ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2024, том 88, № 4, с. 524–530

УДК 519.6:537.84

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛНОЙ ЭНЕРГИИ И ФУНКЦИИ ЭКРАНИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЫ УГЛЕРОДА В ПЕРВОМ ПОРЯДКЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

© 2024 г. В. П. Кощеев[1, *], Ю. Н. Штанов[2]

[1]Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)", филиал "Стрела", Жуковский, Россия

[2]Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Тюменский индустриальный университет", филиал "Сургутский институт нефти и газа", Сургут, Россия

**E-mail: koshcheev1@yandex.ru*

Поступила в редакцию 15.11.2023
После доработки 22.11.2023
Принята к публикации 28.12.2023

В рамках нового подхода к задаче вычисления полной энергии двухатомной молекулы в первом порядке теории возмущений показано, что функция экранирования потенциальной энергии является решением уравнения диффузионного типа, в котором роль временной переменной играет средний квадрат амплитуды коллективных колебаний электронов в расчете на одну степень свободы. Выполнен расчет полной энергии двух атомов углерода в основном и возбужденных состояниях.

DOI: 10.31857/S0367676524040013, **EDN:** QJAJSF

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что задача вычисления полной энергии двухатомной молекулы может быть решена с помощью нейронных сетей [1–3], уравнения Хартри-Фока или теории функционала плотности, которые построены на одноэлектронном приближении многоэлектронного стационарного уравнения Шредингера [4,5]. В [6,7] было предложено искать решение многоэлектронного уравнения Шредингера с помощью стационарной теории возмущений, нулевой член разложения которой описывает изолированные атомы. Было показано, что в первом порядке теории возмущений полная энергия двухатомной молекулы состоит из суммы полных энергий изолированных атомов и потенциальной энергии взаимодействия между ними, которая является функционалом, зависящим от электронных плотностей изолированных атомов.

Новый подход к вычислению полной энергии двухатомной молекулы в первом порядке теории возмущений с учетом принципа Паули и коллективных (плазменных) колебаний атомных электронов был предложен в [6–7]. В настоящей публикации вычисляется полная энергия взаимодействия двух атомов углерода с помощью решения системы нелинейных уравнений.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Двухатомную молекулу будем описывать с помощью стационарного уравнения Шредингера

$$H\psi = E\psi. \tag{1}$$

Гамильтониан уравнения (1) представим в виде

$$H = H^0 + U, \tag{2}$$

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|} + \sum_{j_1=1}^{Z_1}\sum_{j_2=1}^{Z_2}\frac{e^2}{\left|\vec{r}_1 + \vec{r}_{1j_1} - \vec{r}_2 - \vec{r}_{2j_2}\right|} - \\ - \sum_{j_1=1}^{Z_1}\frac{Z_2 e^2}{\left|\vec{r}_1 + \vec{r}_{1j_1} - \vec{r}_2\right|} - \sum_{j_2=1}^{Z_2}\frac{Z_1 e^2}{\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2 - \vec{r}_{2j_2}\right|}, \tag{3}$$

где U – потенциальная энергия взаимодействия двух атомов; $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$ – координаты первого и второго атомного ядра; $\vec{r}_1 + \vec{r}_{1j_1}$ и $\vec{r}_2 + \vec{r}_{2j_2}$ – координаты j_1-го и j_2-го электронов первого и второго атома, соответственно; $\vec{r}_1 + \vec{r}_2 = \vec{r} + \delta\vec{r}$; коллективные колебания атомных электронов и ядер описываются вектором $\delta\vec{r} = \delta\vec{r}_{\text{nucl.}} + \delta\vec{r}_{\text{el.}}$; $r = \left|\vec{r}\right|$ – расстояние между атомами в молекуле.

