

02

Сравнение потенциалов *ab initio* с моделью Леннарда-Джонса и их влияние на характер рассеяния пучка частиц в газе

© С.А. Никитенко,¹ Л.А. Варшавчик,¹ З.Г. Люллин,² Д.Д. Галицын,¹ С.А. Старовойтов,¹ В.А. Бочарников,¹ Е.Е. Мухин¹

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“ им. В.И. Ульянова (Ленина),
197022 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: lidia.varsh@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 7 апреля 2025 г.

В окончательной редакции 12 мая 2025 г.

Принято к публикации 13 мая 2025 г.

Проведено сравнение классического потенциала Леннарда-Джонса с потенциалами межатомного взаимодействия, рассчитанными методом *ab initio* в программном пакете NWChem. Расчеты потенциалов *ab initio* выполнены с использованием методов MP2, CCSD и CCSD(T) с последующей экстраполяцией к пределу полного базисного набора. Полученные потенциалы использованы для моделирования рассеяния пучка атомов бора в гелии и аргоне с помощью кода KITe. Проведено сравнение рассчитанных углов рассеяния, полных и транспортных сечений, а также характера рассеяния модельного пучка атомов при различных межатомных потенциалах. Показано, что по сравнению с точным потенциалом *ab initio* потенциал Леннарда-Джонса, обладая вычислительной простотой, демонстрирует отклонения в области потенциальной ямы и области отталкивания. При рассеянии модельного пучка с потенциалом Леннарда-Джонса атомы быстрее теряют энергию, чем с потенциалом *ab initio*, хотя формы фронтов оказываются схожими. Результаты работы позволяют обосновать выбор потенциала межатомного взаимодействия для описания процессов упругого рассеяния, исходя из поставленной задачи.

Ключевые слова: NWChem, KITe, межатомный потенциал, *ab initio*, потенциал Леннарда-Джонса, упругое рассеяние, Монте-Карло.

DOI: 10.61011/JTF.2025.11.61591.55-25

Введение

В ряде задач современной физики, например, при проектировании диагностик термоядерных установок следующего поколения, таких как ИТЭР, или при создании тонких пленок методом магнетронного распыления применяют численное моделирование методом Монте-Карло движения атомов в нейтральном газе. Для повышения точности моделирования важно иметь правдоподобные данные о сечениях упругого рассеяния частиц. В диапазоне энергий 0.01–100 eV для описания столкновений частиц хорошо работает классическое приближение. При этом данные о потенциале взаимодействия позволяют получить всю необходимую информацию об упругом рассеянии — сечения и углы рассеяния, частоту столкновений и вероятности столкновения с фоновой частицей с определенными компонентами вектора скорости. Точность данных о столкновении и, следовательно, характер движения частиц в фоновом газе определяются точностью используемого потенциала взаимодействия.

На данный момент разработано большое количество различных модельных бинарных потенциалов межатомного и межмолекулярного взаимодействия, как чисто отталкивающих, так и имеющих область притяжения. Из последних широко известен и наиболее часто использу-

ется потенциал Леннарда-Джонса [1–4], сочетающий простоту и достаточно высокую точность.

С развитием компьютерного моделирования стало возможным рассчитать потенциалы взаимодействия частиц методом *ab initio*, т. е. из первых основополагающих принципов без привлечения дополнительных эмпирических предположений или специальных моделей. Для расчета потенциалов *ab initio* мы использовали программный пакет для вычислительной химии NWChem [5], который включает в себя функции квантовой химии и молекулярной динамики. NWChem нацелен на масштабируемость как с точки зрения способности эффективно решать сложные задачи, так и с точки зрения использования доступных параллельных вычислительных ресурсов. NWChem имеет открытый исходный код и находится в свободном доступе.

Целью настоящей работы является сравнение классического потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса с потенциалом *ab initio*, рассчитанного в NWChem. Межатомные потенциалы и все производные величины в настоящей работе рассчитаны для трех пар элементов: атом бора с атомами гелия, неона и аргона. Решение о выборе типа межатомного потенциала необходимо для проведения моделирования емкостного ВЧ-разряда в благородном газе, который предполагается исполь-

зователь для чистки диагностической оптики ИТЭР от загрязнений продуктами эрозии первой стенки — пленок бора. На основе потенциалов взаимодействия были рассчитаны параметры упругого рассеяния и проведено сравнение результатов моделирования рассеяния пучка атомов бора на фоновом газе, выполненного в коде KITe [6,7].

1. Классические модели для потенциала взаимодействия

Принципы построения и обзор основных двухчастичных межатомных потенциалов взаимодействия, используемых при молекулярно-динамическом моделировании свойств материалов, приводятся в [8]. Самый простой из них — потенциал жестких сфер — применяется для качественного исследования процессов в плотных жидкостях, аморфных и твердых телах. Частицы рассматриваются как непроницаемые, идеально жесткие сферы, а потенциал принимается равным нулю, если расстояние между атомами меньше суммы ван-дер-ваальсовых радиусов атомов, и равным бесконечности в противоположном случае. Немного более реалистичной вариацией данной модели является потенциал Сьюерлenda. Среди других двухчастичных моделей известны потенциалы Леннарда-Джонса [9], Морзе [10], Букингема [11]. Все они представляют собой непрерывную функцию от расстояния между атомами. Параметры потенциалов определяются индивидуально для каждой пары атомов так, чтобы аналитическая функция наилучшим образом совпадала с экспериментальными данными.

Потенциал Леннарда-Джонса изначально предназначался для исследования термодинамических свойств инертных газов. На малых расстояниях атомы отталкиваются вследствие перекрытия электронных облаков, а на больших расстояниях присутствует слабое ван-дер-ваальсово притяжение. Потенциал имеет вид

$$U(r) = 4 \in \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

где ϵ — глубина потенциальной ямы (характеризует силу взаимодействия), а σ — расстояние, при котором потенциальная энергия равна нулю (параметр, зависящий от типа частиц). Для пары атомов σ равна сумме ван-дер-ваальсовых радиусов атомов, а ϵ рассчитывается как среднее геометрическое из значений глубины потенциальной ямы каждого атома. Для тяжелых атомов ϵ может быть принята равной температуре кипения данного вещества.

Потенциал Морзе был предложен для описания колебательных энергетических уровней двухатомных молекул и широко применяется в молекулярной спектроскопии и исследованиях кристаллических свойств твердых тел. По сравнению с потенциалом Леннарда-Джонса, Морзе заменил степенную зависимость экспоненциальной, так как она лучше описывала экспериментально наблюдаемые энергетические уровни. Дальнодействующая

часть при этом хорошо согласуется с экспериментальными данными, но в нуле потенциал имеет конечное значение, что невозможно, так как атомы не могут находиться в одной точке пространства. Тем не менее потенциал Морзе достаточно реалистично описывает энергетические уровни двухатомных молекул.

