенным на производную от электронной плотности условием (5).

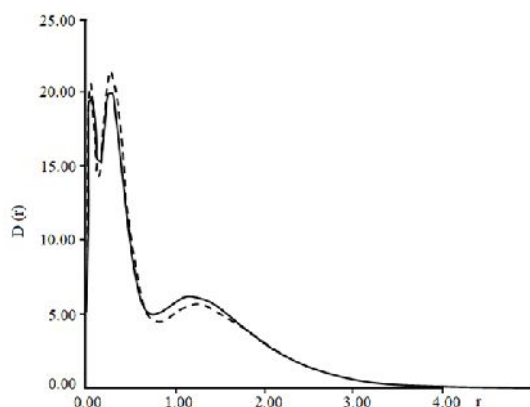


Рисунок 1 – Электронная плотность атома Ag:
— — наши расчеты, - - - - расчеты
в методе Хартри-Фока

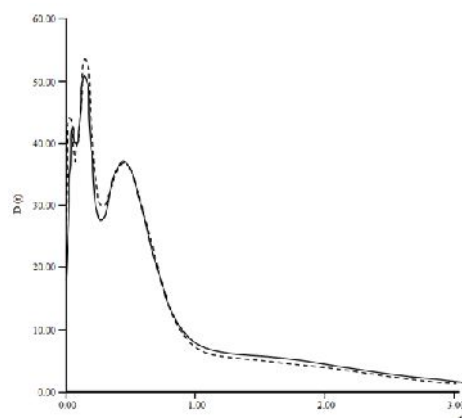


Рисунок 2 – Электронная плотность атома Kr:
— — наши расчеты, - - - - расчеты
в методе Хартри-Фока

Для атома Ag зависимость плотности кинетической энергии от электронной плотности сильно различаются практически во всей области значений электронной плотности, причем в некоторых случаях на порядок. Результаты, полученные с использованием вариационного принципа во всей области значений электронной плотности, выше, чем полученные с использованием Хартри-Фоковских ЭП (рисунок 3).

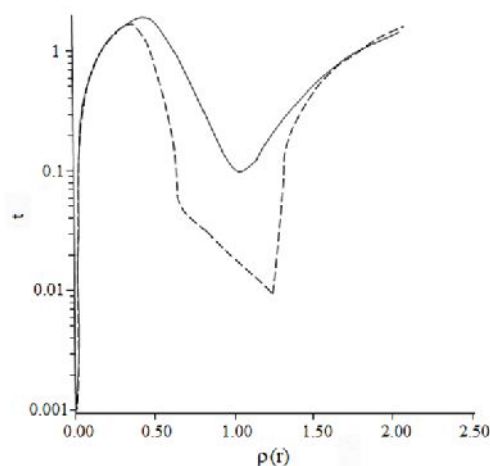


Рисунок 3 – Зависимость плотности кинетической энергии от электронной плотности атома Ag

Расчеты для атома Kr показывают, что плотность кинетической энергии, полученной в нашей работе, практически совпадает с метода Хартри-Фока. Лишь в области значений электронной плотности от 0,3 до 1 плотность кинетической энергии в наших расчетах выше на ~ 20 % (рисунок 4).

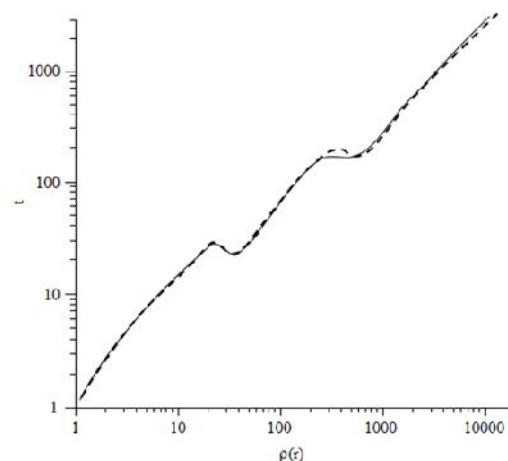
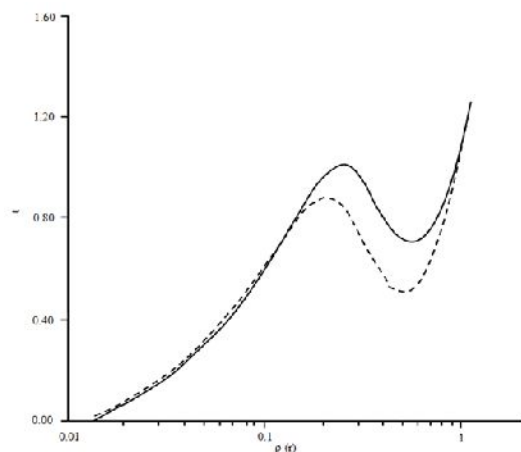