Решение уравнения (1) с гамильтонианом (2) будем искать с помощью теории возмущений $\psi = \psi^0 + \psi^1 + \ldots$ и $E = E^0 + E^1 + \ldots$. Потенциальную энергию (электронные термы) двухатомной молекулы будем искать в первом порядке теории возмущений

$$E^1 = \left\langle \psi^0 \middle| U \middle| \psi^0 \right\rangle, \tag{4}$$

где угловые скобки $\langle \ldots \rangle$ были введены Дираком [8].

Гамильтониан H^0 представим в виде $H^0 = H_1^0 + H_2^0$, где H_i^0 – гамильтониан i-го атома; i=1,2.

Решение уравнения Шредингера $H^0\psi^0 = E^0\psi^0$ будем искать в виде $\psi^0 = \psi_1^0\psi_2^0$ и $E^0 = E_1^0 + E_2^0$, где уравнение Шредингера для i-го изолированного атома имеет вид

$$H_i^0\psi_i^0 = E_i^0\psi_i^0, \tag{5}$$

где $\psi_i^0 = \psi_i^0\left(\vec{r}_{i1}, \vec{r}_{i2}, \ldots, \vec{r}_{iZ_i}\right)$.

Флуктуации потенциальной энергии взаимодействия (3) вызываются квантовыми флуктуациями, которые испытывают атомные электроны. Известно [9], что коллективные колебания атомных ядер в двухатомной молекуле описываются с помощью уравнения движения для одной частицы с приведенной массой

$$\mu_{\text{nucl.}} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \tag{6}$$

где m_1 и m_2 – массы атомных ядер первого и второго атома, соответственно.

Коллективные (плазменные) колебания атомных электронов в двухатомной молекуле будем описывать с помощью уравнения движения для одной частицы с приведенной массой

$$\mu_{\text{el.}} = \chi m_e, \tag{7}$$

где m_e – масса покоя электрона, а χ – варьируемый параметр, который будет определен ниже. Если χ = 0.5, то это задача двух тел, но в коллективных колебаниях участвуют электроны двух атомов.

Так как средний квадрат амплитуды ядерных колебаний много меньше среднего квадрата амплитуды электронных колебаний в одной и той же потенциальной яме, то при усреднении потенциальной энергии взаимодействия двух атомов учитывались только коллективные колебания атомных электронов. Усреднение по квантовым флуктуациям местоположения атомных электронов будем осуществлять с помощью метода [10], который Бете использовал для вычисления атомного форм-фактора, а усреднение по коллективным колебаниям атомных электронов выполним по квадрату модуля волновой функции гармонического осциллятора в основном состоянии. Соответствующие средние будем обозначать $\left\langle \psi_1^0 \middle| U \middle| \psi_1^0 \right\rangle = \langle \ldots \rangle_{e1}$, $\left\langle \psi_2^0 \middle| U \middle| \psi_2^0 \right\rangle = \langle \ldots \rangle_{e2}$ и $\left\langle \psi^0 \middle| U \middle| \psi^0 \right\rangle_{pl} = \langle \ldots \rangle_{pl}$.

Разложим потенциальную энергию взаимодействия (3) в интеграл Фурье

$$\begin{aligned} U = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \Bigg(& \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{k^2} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)\right) + \\ & + \frac{4\pi e^2}{k^2} \sum_{j_1=1}^{Z_1} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_{1j_1} - \vec{r}_{2j_2}\right)\right) - \\ & - \frac{4\pi Z_2 e^2}{k^2} \sum_{j_1=1}^{Z_1} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_{1j_1}\right)\right) - \\ & - \frac{4\pi Z_1 e^2}{k^2} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2}\right)\right) \Bigg). \end{aligned} \tag{8}$$