В настоящей работе для сравнения с потенциалами *ab initio*, рассчитанными в NWChem, будем использовать потенциал Леннарда-Джонса из-за его математической простоты и вычислительной эффективности. Этот потенциал описывается всего двумя параметрами, что значительно упрощает настройку модели и обработку данных. Универсальность потенциала Леннарда-Джонса позволяет моделировать как короткодействующие отталкивающие, так и дальнодействующие притягивающие силы в различных системах, включая газы, жидкости и твердые тела. Кроме того, потенциал Леннарда-Джонса демонстрирует хорошую согласованность с экспериментальными данными для многих простых систем, что делает его удобным инструментом для предсказания термодинамических и структурных свойств.

2. Квантово-химические методы расчета потенциалов в NWChem

Методы современной квантовой химии группы *ab initio* — из первых принципов — основаны [12] на решении уравнения Шредингера путем последовательного применения упрощающих приближений. К таким методам относятся методы теории возмущений Меллера-Плессета (MP2 [13–15], MP4 [16]), метод бракнеровских пар (BD) [17] и метод Хартри-Фока (HF), который включает методы связанных кластеров (CC, их варианты CCSD [18–20], CCSD(T) [21]) и методы конфигурационного взаимодействия (CI [22], CIS [23], CISD [24,25], MCSCF [26], CASSCF [27]). Метод Хартри-Фока является основополагающим, поскольку позволяет сформировать волновую функцию, являющуюся начальным приближением для других методов.

Согласно методу Хартри-Фока, уравнение Шредингера решается путем сведения многочастичной задачи к одночастичной в предположении, что каждая частица движется в усредненном самосогласованном поле, создаваемом всеми остальными частицами системы. Построение самосогласованного поля может осуществляться либо методом последовательных приближений (изначально предложенным Хартри), либо прямым вариационным методом [5]. Недостатком метода в первоначальном виде является низкая точность определения энергии системы, связанная с отсутствием учета корреляционного взаимодействия электронов. В связи с этим в настоящее время метод, как правило, используется в сочетании с различными дополнительными методами, позволяющими определить энергию корреляции электронов (методы пост-Хартри-Фока).

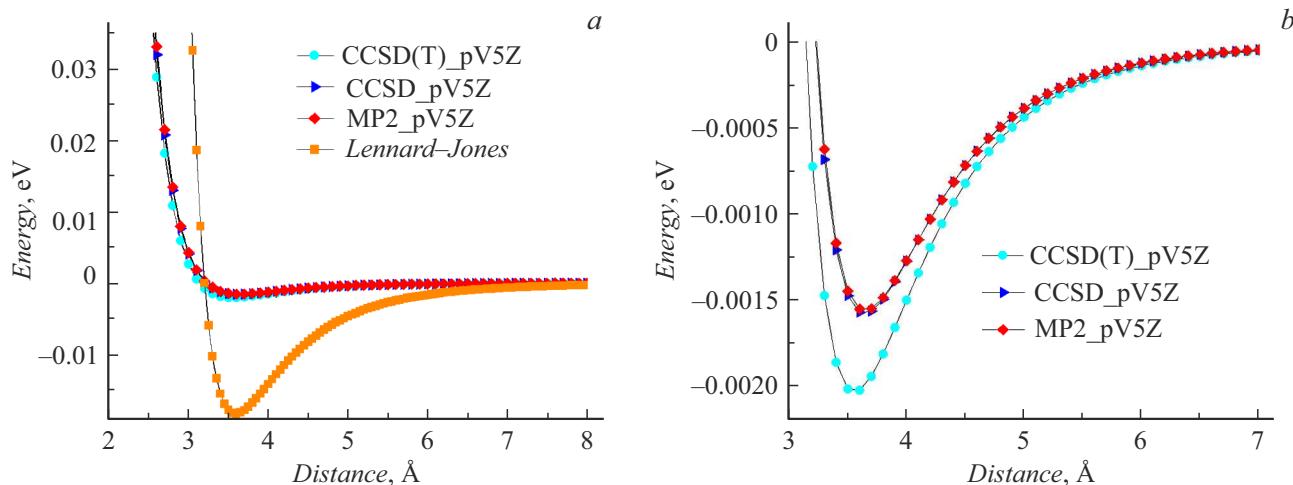


Рис. 1. Потенциалы межатомного взаимодействия для пары атомов бор-гелий, рассчитанные в программе NWChem методами CCSD, CCSD(T) и MP2. Также приведен потенциал Леннарда-Джонса. Графики (a) и (b) представлены в разных масштабах.

Метод связанных кластеров позволяет выполнять вычисления с полной итеративной обработкой одиночных и двойных корреляций и неитеративным включением эффектов тройных корреляций с использованием теории возмущений. Вариация метода CCSD решает нелинейные уравнения, учитывая корреляционные эффекты на уровне одно- и двухэлектронных возбуждений, что делает его значительно более точным по сравнению с методами на уровне теории возмущений, такими как MP2. Метод CCSD(T) является расширением CCSD и включает корреляционные эффекты от трехэлектронных возбуждений на основе теории возмущений. Этот метод часто называют „золотым стандартом“ [28–30] квантовой химии из-за его высокой точности при приемлемых вычислительных затратах.

Среди методов Меллера-Плессета наиболее распространен метод MP2 — теория возмущений второго порядка для корреляционной энергии. Он менее точен на малых расстояниях, чем CCSD(T) [29]. Использование более высокого порядка MP нецелесообразно, ибо они требуют больших вычислительных затрат.

Подробное описание расчетов потенциалов *ab initio* в программе NWChem приведено, например, в [31]. Сравнение видов функции межатомного потенциала для системы атомов бора и гелия, рассчитанного с использованием методов MP2, CCSD, CCSD(T), а также Леннарда-Джонса, представлено на рис. 1. Функция потенциала Леннарда-Джонса не повторяет потенциалы *ab initio* ни в области потенциальной ямы, ни в зоне отталкивания (положения ямы при этом близки) и, поскольку она имеет всего два параметра, невозможно добиться хорошего совпадения формы. Среди потенциалов *ab initio* методы CCSD и MP2 дают практически точное совпадение, однако графики отличаются от более точного метода CCSD(T) меньшей глубиной потенциальной ямы.

