

УДК 519.673, 539.182

## МОДИФИЦИРОВАННЫЙ ЛОКАЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ

А.С. Старовойтов, А.Г. Шкловский

Белгородский государственный университет  
ул.Победы, 85, г.Белгород, 308015, Россия, e-mail: [shklovskii@bsu.edu.ru](mailto:shklovskii@bsu.edu.ru)

Описан расчёт полной энергии в методе локального функционала электронной плотности, использующий новую модель обменно-корреляционной энергии. Эта модель позволяет вычислять полные энергии атомов с экспериментальной точностью. Для этого вводится модифицированный локальный потенциал, включающий потенциал Слетера и предложенный авторами аппроксимирующий обменно-корреляционный потенциал. Этот модифицированный локальный потенциал выбирается так, чтобы вычисленные значения энергии последнего занятого уровня равнялись экспериментальным энергиям ионизации в соответствующих атомах.

Ключевые слова: функционал электронной плотности, локальный потенциал,  $X_\alpha$ -потенциал Слетера, энергия ионизации.

**1. Введение.** С момента опубликования работы Кона-Шема (см., например, [2]) многочисленные авторы предлагали различные варианты обменно-корреляционных потенциалов для получения наилучшей электронной плотности атомов, молекул и твердых тел. Как известно, общих принципов построения хороших потенциалов не существует. Поэтому в литературе предложено очень много вариантов обменно-корреляционных потенциалов и создано много различных программных комплексов, на которых удаётся получить полные энергии атомов и молекул с точностью около 1%. К сожалению, энергии ионизации получить не удаётся с точностью больше 10-15%. Вычисление энергии ионизации как разницы между полными энергиями атома и иона наталкивается на ту трудность, что полные энергии имеют для достаточно больших атомов значения в десятки тысяч электрон-вольт, в то время как энергия ионизации имеет порядок нескольких электрон-вольт. В то же время, точность, с которой экспериментально измерены полные энергии, значительно уступает точности, с которой измерены энергии ионизации. Поэтому большое значение придаётся поиску такого потенциала, который позволяет вычислить энергию последнего занятого уровня, равную энергии ионизации.

В статье [1] обсуждалась универсальная аппроксимирующая функция для функционала обменно-корреляционной энергии. В настоящей работе предпринята попытка улучшения приближения локальной плотности для обменно-корреляционной энергии в рамках теории функционала электронной плотности и предложен модифицированный локальный потенциал Слетера (М.ЛПС), использующий эту универсальную аппроксимирующую функцию. Предлагаемый метод применяется для нахождения полной энергии и энергии ионизации атомов. В работе используется атомная система единиц  $\hbar = e^2 = m_e = 1$ .

Рассмотрим выражение для вычисления полной энергии многоэлектронных систем в рамках теории функционала электронной плотности [2]

$$E = T_e[n] + E_{har}[n] + E_{xc}[n] + \int V_e(\vec{r}) \cdot n(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (1)$$

где  $T_e[n]$  – функционал кинетической энергии, который будет обсуждаться ниже,  $E_{har}[n]$  – функционал Хартри,  $E_{xc}[n]$  – обменно-корреляционный функционал,  $V_e(\vec{r})$  – потенциал поля, в котором находится многоэлектронная система,  $n(\vec{r})$  – плотность электронов в системе, а интегрирование проводится по всему объему электронной системы. Для обменно-корреляционного функционала и функционала Хартри существуют известные выражения [2]:

$$E_{har}[n] = \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}_1)n(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \tag{2}$$

$$E_{xc}[n] = \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}_1)\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)n(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \tag{3}$$

Здесь

$$\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \int_0^1 (g_\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - 1) d\lambda, \tag{4}$$

где  $g_\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  – парная корреляционная функция для системы с электрон-электронным взаимодействием с фиктивным зарядом  $\lambda$ , который изменяется от 0 (для не взаимодействующей системы электронов) до 1 (электрон-электронное взаимодействие включено полностью).

