

Le potentiel ZBL

Laurent Soulard

24 septembre 2019

1 Définition

Le potentiel ZBL est défini par :

$$E_{ij}(r_{ij}) = V(r_{ij})\phi\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) + S(r_{ij}) \quad (1)$$

$$V(r_{ij}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} \quad (2)$$

avec :

Z_i : numéro atomique de l'atome i

Z_j : numéro atomique de l'atome j

r_{ij} : distance entre i et j

$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \times 10^9$ S.I.

e : charge de l'électron

$a = \frac{a_1}{Z_i^{a_2} + Z_j^{a_2}}$

La fonction $\phi\left(\frac{r_{ij}}{a}\right)$ est définie comme suit, en posant $x = \frac{r_{ij}}{a}$:

$$\phi(x) = \phi_1 e^{-\phi_2 x} + \phi_3 e^{-\phi_4 x} + \phi_5 e^{-\phi_6 x} + \phi_7 e^{-\phi_8 x} \quad (3)$$

La fonction $S(r_{ij})$ est définie par :

$$S(r_{ij}) = C \text{ si } r_{ij} < r_1 \quad (4)$$

$$S(r_{ij}) = \frac{A}{3}(r_{ij} - r_1)^3 + \frac{B}{4}(r_{ij} - r_1)^4 + C \text{ si } r_1 < r_{ij} < r_c \quad (5)$$

avec :

$$A = \frac{-3E'(r_c) + (r_c - r_1)E''(r_c)}{(r_c - r_1)^2} \quad (6)$$

$$B = \frac{2E'(r_c) - (r_c - r_1)E''(r_c)}{(r_c - r_1)^3} \quad (7)$$

$$C = -E(r_c) + \frac{1}{2}(r_c - r_1)E'(r_c) - \frac{1}{12}(r_c - r_1)^2 E''(r_c) \quad (8)$$

Les paramètres du potentiel sont reportés dans le tableau 1 et ses dérivées dans la section 2. Les constantes A , B et C sont à calculer à l'initialisation

2 Dérivées

$$E'(r_{ij}) = V'(r_{ij})\phi\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) + V(r_{ij})\phi'\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) + S'(r_{ij}) \quad (9)$$

$$E''(r_{ij}) = V''(r_{ij})\phi\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) + 2V'(r_{ij})\phi'\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) + V(r_{ij})\phi''\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) + S''(r_{ij}) \quad (10)$$

$$V'(r_{ij}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}^2} \quad (11)$$

$$V''(r_{ij}) = 2\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j e^3}{r_{ij}^3} \quad (12)$$

$$\phi'\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) = \frac{d\phi\left(\frac{r_{ij}}{a}\right)}{dr_{ij}} \quad (13)$$

$$= \frac{1}{a} \left(-\phi_1 \phi_2 e^{-\phi_2 x} - \phi_3 \phi_4 e^{-\phi_4 x} - \phi_5 \phi_6 e^{-\phi_6 x} - \phi_7 \phi_8 e^{-\phi_8 x} \right) \quad (14)$$

$$\phi''\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) = \frac{d^2\phi\left(\frac{r_{ij}}{a}\right)}{dr_{ij}^2} \quad (15)$$

$$= \frac{1}{a^2} \left(\phi_1 \phi_2^2 e^{-\phi_2 x} + \phi_3 \phi_4^2 e^{-\phi_4 x} + \phi_5 \phi_6^2 e^{-\phi_6 x} + \phi_7 \phi_8^2 e^{-\phi_8 x} \right) \quad (16)$$

$$S'(r_{ij}) = 0 \text{ si } r_{ij} < r_1 \quad (17)$$

$$S'(r_{ij}) = A(r_{ij} - r_1)^2 + B(r_{ij} - r_1)^3 \text{ si } r_1 < r_{ij} < r_c \quad (18)$$

$$S''(r_{ij}) = 0 \text{ si } r_{ij} < r_1 \quad (19)$$

$$S''(r_{ij}) = 2A(r_{ij} - r_1) + 3B(r_{ij} - r_1)^2 \text{ si } r_1 < r_{ij} < r_c \quad (20)$$

Paramètres	Valeur	Unité
a_1	0.46850	
a_2	0.23000	
e	1.6×10^{-19}	Coulomb
ϕ_1	0.18175	Sans unité
ϕ_2	3.19980	Sans unité
ϕ_3	0.50986	Sans unité
ϕ_4	0.94229	Sans unité
ϕ_5	0.28022	Sans unité
ϕ_6	0.40290	Sans unité
ϕ_7	0.02817	Sans unité
ϕ_8	0.20162	Sans unité

TABLE 1 – Paramètres du potentiel ZBL