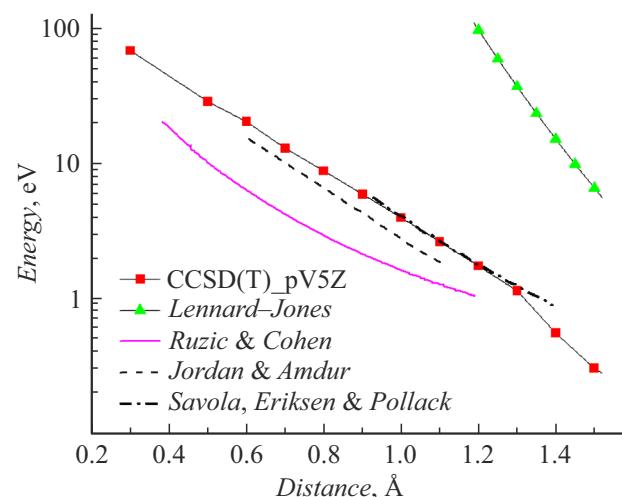


Рис. 2. Потенциалы Леннарда-Джонса (зеленая кривая) и *ab initio* (красная), рассчитанные в NWChem методом CCSD(T) с базисным набором pV5Z, а также экспериментальные кривые (розовая и две пунктирные) для пары атомов гелия.

Приведем сравнение (рис. 2) графиков потенциалов Леннарда-Джонса и *ab initio* с экспериментальными кривыми [32]. Видно, что кривая потенциала *ab initio* находится значительно ближе к экспериментальным, чем кривая потенциала Леннарда-Джонса.

Помимо метода моделирования, на точность рассчитанного потенциала влияет выбранный базисный набор функций. В процессе расчета искомая волновая функция представляется в виде линейной комбинации базисных функций. Это позволяет преобразовать дифференциальные уравнения в частных производных в алгебраические уравнения, подходящие для эффективной реализации моделирования на компьютере.

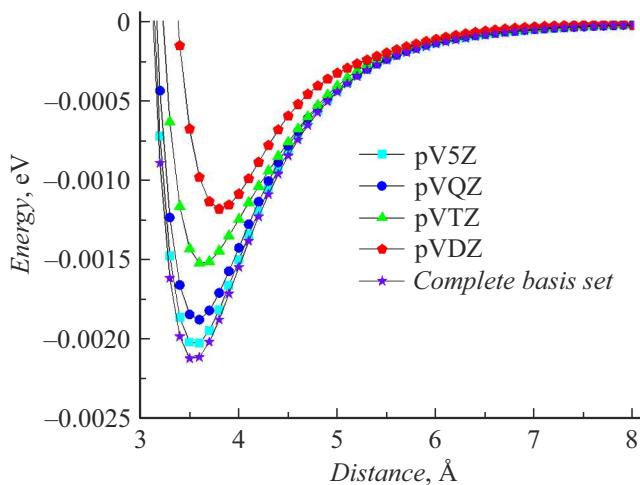


Рис. 3. Потенциалы межатомного взаимодействия, рассчитанные в программе NWChem для пары атомов бор-гелий методом CCSD(T) с использованием базисов различной точности, а также полученный экстраполяцией потенциал, соответствующий полному базисному набору.

Некоторые из наиболее широко используемых базисных наборов, разработанные в [33], предназначены для систематической сходимости вычислений пост-Хартри-Фока к пределу полного базисного набора с использованием методов эмпирической экстраполяции [34]. Такие наборы включают последовательно увеличивающиеся оболочки поляризационных (коррелирующих) функций, и обозначаются как cc-pV_NZ, где N = D, T, Q, 5, 6 и т.д. (где D = двойной, T = тройной и т.п.), „cc-p“ означает „корреляционно-согласованные поляризованные“, а „V“ указывает, что это базисные наборы только с валентностью. В настоящее время такие „корреляционно-согласованные поляризованные“ базисные наборы широко используются и являются общепринятым стандартом для коррелированных или пост-Хартри-Фоковских вычислений [33,35]. Кроме того, при моделировании взаимодействия пар атомов, в том числе расположенных далеко друг от друга, для точных расчетов необходимо добавить диффузные функции для описания дальнодействующих взаимодействий, таких как силы Ван-дер-Ваальса (базисы aug- cc-pV_nZ). Сравнение видов функции межатомного потенциала для пары атомов гелия, рассчитанных методом CCSD(T) на различных базисных наборах cc-pVDZ; cc-pVTZ; cc-pVQZ и cc-pV5Z, представлено на рис. 3. По мере увеличения точности базисных наборов функция потенциала опускается, положение минимума смещается к меньшим расстояниям, при этом функции становятся все более близки и стремятся к некоторому пределу, который будет соответствовать полному базисному набору. Этот предел можно получить по аппроксимационной формуле [31,36,37]:

$$A(x) = A(\infty) + Be^{-(X-1)} + Ce^{-(X-1)^2},$$

где $X = 2, 3, 4, 5$ — номер базиса, $A(x)$ — значение потенциала, а $A(\infty)$ — искомое аппроксимированное значение. Функция потенциала, полученная в результате решения данной системы линейных уравнений и соответствующая полному базисному набору, также представлена на рис. 3.

3. Сравнение рассчитанных параметров упругого рассеяния

На основе различных функций потенциалов межатомного взаимодействия (жестких сфер, Леннарда-Джонса и *ab initio*) с целью сравнения были рассчитаны параметры реакций упругого рассеяния: углы рассеяния в зависимости от прицельного параметра, полные и транспортные сечения рассеяния в зависимости от энергии. Алгоритм расчета приведен в [6]. В системе центра масс моделируется движение налетающей частицы. На рис. 4 приведены траектории рассеяния атома бора на атомах инертных газов для двух видов потенциалов — Леннарда-Джонса (рис. 4, *a*) и *ab initio* (рис. 4, *b*), рассчитанного в программе NWChem методом CCSD(T) с применением экстраполяции для соответствия полному базисному набору (для потенциала жестких сфер траектории не строятся, так как угол рассеяния рассчитывается напрямую по классической формуле). Прицельные параметры одинаковы для каждой пары элементов и подобраны так, чтобы показать траектории притяжения (зеленым цветом), отталкивания (синим цветом) и захвата частицы на орбиту (красным цветом).