Усредним (8) по квадрату модуля волновой функции электронов первого атома

$$\begin{aligned} \langle U \rangle_{e1} = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \Bigg[& \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{k^2} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)\right) + \\ & + \frac{4\pi e^2}{k^2} \left\langle \sum_{j_1=1}^{Z_1} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_{1j_1} - \vec{r}_{2j_2}\right)\right) \right\rangle_{e1} - \\ & - \frac{4\pi Z_2 e^2}{k^2} \left\langle \sum_{j_1=1}^{Z_1} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_{1j_1}\right)\right) \right\rangle_{e1} - \\ & - \frac{4\pi Z_1 e^2}{k^2} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2}\right)\right) \Bigg], \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \sum_{j_1=1}^{Z_1} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_{1j_1} - \vec{r}_{2j_2}\right)\right) \right\rangle_{e1} = \\ & = F_1(k) \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2}\right)\right), \end{aligned} \tag{10}$$

$$\left\langle \sum_{j_1=1}^{Z_1} \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_2 - \vec{r}_{1j_1}\right)\right) \right\rangle_{e1} = F_1(k) \exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)\right), \tag{11}$$

где $F_1(k)$ – атомный форм-фактор; $F_1(0) = Z_1$.

Произведем усреднение $\langle U \rangle_{e1}$ по квадрату модуля волновой функции электронов второго атома:

$$\langle U\rangle_{\mathrm{e1,e2}} = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\left(\frac{4\pi Z_2 e^2}{k^2}(Z_1 - F_1(k))\exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)\right) - \right. \left. - \frac{4\pi e^2}{k^2}(Z_1 - F_1(k))\left\langle \sum_{j_2=1}^{Z_2}\exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2}\right)\right)\right\rangle_{\mathrm{e2}}\right); \quad (12)$$

$$\left\langle \sum_{j_2=1}^{Z_2}\exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2}\right)\right)\right\rangle_{e2} = F_2(k)\exp\left(i\vec{k}\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)\right). \quad (13)$$

Усредним потенциальную энергию взаимодействия двух атомов по квадрату модуля волновой функции гармонического осциллятора в основном состоянии:

$$\langle U(r)\rangle_{\mathrm{e1,e2,pl.}} = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}U(k)\exp\left[-k^2\Delta\right]\exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right), \quad (14)$$

где $U(k) = \dfrac{4\pi e^2}{k^2}\left[Z_1 - F_1(k)\right]\left[Z_2 - F_2(k)\right]$ – Фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия двух атомов; $\Delta = \dfrac{\hbar}{4\omega\mu_{\mathrm{el.}}}$ – средний квадрат амплитуды коллективных колебаний атомных электронов в расчете на одну степень свободы; упругая постоянная $\omega^2\mu_{\mathrm{el.}} = U''(\mathrm{r_{min}})$ есть значение второй производной в минимуме потенциальной энергии молекулы.

Известно, что волновая функция двухатомной молекулы должна быть антисимметричной относительно перестановки координат, определяющих местоположения электронов. Если волновая функция двухатомной молекулы выбрана в виде произведения волновых функций изолированных атомов $\psi^0 = \psi_1^0\psi_2^0$, то обменные силы будут учитываться отдельно для электронов изолированных атомов и отдельно для электронов, которые принадлежат первому и второму атомам.

Аналогично тому, как это делается в кинетической теории [11] добавим к выражению для Фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия двух атомов множитель $\left(1 - F_1(k)/Z_1\right)\left(1 - F_2(k)/Z_2\right)$, с помощью которого будем учитывать принцип Паули. Величины $F(k)/Z$ являются Фурье-компонентами плотности распределения атомных электронов для первого и второго атомов, которые нормированы на единицу. Тогда

$$U_{\mathrm{S}}(k,\Delta) = U_{\mathrm{S}}(k)\exp\left[-k^2\Delta\right], \quad U_{\mathrm{S}}(k) = \left[1 - \frac{F_1(k)}{Z_1}\right]\left[1 - \frac{F_2(k)}{Z_2}\right]U(k). \quad (15)$$

Если $s = 0$, то принцип Паули не учитывается и $U_0(k) = U(k)$. Выражение для потенциальной энергии взаимодействия двух атомов (электронного терма) запишем в виде

$$U_{\mathrm{S}}(r,\Delta) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}\Phi_{\mathrm{S}}(r,\Delta), \quad (16)$$

где $\Phi_{\mathrm{S}}(r,\Delta) = \dfrac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{1}{k}U_{\mathrm{S}}(k)\exp\left[-k^2\Delta\right]\sin(kr)\,dk$ – функция экранирования потенциальной энергии.

