

Псевдопотенциалы для первопринципных расчетов соединений урана

Г.С.Смирнов, В.В.Стегайлов
ОИВТ РАН, ВШЭ

Использование псевдопотенциалов является стандартным подходом при расчете электронной структуры веществ. Уменьшение количества электронов в системе приводит к существенному увеличению скорости расчета. Однако количество псевдопотенциалов для тяжелых элементов в литературе ограничено, зачастую они плохо протестированы. В работе приводится сравнение различных псевдопотенциалов для урана. Представлен свой псевдопотенциал для урана в форме Гёдеккера-Тетера-Хуттера. Его точность демонстрируется серией расчетов для ряда ураносодержащих молекул и кристаллического гамма-урана.