Угол рассеяния в системе центра масс рассчитывается как угол отклонения вектора скорости налетающей частицы после акта рассеяния от начального направления, т.е. угол изменения траектории. Сравнивая для каждой пары элементов траектории рассеяния при различных потенциалах на рис. 4, можно увидеть существенное различие полученных углов рассеяния и характера их зависимости от прицельных параметров. Это различие будет в дальнейшем наблюдаться и на всех производных величинах — сечениях рассеяния, частоте столкновений и т.д. Угол рассеяния как функция прицельного параметра для потенциалов жестких сфер, Леннарда-Джонса и *ab initio* представлен на рис. 5. Для траектории рассеяния атома бора на атоме неона в потенциале Леннарда-Джонса (синяя кривая) явно заметна точка „вылета“ с положительным значением угла на расстоянии, соответствующем потенциальной яме. Именно для этой точки построена траектория „захвата“ на рис. 4, *a*, квадрат B-Ne (красная кривая).

Сечение рассеяния в системе центра масс рассчитывается как площадь круга $S = \pi b^2$ с радиусом b — таким прицельным параметром, при котором угол отклонения равен 1° (рис. 6). Акты рассеяния менее чем на 1° учитываться не будут.

Транспортное сечение рассеяния в лабораторной системе координат (рис. 7) рассчитывается по формуле

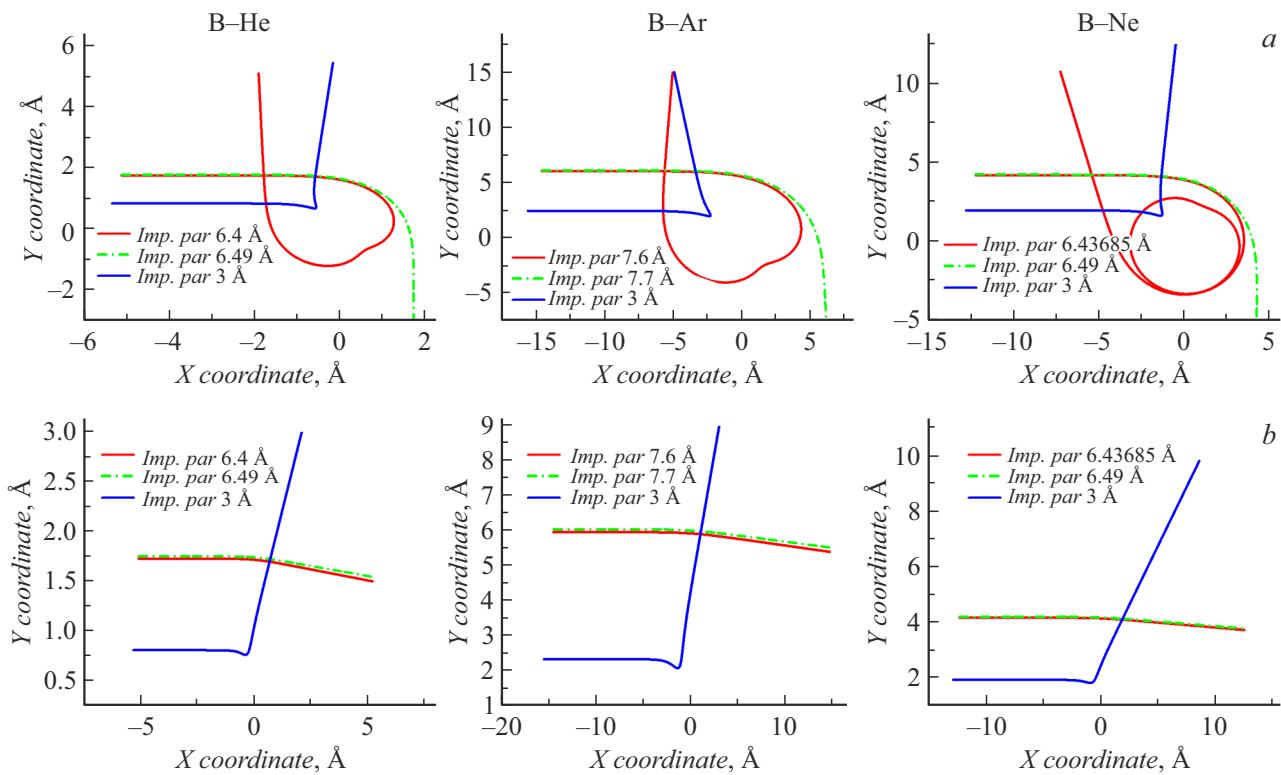


Рис. 4. Траектории рассеяния в системе центра масс; *a* — с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса, *b* — с потенциалами взаимодействия, полученными экстраполяцией по результатам расчетов в NWChem.

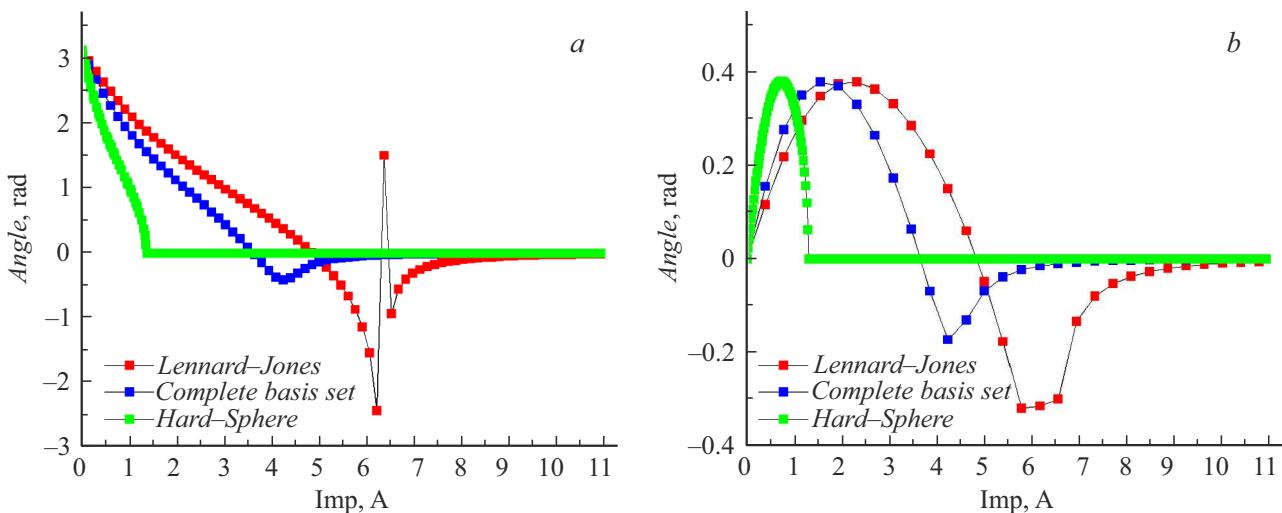


Рис. 5. Зависимость углов рассеяния от прицельного параметра, рассчитанная по потенциалам жестких сфер, Леннарда-Джонса и полученному экстраполяцией *ab initio* в программе NWChem для пар элементов B-Ne (*a*) и B-He (*b*).