Непосредственной подстановкой можно показать, что функция экранирования потенциальной энергии является решением уравнения диффузионного типа

$$\frac{\partial\Phi_{\mathrm{S}}(r,\Delta)}{\partial\Delta} = \frac{\partial^2\Phi_{\mathrm{S}}(r,\Delta)}{\partial r^2}. \quad (17)$$

Так как функция экранирования удовлетворяет граничным $\Phi_s(0,\Delta) = 0$ и начальным условиям $\Phi_s(r,0) = \Phi_s(r_0)$, то решение уравнения диффузионного типа может быть записано в виде [12]

$$\Phi_{\mathrm{S}}(r,\Delta) = \int_0^\infty G(r,r_0,\Delta)\Phi_{\mathrm{S}}(r_0)\,dr_0, \quad (18)$$

где $G(r,r_0,\Delta) = (4\pi\Delta)^{-1/2}\left[\exp\left(-\dfrac{(r-r_0)^2}{4\Delta}\right) - \exp\left(-\dfrac{(r+r_0)^2}{4\Delta}\right)\right]$ – фундаментальное решение (функция Грина) уравнения диффузионного типа.

Если атомный форм-фактор выбран в виде экранированного кулоновского потенциала

$$F(k) = \frac{Z\mu^2}{\mu^2 + k^2}, \quad (19)$$

где μ^{-1} – длина экранирования, то начальное условие без учета принципа Паули найдем в виде [13]

$$\Phi_0(r,0) = \frac{1}{2}(2 - \mu r)\exp(-\mu r). \quad (20)$$

С помощью (18–20) вычислим функцию экранирования потенциальной энергии без учета принципа Паули

$$\Phi_0(r,\Delta) = \frac{\exp\left(\mu^2\Delta\right)}{4}\Big[\left(2-\mu r+2\mu^2\Delta\right)\exp(-\mu r)\times$$
$$\times\operatorname{erfc}\left(-\frac{r}{2\Delta^{1/2}}+\mu\Delta^{1/2}\right)-\left(2+\mu r+2\mu^2\Delta\right)\times \quad (21)$$
$$\times\exp(\mu r)\operatorname{erfc}\left(\frac{r}{2\Delta^{1/2}}+\mu\Delta^{1/2}\right)\Big],$$

где $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$, $\operatorname{erf}(x)$ – функция ошибок.

Если начальное условие $\Phi_S(r, 0)$ выберем с учетом принципа Паули

$$\Phi_S(r,0) = \frac{1}{48}\left(48-57\mu r+15\mu^2r^2-\mu^3r^3\right)\exp(-\mu r), \quad (22)$$

то функция экранирования потенциальной энергии с учетом принципа Паули примет вид

$$\Phi_S(r,\Delta) = \frac{1}{96\sqrt{\pi}}\Big[\mu^2\Delta^{1/2}r\left(60+16\mu^2\Delta\right)\exp\left(-\frac{r^2}{4\Delta}\right)+$$
$$+\sqrt{\pi}\exp\left(-\mu r+\mu^2\Delta\right)\operatorname{erfc}\left(-\frac{r}{2\Delta^{1/2}}+\mu\Delta^{1/2}\right)\times$$
$$\times\left(8\mu^6\Delta^3-\mu^3\left(r^3+66\Delta r\right)+6\mu^4\Delta\left(r^2+12\Delta\right)+\right.$$
$$\left.+3\mu^2\left(5r^2+48\Delta\right)-12\mu^5\Delta^2r-57\mu r+48\right)- \quad (23)$$
$$-\sqrt{\pi}\exp\left(\mu r+\mu^2\Delta\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{r}{2\Delta^{1/2}}+\mu\Delta^{1/2}\right)\times$$
$$\times\left(8\mu^6\Delta^3+\mu^3\left(r^3+66\Delta r\right)+6\mu^4\Delta\left(r^2+12\Delta\right)+\right.$$
$$\left.+3\mu^2\left(5r^2+48\Delta\right)+12\mu^5r\Delta^2+57\mu r+48\right)\Big].$$