Рисунок 4 – Зависимость плотности кинетической энергии от электронной плотности атома Kr

Выводы

На примере многоэлектронных атомов (Ar и Kr) показано, что использование многопараметрического вариационного принципа для инертных газов в рамках метода функционала плотности улучшает совпадение с экспериментом для полной энергии ионизации, а значит, полученные в работе электронные плотности позволят более точно рассчитывать парные и многочастичные потенциалы взаимодействия для конденсированных сред.

Библиография

1. Кяров А.Х., Савинцев А.П. Статическая поляризуемость атомов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета 2011. Т. 1, № 3. С. 54–59.
2. Кяров А.Х., Савинцев А.П. Поляризуемость в теории функционала плотности // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2014. Т. 4, № 1. С. 98–103.
3. Кяров А.Х., Савинцев А.П. Дисперсионное взаимодействие атомов инертных газов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2014. Т. 4, № 3. С. 35–43.
4. Kyarov A.Kh., Savintsev A.P. Crystal potentials and dispersion forces in additive approximation // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1556. P. 012047.
5. Унежева Ф.Х., Бицуев А.Б., Дышеков А.А., Кяров А.Х., Озрокова Е.М., Савинцев А.П. Вариационная модель дисперсионных взаимодействий // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2023. Т. 13, № 2. С. 46–53.
6. Кяров А.Х., Савинцев А.П., Дышеков А.А., Унежева Ф.Х., Озрокова Е.М., Пшихачева А.А., Тохтамышева Ф.М. Ван-дер-Ваальсовы силы в модифицированной модели // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14, № 2. С. 40–44.
7. Теория неоднородного электронного газа / под ред. С. Лундквиста, Н. Марча. М.: Мир, 1987. 400 с.
8. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Physical review. 1964. V. 136, N 3B. P. B864–B871.
9. Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. Статистическая модель вещества // Успехи физических наук. 1975. Т. 117, № 1. С. 3–47.
10. Фортон В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. М.: Физматлит, 2010. 528 с.

References

1. Kyarov A.Kh., Savintsev A.P. Static polarizability of atoms. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings the Kabardino-Balkarian State University*. 2011;1(3):54–59. (In Russ.).
2. Kyarov A.Kh., Savintsev A.P. Polarizability in density functional theory. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings the Kabardino-Balkarian State University*. 2014; 4(1):98–103. (In Russ.).
3. Kyarov A.Kh., Savintsev A.P. Dispersion interaction of inert gas atoms. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings the Kabardino-Balkarian State University*. 2014; 4(3):35–43. (In Russ.).
4. Kyarov A.Kh., Savintsev A.P. Crystal potentials and dispersion forces in the additive approximation // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020;1556:012047.
5. Unezheva F.Kh., Bitsuev A.B., Dyshekov A.A., Kyarov A.Kh., Ozroкова E.M., Savintsev A.P. Variational model of dispersion interactions. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings the Kabardino-Balkarian State University*. 2023;13(2):46–53. (In Russ.).
6. Kyarov A.Kh., Savintsev A.P., Dyshekov A.A., Unezheva F.Kh., Ozroкова E.M., Pshikhacheva A.A., Tokhtamysheva F.M. Van der Waals forces in a modified model. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings the Kabardino-Balkarian State University*. 2024;14(2):40–44. (In Russ.).
7. Theory of inhomogeneous electron gas / Ed. by S. Lundqvist, N. March. Moscow: Mir; 1987. 400 p. (In Russ.).
8. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Physical review*. 1964;136(3B):B864–B871.
9. Kirzhnits D.A., Lozovik Yu.E., Shpatakovskaya G.V. Statistical model of matter. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk = Physics-Uspekhi*. 1975;117(1):3–47. (In Russ.).
10. Fortov V.E., Khrapak A.G., Yakubov I.T. Physics of non-ideal plasma. Moscow: Fizmatlit; 2010. 528 p. (In Russ.).