(используем выражение $d\sigma = 2\pi pdp$):

$$\sigma_T = \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} (1 - \cos \theta) d\Omega = \int_0^\pi (1 - \cos \theta(p)) 2\pi pdp.$$

Здесь p — прицельный параметр, θ — угол рассеяния, σ — сечение рассеяния. Предел интегрирования

выбирается для каждой энергии равным прицельному параметру, дающему угол отклонения 1° .

Видно, что полные и транспортные сечения, во-первых, имеют нелинейную зависимость от энергии, а во-вторых, различаются как по форме (нелинейная зависимость от энергии проявляется по-разному), так и по абсолютным значениям (табл. 1) при расчете по потенциалам Леннарда-Джонса и потенциалам *ab initio*, полу-

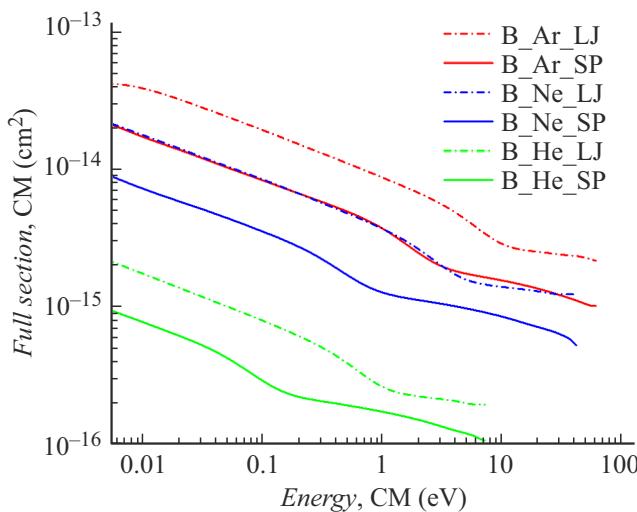


Рис. 6. Полные сечения рассеяния в зависимости от энергии в системе центра масс, рассчитанные по потенциалам Леннарда-Джонса и полученные экстраполяцией *ab initio* (NWChem).

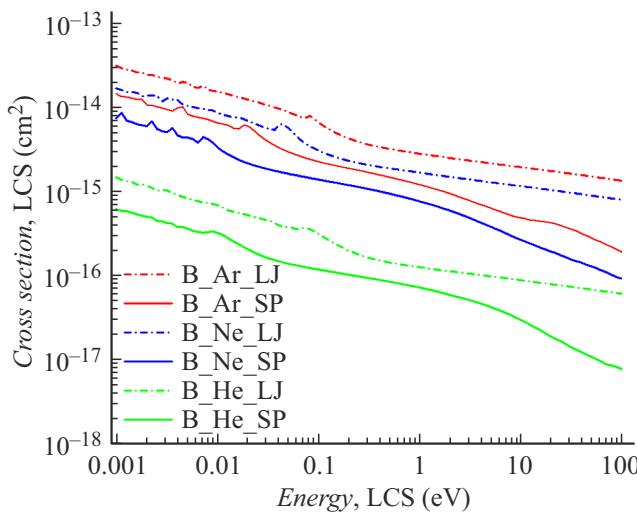


Рис. 7. Транспортные сечения рассеяния в зависимости от энергии в лабораторной системе, рассчитанные по потенциалам Леннарда-Джонса и полученные экстраполяцией *ab initio*.

Таблица 1. Отношение полных и транспортных сечений, рассчитанных по потенциальному Леннарда-Джонса, к сечениям, рассчитанным по потенциальному *ab initio*

Сечение	B-He	B-Ar	B-Ne
Полные сечения $\sigma_{LJ}/\sigma_{ab initio}$	2.08	2.14	2.24
Транспортные сечения $\sigma_{LJ}^T/\sigma_{ab initio}^T$	2.87	3.04	3.34

ченным экстраполяцией расчетов в программе NWChem. Далее будет показано, к каким различиям в характере движения пучка атомов в нейтральном газе приводит выбор потенциала межатомного взаимодействия.

4. Рассеяние модельного пучка атомов при разных потенциалах

С помощью кода KITE проведем моделирование и сравним характер рассеяния пучка атомов бора в гелии при использовании различных межатомных потенциалов: жестких сфер, Леннарда-Джонса и потенциалов *ab initio*, рассчитанных из первых принципов в программе NWChem. При моделировании учитывается тепловое движение атомов газа. Временная эволюция пучков показана на рис. 8. Во всех трех случаях пучок атомов бора стартует с поверхности шириной 0.01 mm, которую можно считать точечной относительно характерных расстояний, на которых пучок рассеивается. Давление гелия выбрано 1 Pa, температура 300 K, энергия атомов бора в начале движения равна 10 eV. Рисунки приведены для моментов времени 1.4, 3.6, 6.4 и 12 μ s после начала движения.

Дальность распространения пучка (положение фронта) определяется частицами, не претерпевшими столкновения и имеющими исходную энергию, и потому одинакова для всех трех случаев. Ключевые различия видны в форме пучка и тенденции потери энергии атомами бора. При использовании потенциала жестких сфер формируется узкий, стрелообразный пучок с высокой направленностью. Однако из-за механического характера столкновений частицы теряют энергию значительно быстрее, чем в других моделях (за исключением группы частиц на фронте пучка, не успевших претерпеть столкновение, так что средняя энергия пучка оказывается не такой малой). Средняя энергия атомов пучка бора при рассеянии в гелии в момент времени 12 μ s для различных межатомных потенциалов показана в табл. 2. При потенциале Леннарда-Джонса учитываются межатомные силы притяжения и отталкивания, поэтому пучок становится шире и имеет сферический фронт, а энергия частиц после рассеяния сохраняется лучше, чем в модели жестких сфер. Форма пучка при использовании потенциала *ab initio* (NWChem) оказывается схожей с формой пучка, полученного по модели Леннарда-Джонса, но при этом потенциал *ab initio* обеспечивает наилучшее сохранение энергии при рассеянии.