В [7] было показано, что учет коллективных колебаний атомных электронов приводит к самосогласованной системе уравнений

$$\begin{cases}\dfrac{\partial U(r,\Delta)}{\partial r}=0,\\ \dfrac{\partial^2U(r,\Delta)}{\partial r^2}=\dfrac{\hbar^2}{16\chi m_e\Delta^2},\end{cases} \quad (24)$$

где $U(r,\Delta)$ зависит от Δ согласно (16).

С помощью уравнения (17) перепишем (24) в виде

$$\begin{cases}\dfrac{\partial U(r,\Delta)}{\partial r}=0\\ \dfrac{\partial}{\partial\Delta}\left(U(r,\Delta)+\Delta\dfrac{\partial^2U(r,\Delta)}{\partial r^2}\right)=0.\end{cases} \quad (25)$$

Известно [4], что вместо многочастичного уравнения Шредингера (5) строятся одночастичные приближения на основе уравнений Хартри–Фока или формализма теории функционала плотности. Фурье-компонента плотности распределения электронов атома углерода имеет вид

$$F(k) = \int n(\vec{r})\cdot\exp\left(-i\vec{k}\vec{r}\right)d^3\vec{r}, \quad (26)$$

где $n(\vec{r}) = 2\left|\psi_{1s}(\vec{r})\right|^2 + 2\left|\psi_{2s}(\vec{r})\right|^2 + 2\left|\psi_{2p}(\vec{r})\right|^2$ представляет собой электронную плотность изолированного атома углерода.

Волновые функции, которые аппроксимируют решение уравнения Хартри–Фока для изолированных атомов и ионов углерода, и энергии E_i^0 представлены в [14]. Таким образом, полная энергия двухатомной молекулы в первом порядке теории возмущений является функционалом

$$E = E_1^0\left[n_1(\vec{r})\right] + E_2^0\left[n_2(\vec{r})\right] + U\left[n_1(\vec{r}),n_2(\vec{r})\right], \quad (27)$$

где $n_1(\vec{r})$ и $n_2(\vec{r})$ – электронные плотности первого и второго изолированного атома, соответственно.

Условие применимости поправки в первом порядке теории возмущений к энергии системы в невозмущенном состоянии имеет вид

$$\left|U(r)\right| \ll \left|E^0\right|. \quad (28)$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численное решение системы уравнений (25) для приближения Хартри–Фока, представлено на рис. 1 и табл. 1 для основного и возбужденных состояний молекулы углерода. Для экранированного кулоновского потенциала решение системы (25) дает значения $\Delta = 0.132$ Å^2 при $\mu = 2.233$ Å^{-1}.

На рис. 2 представлены значения интеграла (16) в приближении экранированного кулоновского потенциала с учетом принципа Паули, которые вычислены с помощью метода численного интегрирования и с помощью функции экранирования. Так как оба метода расчета приводят к совпадающим между собой результатам, то это свидетельствует о достоверности метода численного интегрирования. Число слагаемых при использовании экранированного кулоновского потенциала невелико, в отличии от приближения Хартри–Фока, где