К сожалению, вычисление функции  $g_\lambda$  является очень сложной задачей. Поэтому прямое решение соответствующих уравнений для парной корреляционной функции до сих пор не привело к успеху, кроме случая однородного электронного газа и некоторых простейших модельных систем. Несмотря на это, было доказано, что функция  $\bar{h}$  должна обладать некоторыми общими свойствами [2]: во-первых, она обязана быть симметричной:

$$\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \bar{h}(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \tag{5}$$

во-вторых, на достаточно больших расстояниях она должна обращаться в нуль:

$$\lim_{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| \rightarrow \infty} \bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0, \tag{6}$$

и в-третьих, она должна удовлетворять правилу сумм:

$$\int n(\vec{r}_2)\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)d\vec{r}_2 = -1, \quad \int n(\vec{r}_1)\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)d\vec{r}_1 = -1. \tag{7}$$

При рассмотрении ограниченных систем (атомов или молекул) из функции  $\bar{h}$  можно естественным образом выделить постоянное слагаемое [3], описывающее компенсацию усредненного самодействия, которое входит в потенциал Хартри. Второе слагаемое обозначим  $\eta(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ . В результате имеем

$$\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left( -\frac{1}{N_e} + \eta(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right) \Theta(R - |\vec{r}_1|) \cdot \Theta(R - |\vec{r}_2|), \tag{8}$$

где  $N_e$  – число электронов в атоме;  $R$  – радиус атома;  $\Theta(R - r)$  – функция Хевисайда, обеспечивающая наличие обмена и корреляции только внутри атома. В настоящей работе для слагаемого  $\eta(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  будет использоваться аппроксимирующее выражение:



$$\eta(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{(3 + N_e^{1/3})(N_e - 1)}{N_e} \cdot F(r_1) \cdot F(r_2), \quad (9)$$

где  $F(x)$  – универсальная аппроксимирующая функция, которая имеет следующий вид:

$$F(x) = x \cdot \ln(a \cdot x) \cdot \exp(-b \cdot x^2). \quad (10)$$

В этой функции параметр  $a$  определяет точку перемены знака функции  $F(x)$  и он вычисляется исходя из условия

$$\int_0^R r^2 \cdot F(r) \cdot n(r) dr = 0, \quad (11)$$

которое обеспечивает выполнение закона сохранения перераспределённого заряда обменно-корреляционной дырки. Параметр  $b$  определяет скорость убывания перераспределённого заряда обменно-корреляционной дырки.

В работе [1] удалось с наперед заданной точностью получить все полные энергии легких атомов, подбирая для каждой атомной системы параметр  $b$  и определяя соответствующий параметр  $a$ , согласно (11). Однако, получившиеся при этом энергии последнего занятого уровня каждого из атомов отличались от энергий ионизации. Кроме того, они оказались менее точными, чем вычисленные ранее в методе Хартри-Фока по теореме Купменса (см., например, [4], [7]). Хотя энергии внешних электронов в методе функционала электронной плотности и не удовлетворяют теореме Купменса, принято считать, что при хорошей точности аппроксимации электронной плотности эти энергии должны быть близки к энергиям ионизации.

В теории функционала электронной плотности широко используется метод локального  $X_\alpha$ -потенциала Слетера [4]. Он основывается на расчете обменной энергии в однородном электронном газе. В этом случае отсутствуют слагаемые с кулоновской потенциальной энергией классического вида из-за существования нейтрализующего фона однородного положительного заряда. Потенциальная энергия в "приближении ферми-дырки" [2] является исключительно обменной. Её можно рассматривать как электростатическое взаимодействие между электроном, находящимся в начале координат и создаваемой им вокруг себя дыркой с плотностью  $n_0(g(r) - 1)$ . Здесь корреляционная функция  $g(r)$  найдена точно, и она была вычислена ещё в работе [5]. Было показано, что для однородного электронного газа с плотностью  $n_0$ , она имеет вид:

$$g(r) = 1 - \frac{9}{2} \left[ \frac{j_1(k_f r)}{k_f r} \right]^2, \quad n_0 = \frac{k_f^3}{3\pi^2}, \quad j_1(x) = \frac{\sin(x) - x \cos(x)}{x^2}. \quad (12)$$