Приведем временную эволюцию рассеяния пучков атомов бора в аргоне (рис. 9). Условия (температура, давление газа, энергия атомов бора в начале движения) заданы такими же, как при рассеянии в гелии. Рисунки приведены для моментов времени 1.4, 6.4 и 12 μ s после начала движения (т. е. по сравнению с рассеянием в гелии отсутствует второй момент времени, равный 3.6 μ s). В отличие от гелия (масса атома 4.003 Da) аргон (39.948 Da) значительно тяжелее бора (10.811 Da), в связи с чем при рассеянии появляются атомы бора, отразившиеся от аргона и изменившие направление движения на противоположное.

Закономерности в характере рассеяния пучка бора в аргоне с разными межатомными потенциалами остаются такими же, как при рассеянии бора в гелии: в потенциале

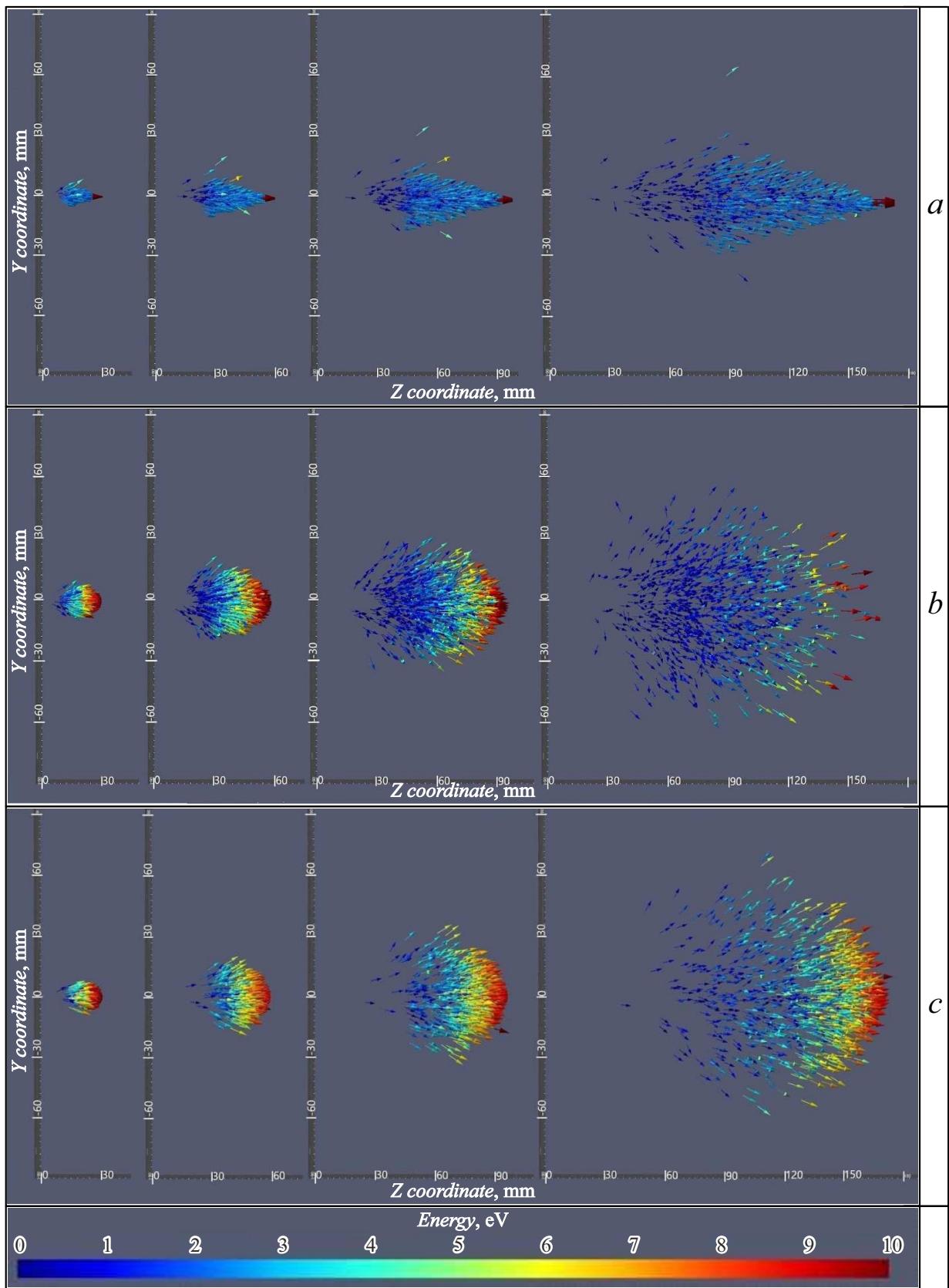


Рис. 8. Рассеяние пучка атомов бора с энергией 10 eV в гелии с давлением 1 Pa и температурой 300 K в моменты времени 1.4, 3.6, 6.4 и 12 μ s после начала движения. Использованы межатомные потенциалы: *a* — жестких сфер, *b* — Леннарда-Джонса, *c* — *ab initio* (расчитанный в NWChem).