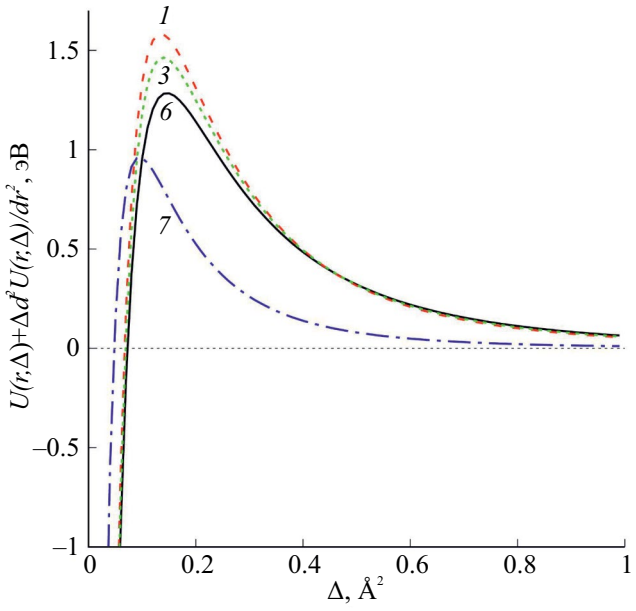

Рис. 1. График функции $U(r,\Delta)+\Delta\partial^2U(r,\Delta)/\partial r^2$ при $\partial U(r,\Delta)/\partial r = 0$, где кривая *1* – для состояния C(3*p*)+C(3*p*); кривая *3* – для состояния C(1*d*)+C(1*d*); кривая *6* – для состояния C(1*s*)+C(1*s*); кривая *7* – для состояния $C^+(1s)+C^+(1s)$.

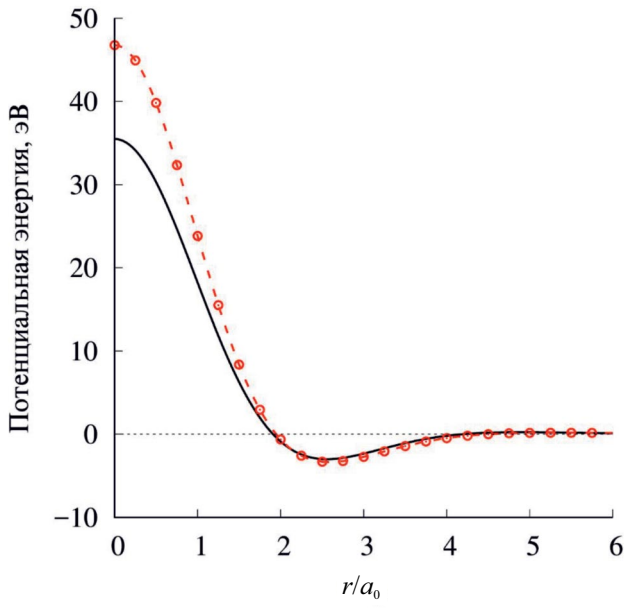

Рис. 2. Потенциальная энергия взаимодействия для молекулы углерода в состоянии C(3*p*)+C(3*p*) в приближении Хартри–Фока (черная сплошная линия). Результаты расчетов потенциальной энергии взаимодействия в приближении экранированного кулоновского потенциала с учетом принципа Паули обозначены: 1) пунктирной линией – вычисления с помощью решения уравнения (17), 2) кружками – интеграл (16), вычисленный с помощью численного интегрирования.

Таблица 1. Решение системы уравнений (24) и (25) для приближения Хартри–Фока молекул углерода для основного и возбужденного состояния.

Молекула	Δ, Å²	χ
C(1*s*)+C(1*s*)	0.1462	0.8602
C(3*p*)+C(3*p*)	0.1346	0.7790
C(1*d*)+C(1*d*)	0.1391	0.8075
$C^+(1s)+C^+(1s)$	0.0950	1.8451
C(3*p*)+C(1*d*)	0.1368	0.7931
C(3*p*)+C(1*s*)	0.1398	0.8180
C(1*d*)+C(1*s*)	0.1424	0.8331

число слагаемых порядка 350000. Таким образом, вычисление потенциальной энергии взаимодействия (16) с атомными форм-факторами в приближении Хартри–Фока будет выполнено с помощью метода численного интегрирования.

На рис. 3 и рис. 4 представлены результаты расчета полной энергии и потенциальной энергии, соответственно, для двух атомов углерода в основном и возбужденных состояниях в сравнении результатами работы [15].

Дополнительные материалы к статье размещены в [16].

