

УДК 539.192; 539.194

В.А. Килин*, Р.Ю. Килин*, В.М. Зеличенко**

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ФУЛЛЕРЕНА

* Томский политехнический университет

** Томский государственный педагогический университет

Фуллерены, новый класс высокосимметричных соединений углерода, и их соединения представляют большой интерес как с теоретической, так и с практической точек зрения. Разнообразные уникальные свойства фуллеренов обещают революционные прорывы в технологиях и технике, медицине, электронике, лазерной физике и т.д.

Среди этих свойств особое место занимают оптические свойства, процессы фотопоглощения и фотоионизации в широком диапазоне частот внешнего электромагнитного поля. Изучение этих процессов предполагает в первую очередь знание электронной структуры в основном и возбужденных состояниях, в том числе структуры непрерывного спектра. К сожалению, теоретические квантово-химические методы для расчета возбужденных состояний и состояний непрерывного спектра таких сложных молекул оказываются непригодными. Однако высокая, практически квазисферическая, симметрия фуллерена (рис. 1)

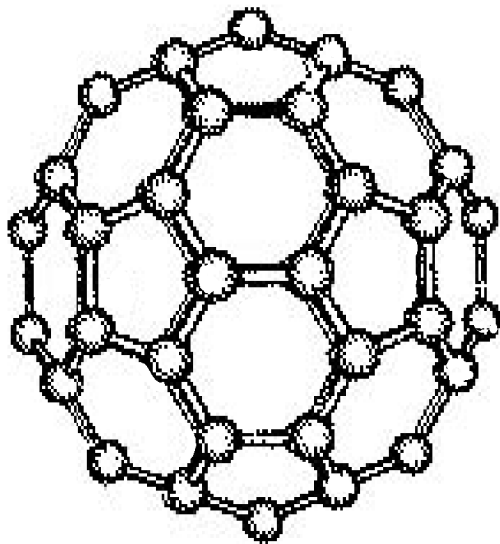


Рис. 1. Фуллерен C₆₀

наводит на мысль о возможности использования для этих целей модельных «атомоподобных» потенциалов с тем, чтобы на базе этих расчетов использовать для изучения физических свойств фуллерена мощные методы атомной физики и атомной спектроскопии. К таким «атомоподобным» моделям относятся модели потенциальных ящиков [1], модель равномерно заряженной сферы [2], модель «размазанного» сферическо-

го слоя [3] и т.д. Эти модели строятся исходя из общего вида потенциала электрон-ядерного взаимодействия

$$V_{en}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = - \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_{\alpha}}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}|}, \quad (1)$$

где N – число ядер, Z_{α} – заряд ядра, $\mathbf{R}(R_{\alpha}, \theta_{\alpha}, \varphi_{\alpha})$ и $\mathbf{r}(r, \theta, \varphi)$ – координаты ядра и электрона соответственно (начало координат выбирается в геометрическом центре фуллерена). Однако в этих моделях не учитывается специфика распределения электронной плотности вблизи ядер. В настоящей работе предлагается потенциал, зависящий от некоторого параметра ρ , который мы называем «прицельным» параметром, определяемым условиями

$$\begin{cases} \theta = \theta_0, \\ \varphi = \varphi_0. \end{cases} \quad (2)$$

Этот потенциал, который можно называть «потенциалом в заданном направлении», имеет теперь вид

$$V_d(r, \theta_0, \varphi_0, \mathbf{R}) = - \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_{\alpha}}{|\mathbf{r}(r, \theta_0, \varphi_0) - \mathbf{R}_{\alpha}|}. \quad (3)$$

На рис. 2 представлен вид различных модельных потенциалов, используемых для расчета электронной структуры фуллерена. Здесь V_{rect} – потенциал «ящика», V_{sph} – потенциал сферически-сим-

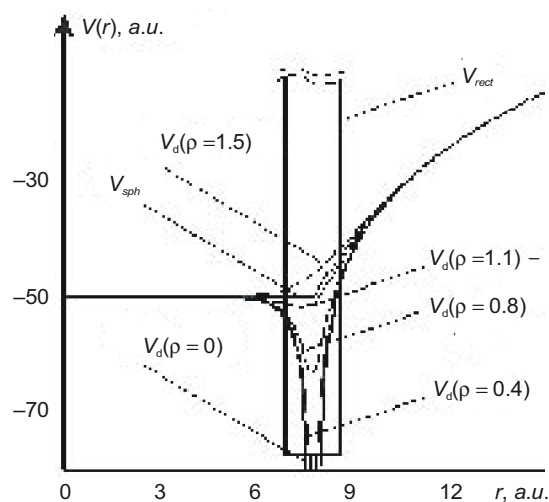


Рис. 2. Модельные потенциалы фуллерена C₆₀

метричной модели, $V_d(\rho)$ – предлагаемый модельный потенциал. С этим потенциалом в приближениях Хартри и Хартри-Фока проведены расчеты волновых функций и одноэлектронных энергий для 60 внешних валентных электронов в конфигурации $s^2p^6d^{10}f^4g^{18}h^{10}$. Параметр ρ выбирается таким образом, чтобы обеспечить максимальное соответствие расчи-