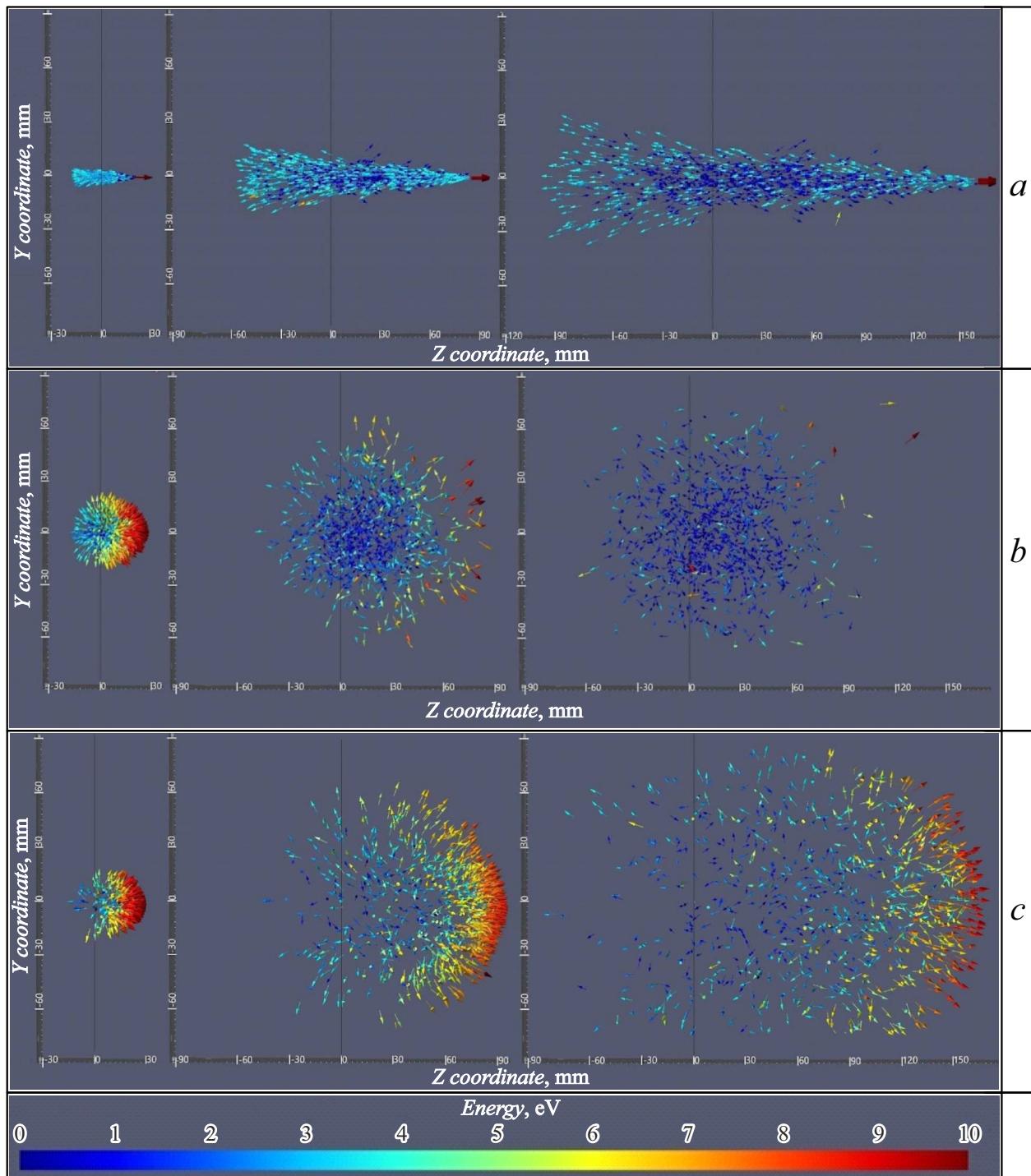


Рис. 9. Рассеяние пучка атомов бора с энергией 10 eV в аргоне с давлением 1 Ра и температурой 300 К в моменты времени 1.4, 6.4 и 12 μ s после начала движения. Использованы межатомные потенциалы: *a* — жестких сфер, *b* — Леннарда-Джонса, *c* — *ab initio* (рассчитанный в NWChem).

Таблица 2. Средняя энергия (eV) атомов бора при рассеянии в гелии и в аргоне в момент времени 12 μ s

Атомы	Потенциал жестких сфер	Потенциал Леннарда-Джонса	Потенциал <i>ab initio</i> (NWChem)
He	3.89	1.43	4.52
Ar	2.42	1.01	4.72

жестких сфер пучок имеет стрелообразную форму, тогда как в потенциалах Леннарда-Джонса и *ab initio* пучок имеет сферический фронт. В потенциале Леннарда-Джонса частицы быстрее теряют энергию (табл. 2) и направленное движение, чем в потенциале *ab initio*.

Заключение

С помощью программного пакета для вычислительной химии NWChem с использованием методов MP2, CCSD, CCSD(T) были рассчитаны потенциалы межатомного взаимодействия для атомов бора с атомами гелия, неона и аргона. Для потенциалов, полученных методом CCSD(T) с использованием базисов различной точности, с помощью экстраполяции был построен потенциал, соответствующий полному базисному набору. Для данного потенциала, а также в целях сравнения для потенциала жестких сфер и потенциала Леннарда-Джонса, в коде KITe были построены траектории рассеяния атома бора на гелии/неоне/аргоне при различных прицельных параметрах, рассчитаны углы рассеяния, полные и транспортные сечения рассеяния. Было проведено моделирование рассеяния моноэнергетического пучка атомов бора на атомах фонового газа гелия и аргона с учетом теплового движения газа. Показано, что в обоих газах (гелий и аргон) при использовании потенциала жестких сфер пучок атомов бора при рассеянии имеет направленную стрелообразную форму, в то время как при потенциалах Леннарда-Джонса и *ab initio* частицы разлетаются облаком с радиусным фронтом. При использовании потенциала *ab initio* направленное движение частиц (форма фронта) сохраняется дольше, а потеря энергии частицами происходит значительно медленнее, чем с потенциалом Леннарда-Джонса. Конечно, использование потенциала *ab initio* при моделировании транспорта частиц позволит получить более точные результаты, однако при отсутствии такой возможности использование классического потенциала Леннарда-Джонса покажет достаточно достоверную картину рассеяния с учетом поправок на избыточную потерю энергии частиц при анализе результатов.

Благодарности

Авторы выражают благодарность одному из разработчиков программного пакета NWChem — Edoardo Aprà — за разъяснения и помощь при работе с программой.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] N. Ohtori, Y. Ishii. Phys. Rev. E, **91**, 012111 (2015).