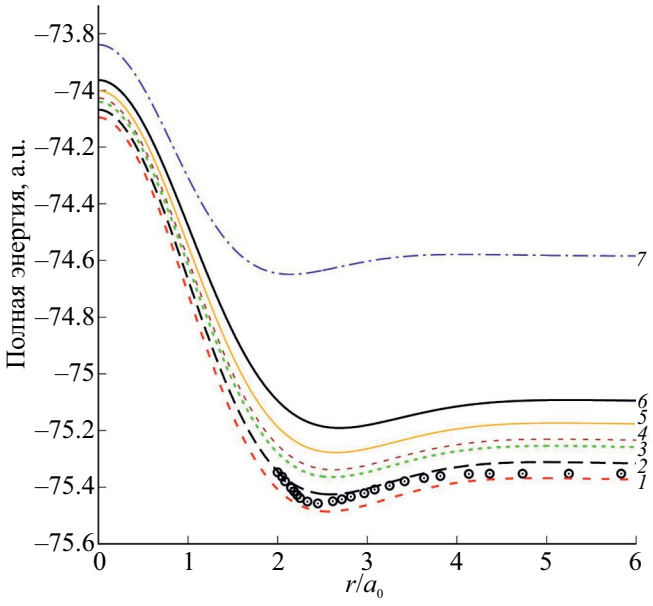

Рис. 3. Результаты сравнения расчетов [15] (обозначено ○) и полной энергии молекулы углерода для состояний: *1* – C(3*p*)+C(3*p*); *2* – C(3*p*)+C(1*d*); *3* – C(1*d*)+C(1*d*); *4* – C(3*p*)+C(1*s*); *5* – C(1*d*)+C(1*s*); *6* – C(1*s*)+C(1*s*); *7* – $C^+(1s)+C^+(1s)$.

