

# IEROSINĀTO STĀVOKĻU APRĒĶINI AR TIEŠO DELTA-SCF METODI

Aleksandrs Platonenko<sup>1</sup>, Roberto Dovesi<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*  
<sup>2</sup>*Turinas Universitātes Ķīmijas fakultāte*

Materiālu datormodelēšana atomu līmenī jau sen kļuvusi par svarīgo materiālzinātnes sastāvdaļu. Kamēr kristālisko vielu īpašību *ab initio* aprēķini pamatstāvoklī (*ground state*) ir plaši pielietojami un pieejami dažāda līmeņa lietotājiem, ierosināto stāvokļu aprēķini joprojām ir sarežģīti un prasa krietni vairāk datorresursu.

Šajā darbā tiek apskatīti vienkāršie ierosinājumi dimantā un Ni<sup>2+</sup> ierosinājumi KNiF<sub>3</sub> un KMgF<sub>3</sub>:Ni kristālos. Ierosinājumu enerģiju aprēķiniem tika pielietota delta-SCF metode, kas jau ilgu laiku tika pielietota molekulām, bet kristāliskās vielās metodes pielietojamība nav tik vienkārša. Izmantojot CRYSTAL17 programmu, B3LYP apmaiņas-korelācijas funkcionālu un 6-21G/6-21\*G bāzes kopas tika aprakstīts (poli)eksitonu īpašības dimantā, piedāvājot skaidrojumu to luminiscences mehānismam. Niķeļa gadījumā tika apskatīti d<sup>8</sup> elementam raksturīgie singleta un tripleta ierosinājumi. Iegūtie rezultāti salīdzināti ar literatūrā pieejamiem datiem.

Darbs veikts LU CFI Studentu un jauno zinātnieku projekta ietvaros Nr SJZ/2021/\*\*

## CALCULATIONS OF THE EXCITED STATES USING DELTA-SCF METHOD

Alexander Platonenko<sup>1</sup>, Roberto Dovesi<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*  
<sup>2</sup>*Department of Chemistry, University of Torino*

Computer modeling of materials at the atomic level has long been an important part of materials science. While ground state *ab initio* calculations of the properties of crystalline compounds are widely used and available to users of different experience levels, the calculations of the excited states are still complex and require much more computer resources.

In this work, simple excitations in diamond and Ni<sup>2+</sup> excitations in KNiF<sub>3</sub> and KMgF<sub>3</sub>:Ni crystals are considered. The delta-SCF method, which has long been used for calculating excited states in molecules, but the applicability of the method in crystalline substances is not so simple. Using the CRYSTAL17 program, the properties of the (poly) excitons in the diamond were described by the B3LYP exchange-correlation functional and 6-21G/6-21 \* G basis sets, offering an explanation of their luminescence mechanism. In the case of nickel, the singlet and triplet excitations characteristic of the d<sup>8</sup> element were considered. The obtained results are compared with the available literature data. The work was supported by Scientific Research Project for Students and Young Researchers Nr. SJZ/2021/\*\* implemented at the Institute of Solid State Physics, University of Latvia