- [2] B. Vorselaars. J. Chem. Phys., **142**, 114115 (2015).
- [3] L. Wang, N. Xu. Phys. Rev. Lett., **112**, 055701 (2014).
- [4] N. Sharifi-Mood, J. Koplik, C. Maldarelli. Phys. Rev. Lett., **111**, 184501 (2013).
- [5] E. Aprà, E.J. Bylaska, W.A. de Jong, N. Govind, K. Kowalski, T.P. Straatsma, M. Valiev, H.J.J. van Dam, Y. Alexeev, J. Anchell, V. Anisimov, F.W. Aquino, R. Atta-Fynn, J. Autschbach, N.P. Bauman, J.C. Becca, D.E. Bernholdt, K. Bhaskaran-Nair, S. Bogatko, P. Borowski, J. Boschen, J. Brabec, A. Bruner, E. Cauët, Y. Chen, G.N. Chuev, C.J. Cramer, J. Daily, M.J.O. Deegan, T.H. Dunning Jr, M. Dupuis, K.G. Dyall, G.I. Fann, S.A. Fischer, A. Fonari, H. Frücht, L. Gagliardi, J. Garza, N. Gawande, S. Ghosh, K. Glaesemann, A.W. Götz, J. Hammond, V. Helms, E.D. Hermes, K. Hirao, S. Hirata, M. Jacquelain, L. Jensen, B.G. Johnson, H. Jónsson, R.A. Kendall, M. Klemm, R. Kobayashi, V. Konkov, S. Krishnamoorthy, M. Krishnan, Z. Lin, R.D. Lins, R.J. Littlefield, A.J. Logsdail, K. Lopata, W. Ma, A.V. Marenich, J. Martin del Campo, D. Mejia-Rodriguez, J.E. Moore, J.M. Mullin, T. Nakajima, D.R. Nascimento, J.A. Nichols, P.J. Nichols, J. Nieplocha, A. Otero-de-la-Roza, B. Palmer, A. Panyala, T. Pirojsirikul, B. Peng, R. Peverati, J. Pittner, L. Pollack, R.M. Richard, P. Sadayappan, G.C. Schatz, W.A. Shelton, D.W. Silverstein, D.M.A. Smith, T.A. Soares, D. Song, M. Swart, H.L. Taylor, G.S. Thomas, V. Tipparaju, D.G. Truhlar, K. Tsemekhman, T. Van Voorhis, Á. Vázquez-Mayagoitia, P. Verma, O. Villa, A. Vishnu, K.D. Vogiatzis, D. Wang, J.H. Weare, M.J. Williamson, T.L. Windus, K. Woliński, A.T. Wong, Q. Wu, C. Yang, Q. Yu, M. Zacharias, Z. Zhang, Y. Zhao, R.J. Harrison. J. Chem. Phys., **152** (18), 184102 (2020).
- [6] L.A. Varshavchik, N.A. Babinov, P.A. Zatylkin, A.A. Chironova, Z.G. Lyullin, A.I.P. Chernakov, A.M. Dmitriev, I.M. Bukreev, E.E. Mukhin, A.G. Razdobarin, D.S. Samsonov, V.A. Senitchenkov, S.Yu. Tolstyakov, I.T. Serenkov, V.I. Sakharov. Plasma Phys. Controlled Fusion, **63** (2), 025005 (2021).
- [7] Л.А. Варшавчик, Д.Д. Галицын, Е.А. Старовойтов, В.А. Бочарников, С.А. Никитенко, Е.Е. Мухин. Письма в ЖТФ, **51** (3), 26 (2025). DOI: 10.61011/PJTF.2025.03.59816.20011
- [8] А.А. Селезенев. Основы метода молекулярной динамики: учебно-методическое пособие (СарФТИ, Саров, 2017)
- [9] J.E. Lennard-Jones. Proc. Roy. Soc., **A106**, 463 (1924).
- [10] P.M. Morse. Phys. Rev., **34**, 57 (1929).
- [11] R.A. Buckingham. Proc. Roy. Soc., **A168**, 264 (1938).
- [12] С.К. Игнатов. Квантово-химическое моделирование атомно-молекулярных процессов: учебное пособие (ННГУ им. Н.И.Лобачевского, Нижний Новгород, 2019)
- [13] M. Head-Gordon, J.A. Pople, M.J. Frisch. Chem. Phys. Lett., **153**, 503 (1988).
- [14] S. Saebø, J. Almlöf. Chem. Phys. Lett., **154**, 83 (1989).
- [15] M.J. Frisch, M. Head-Gordon, J.A. Pople. Chem. Phys. Lett., **166**, 275 (1990).
- [16] K. Raghavachari, J.A. Pople. Int. J. Quantum Chem., **14**, 91 (1978).
- [17] N.C. Handy, R.D. Amos. Chem. Phys. Lett., **98**, 428 (1983).
- [18] G.D. Purvis, R.J. Bartlett. J. Chem. Phys., **76**, 1910 (1982).
- [19] G.E. Scuseria, C.L. Janssen, H.F. Schaefer III. J. Chem. Phys., **89**, 7382 (1988).
- [20] G.E. Scuseria, H.F. Schaefer. J. Chem. Phys., **90**, 3700 (1989).

- [21] J.A. Pople, M. Head-Gordon, K. Raghavachari. *J. Chem. Phys.*, **87**, 5968 (1987).
- [22] C.D. Sherrill, H.F. Schaefer III. *Advances in Quantum Chemistry*, **34**, 143 (1999).
- [23] J.B. Foresman, M. Head-Gordon, J.A. Pople, M.J. Frisch. *J. Phys. Chem.*, **96**, 135 (1992).
- [24] M. Head-Gordon, R.J. Rico, M. Oumi, T.J. Lee. *Chem. Phys. Lett.*, **219**, 21 (1994).
- [25] M. Head-Gordon, D. Maurice, M. Oumi. *Chem. Phys. Lett.*, **246**, 114 (1995).
- [26] A.C. West, J.D. Lynch, B. Sellner, H. Lischka, W.L. Hase, T.L. Windus. *Theor. Chem. Acc.*, **131**, 1123 (2012).
- [27] J.B. Foresman, A.E. Frisch. *Exploring chemistry with electronic structure methods: A guide to using Gaussian*, 2nd edition (PA: Gaussian Inc., Pittsburgh, 1996)
- [28] Электронный ресурс. Режим доступа:
<https://habr.com/ru/articles/580770/>
- [29] Электронный ресурс. Режим доступа:
https://www.youtube.com/watch?v=oU1zO2bPPB4&list=PLm8ZSArAXicL3jKr_0nHhs5TwfhdkMFhh&index=100
- [30] R. Hellmann, E. Bich, E. Vogel. *Molecular Phys.*, **105** (23–24), 3013 (2007).
DOI: 10.1080/00268970701730096
- [31] D.S. Bezrukov, N.N. Kleshchina, I.S. Kalinina, A.A. Buchachenko. *J. Chem. Phys.*, **150**, 064314 (2019).
DOI: 10.1063/1.5071457
- [32] D.N. Ruzic, S.A. Cohen. *J. Chem. Phys.*, **83**, 5527 (1985).
DOI: 10.1063/1.449674
- [33] T.H. Dunning Jr. *J. Chem. Phys.*, **90** (2), 1007 (1989).
- [34] A.P. Rendell, T.J. Lee, A. Komornicki, S. Wilson. *Theoretica Chimica Acta*, **84** (4), 271 (1993).
- [35] S. Lehtola. *Intern. J. Quant. Chem.*, **119** (19), e25968 (2019).
- [36] K.A. Peterson, D.E. Woon, T.H. Dunning Jr. *J. Chem. Phys.*, **100**, 7410 (1994). DOI: 10.1063/1.46688433
- [37] D. Feller, J.A. Sordo. *J. Chem. Phys.*, **112**, 5604 (2000).
DOI: 10.1063/1.481135