

## КЛАСТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДсорбции СВЕРХТЯЖЕЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗОЛОТА МЕТОДАМИ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

*А.В. Зайцевский<sup>1</sup>, А.В. Титов<sup>2</sup>, Е.А. Рыкова<sup>3</sup>*

<sup>1</sup> ИВЭПТ, РНЦ «Курчатовский институт», г. Москва

<sup>2</sup> ПИЯФ РАН, г. Гатчина

<sup>3</sup> Центр фотохимии РАН, г. Москва.

Анализируются особенности различных методов релятивистской теории функционала плотности (РТФП) как средств кластерного моделирования взаимодействия атомов сверхтяжелых элементов (СТЭ) с поверхностью золота. Специфика систем "атом СТЭ - кластер Au" заключается в больших амплитудах релятивистских эффектов и сложности картины их интерференции с кулоновскими корреляциями электронов. Особую роль, в том числе и для состояний с замкнутыми электронными оболочками, играют зависящие от спина релятивистские эффекты. Отдельной проблемой является медленная сходимость результатов по мере увеличения размеров кластеров Au. Представлен сравнительный анализ технологий моделирования, предполагающих явное описание всех электронов системы и использующих релятивистские псевдопотенциалы атомных остовов. Модели псевдопотенциалов, предполагающие явное описание части остовных оболочек и построенные на основании результатов прецизионных релятивистских расчетов свободных атомов, в принципе обеспечивают более чем достаточную для большинства приложений точность прогнозирования химических свойств. Их использование позволяет рассчитывать характеристики взаимодействий СТЭ с достаточно большими кластерами, не прибегая к рискованным приближениям при дискретизации задачи. Надежность прогнозирования ограничивается сильной зависимостью результатов расчета от выбора конкретной модели функционала при невозможности подбора модели на основе экспериментальных данных. Обсуждается возможность оптимизации схемы РТФП с использованием результатов скалярно-релятивистских расчетов неэмпирическими методами теории многочастичных систем.

В качестве иллюстрации приводятся результаты кластерного моделирования взаимодействия атомов элементов 112 и 114 с поверхностью кристалла золота; эти результаты сопоставляются с термохроматографическими данными.

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 09-03-00655-а и 09-03-12255-офи-м).*