

Screening Effects on the Electronic Structure of Atoms and Molecules

Sarasola, Cecilia; Lopez, Xabier; Ugalde, Jesus M.
Euskal Herriko Unibertsitatea
Kimika Fakultatea
P.K. 1072. 20080 Donostia

BIBLID [1137-4411 (1997), 4; 29-44]

Orbital molekularren eremu autokonsistentearen prozedura erabili da, Yukawa potentzialarekin, energia atomiko eta molekularrak kalkulatzeko. Slater-en determinanteak, bai geruza itxientzat bai geruza irekientzat, oinarri gaussiarren funtzioen konbinazio lineal gisan garatu dira. Hautentzat behar ziren oinarritzko integralak analitikoki garatu dira erabat. Honela lortutako hidrogeno atomoaren energiak, orbitalen garapenak txikiak izanda ere, bat datoz, orohar, beste kalkulu zehatzagoekin. H_2^+ eta H_2 molekulen oinarritzko egoeretako lotura distantzia luzatu eta disoziazio energia txikitu egiten dela, pantailatze parametroa handitzerakoan, aurratsen du gure ereduak.

El método variacional de orbitales moleculares SCF se ha utilizado para calcular las energías atómicas y moleculares para el potencial de Yukawa. Tanto los determinantes de Slater para capa cerrada como para capa abierta son desarrollados como combinaciones lineales de funciones de base gaussianas, para los que se ha obtenido una completa solución analítica para todas las integrales básicas requeridas. Las energías obtenidas mediante este método para el átomo de hidrogeno son comparables con las obtenidas por cálculos más precisos, incluso para expansiones pequeñas de los orbitales. Para los estados fundamentales de las moléculas H_2^+ y H_2 nuestro modelo predice que la distancia de enlace aumenta y la energía de disociación decrece a medida que el parámetro de apantallamiento aumenta.

La méthode variationnelle des orbitales moléculaires SCF s'applique au calcul des énergies atomiques et moléculaires pour le potentiel de Yukawa. Tant les déterminants de Slater à couche fermée que à couche ouverte sont développés comme des combinaisons linéaires de fonctions de base gaussiennes, pour lesquelles on a obtenu une résolution analytique complète de toutes les intégrales de base requises. Les énergies ainsi obtenues pour l'atome d'hydrogène peuvent être comparées à celles obtenues à l'aide des calculs plus précis, même pour des petites expansions des orbitales. Pour les états fondamentaux des molécules H_2^+ et H_2 notre modèle prédit que la distance de liaison augmente et que l'énergie de dissociation diminue au fur et à mesure que le paramètre d'écran augmente.

Giltz-Hitzak: Pantailatze efektuak. Egitura elektronikoa.
Palabras Clave: Efectos de apantallamiento. Estructura electrónica
Mots Clés: Effects d'écran. Structure électronique.