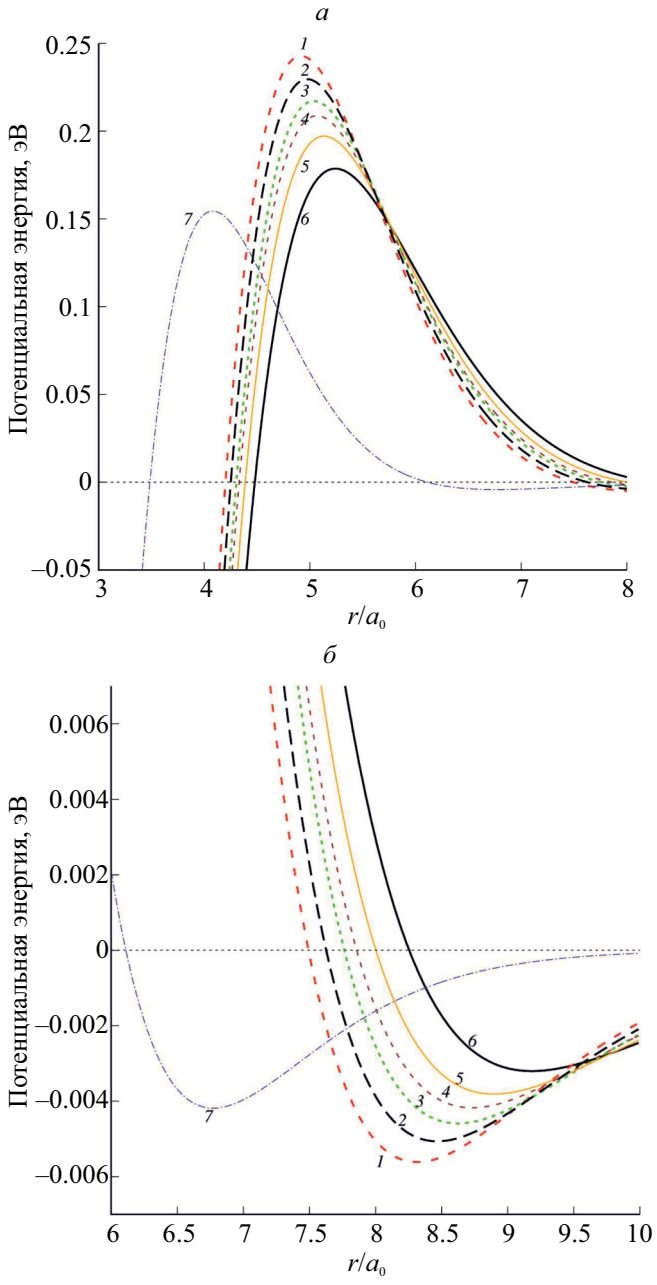

Рис. 4. Потенциальная энергия взаимодействия молекулы углерода для состояний: *1* – C(3*p*)+C(3*p*); *2* – C(3*p*)+C(1*d*); *3* – C(1*d*)+C(1*d*); *4* – C(3*p*)+C(1*s*); *5* – C(1*d*)+C(1*s*); *6* – C(1*s*)+C(1*s*); *7* – $C^+(1s)+C^+(1s)$ при: $r/a \in [3;8]$ (*а*), $r/a \in [6;10]$ (*б*).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ren W., Fu W., Wu X., Chen J.* // Nature Commun. 2023. V. 14. No. 1. P. 1860.
2. *Qian Y., Fu W., Ren W., Chen J.* // J. Chem. Phys. 2022. V. 157. No. 16. Art. No. 164104.
3. *Barrett T.D., Malyshev A., Lvovsky A.I.* // Nature Mach. Intell. 2022. V. 4. No. 4. P. 351.
4. *Сарры А.М., Сарры М.Ф.* // ФТТ. 2012. Т. 54. № 6. С. 1237; *Sarry A.M., Sarry M.F.* // Phys. Solid State. 2012. V. 54. No. 6. P. 1315.
5. *Wang Z., Neese F.* // J. Chem. Phys. 2023. V. 158. No. 18. Art. No. 184102.
6. *Кощеев В.П., Штанов Ю.Н.* // Письма в ЖТФ. 2022. Т. 48. № 10. С. 28; *Koshcheev V.P., Shtanov Y.N.* // Tech. Phys. Lett. 2022. V. 48. No. 10. P. 123.
7. *Кощеев В.П., Штанов Ю.Н.* // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед.2023. № 3. С. 69.
8. *Дирак П.А.М.* Принципы квантовой механики. М.: Наука, 1979. 479 с.
9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1974. 752 с.
10. *Бете Г.* Квантовая механика. М.: Мир, 1965. 333 с.
11. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.,* Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2007. 536 с.
12. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 733 с.
13. *Кощеев В.П., Штанов Ю.Н.* // Письма в ЖТФ. 2018. Т. 44. № 13. С. 28; *Koshcheev V.P., Shtanov Y.N.* // Tech. Phys. Lett. 2018. V. 44. No. 13. P. 566.
14. *Clementi E., Roetti C.* // Atom. Data Nucl. Data Tables. 1974. V. 14. No. 3. P. 177.
15. *Lie G.C., Clementi E.* // J. Chem. Phys. 1974. V. 60. P. 1288.
16. http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/tropics/index.html.

Computer simulation of the total energy and the shielding function of a carbon molecule in the first order of perturbation theory

V. P. Koshcheev[1, *], Yu. N. Shtanov[2]

[1]*National Research University (Moscow Aviation Institute), Strela Branch, Zhukovsky, 140180 Russia*

[2]*Tyumen Industrial University, Surgut Branch, Surgut, 628404 Russia*

[*]*e-mail: koshcheev1@yandex.ru*

Within the framework of a new approach to the problem of calculating the total energy of a diatomic molecule in the first order of perturbation theory, it is shown that the potential energy screening function is a solution to a diffusion-type equation in which the role of a time variable is played by the average square of the amplitude of collective oscillations of electrons per one degree of freedom. The total energy of two carbon atoms in the ground and excited states is calculated.