танных и экспериментальных ионизационных потенциалов $IP_1=7.58$ eV, $IP_2=11.50$ eV [4]. Для упрощения вычислений внутренние и суб-валентные электроны объединяются в замкнутые оболочки.

Как можно видеть из таблицы, наилучшее соответствие потенциалов ионизации достигается в приближении Хартри для $\rho = 0.38$.

Одноэлектронные энергии ϵ (eV) конфигурации, $n_r = n - l - 1$

| Приближение | inner (n, l) ^q | sub-val. (n, l) ^q | s ² | p ⁶ | d ¹⁰ | f ⁴ | g ¹⁸ | h ¹⁰ |
|---|------------------------------|---------------------------------|----------------|----------------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| $n_r = 1$, Хартри, $V_{\text{rect}}(d = 0.99 \text{ а.е.},$ $h = 73.0 \text{ Ry})$ | core | 180 | -15.80 | -15.06 | -13.48 | -15.05 | -11.47 | -7.61 |
| $n_r = 1$, Хартри-Фок, $V_d(\rho = 1.42)$ | core | 180 | -17.94 | -16.86 | -15.44 | -17.25 | -12.64 | -8.31 |
| $n_r = 2$, Хартри, $V_d(\rho = 0,38)$ | 120 | 180 | -16.34 | -16.08 | -15.20 | -13.46 | -11.10 | -7.61 |

Литература

1. Gensterblum G. J. // *Electr. Spectr. and Rel. Phen.* 1996. Vol. 81. P. 89–223.
2. Ivanov V.K., Kashenock G.Yu., Polozkov R.G., Solov'yov A.V. // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2001. Vol. 34. P. 669–677.
3. Yabana K., Bertsch G.F. // *Phys. Scr.* 1993. Vol. 48. P. 633.
4. de Vries J. et al. // *Chem. Phys. Lett.* 1992. Vol. 188. P. 159.

УДК 53:372.8

Т.В. Альникова, Е.А. Румбешта***

ОРГАНИЗАЦИЯ ПРОЕКТНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ УЧАЩИХСЯ ПРИ ОБУЧЕНИИ ФИЗИКЕ

* Средняя общеобразовательная школа № 50, г. Томск

** Томский государственный педагогический университет

В настоящее время в практике школьного обучения возникает все большая потребность в применении проектных и исследовательских методов, однако их применение затруднено отсутствием должной методической подготовки учителей. Наши исследования и анализ журнальных публикаций по этому вопросу позволили сделать ряд выводов. Учителя затрудняются в понимании сущности проектного и исследовательского методов; не полностью понимают различия в целях, способах применения методов, в оценке результатов обучения; не четко выделяют качества и способности личности, наиболее успешно развиваемые в процессе применения проектного или исследовательского методов; затрудняются в оценке образовательных эффектов, появляющихся в результате их применения. В данной публикации предлагается способ решения некоторых названных проблем, стоящих перед учителем, внедряющим в практику новые технологии.

В настоящее время в научно-методической литературе уже существуют разъяснения по сути проектного и исследовательского методов в обучении, ос-

новывающиеся на различии видов деятельности, на организацию которой они направлены. Проектная деятельность – совместная учебно-познавательная деятельность, имеющая общую цель, согласованные способы деятельности, направленная на достижение конкретного результата деятельности. Исследовательская деятельность – деятельность учащихся, направленная на получение знания о предмете исследования, решение исследовательской задачи, предполагающая наличие этапов, характерных для исследования в научной сфере [1]. Установлено, что проектные методы чаще используются на гуманитарных предметах, а исследование, как метод обучения, более характерно для предметов естественного цикла – физики, химии, биологии. Поскольку исследовательский метод наиболее разработан в науке – физике, считаем, что обучение школьников исследованию может происходить наиболее эффективно при обучении физике как предмету.

Проектная деятельность является средством развития личности. Метод проектов поможет осуществить