Вычисляя интеграл (3) для обменной энергии однородного электронного газа, с учётом (12), легко получим выражение

$$E_{xc}[n_{\downarrow 0}] = \frac{3}{4} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \int n_{\downarrow 0}^{4/3}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1. \quad (13)$$

Здесь  $n_{\downarrow 0}$  – электронная плотность однородного электронного газа со спином, направленным вниз. Этот результат получен для однородной бесконечной системы, для которой можно пренебречь самодействием. Слетер [4] предложил использовать этот результат как

приближённый в случае неоднородных ограниченных систем, заменив постоянный коэффициент в (13) на коэффициент  $\alpha$ , который подбирался для каждого атома из условия равенства энергий (1) с учетом (13) и энергий, вычисленных по методу Хартри-Фока.

**2. Модифицированный локальный потенциал.** В настоящей работе делается попытка построения комбинированного приближения, которое бы учитывало достоинства обоих методов: метода обменного потенциала Слетера и приближения аппроксимированного локального потенциала (8-11). Введем приближение модифицированного локального потенциала Слетера (МЛПС). Оно включает в себя модифицированную энергию Слетера (13) и вклад от усредненного самодействия и обменно-корреляционного члена из (8) с учётом (9-11). В итоге получается следующее выражение для обменно-корреляционной энергии в МЛПС:

$$E_{xc}[n] = -\frac{1}{2N_e} \left[ \frac{3}{2} \beta(N_e - 1) \int n^{4/3}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 + \int \frac{n(\vec{r}_1)n(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \right] - \frac{(3 + N_e^{1/3})(N_e - 1)}{2N_e} \int \frac{F(\vec{r}_1)n(\vec{r}_1)F(\vec{r}_2)n(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \tag{14}$$

Коэффициент  $\beta$  подбирается из условия наилучшего приближения энергии последнего заполненного уровня к энергии ионизации. Поэтому он не является коэффициентом при обменном члене и не совпадает с коэффициентом в  $X_\alpha$ -потенциале Слетера.

Приведём вывод уравнения Кона-Шема для атома в приближении МЛПС. Будем искать минимум функционала (1) при условии

$$\int n(\vec{r})d\vec{r} = N_e, \quad n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_e} |\Psi_i(\vec{r})|^2. \tag{15}$$

Здесь  $N_e$  – количество электронов в атоме, а функция  $\Psi_i(\vec{r})$  является решением уравнения Кона-Шема:

$$[-(1/2)\Delta + V_{at}(\vec{r})] \cdot \Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}). \tag{16}$$

Как обычно, считаем, что уравнение Кона-Шема описывает систему невзаимодействующих квазичастиц с энергией  $\varepsilon_i$ , находящихся в некотором эффективном внешнем потенциале  $V_{at}(\vec{r})$ . Этот потенциал выбирается таким образом, чтобы электронная плотность квазичастиц  $n(\vec{r})$  была та же, что и у электронов в рассматриваемом атоме. Поэтому для функционала  $T_e[n]$  имеем выражение

$$T_e[n] = \sum_{i=1}^{N_e} \varepsilon_i - \int V_{at}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r}. \tag{17}$$

С учётом (2), (17) и приближения (14), для обменно-корреляционной энергии  $E_{xc}[n]$ , функционал полной энергии (1) с точностью до аппроксимирующих констант  $b$  и  $\beta$  становится определённым. Минимум функционала (1) определяется из равенства нулю его первой вариации по электронной плотности  $n(r)$ . При этом поправки к полной энергии  $E$ , например, за счёт малого изменения электронной плотности или потенциала  $V_{at}(r)$  будут иметь второй порядок малости. Поэтому вблизи от точной электронной плотности модифицированный функционал можно считать известным вплоть до второго порядка. Так



как параметры аппроксимации  $b$  и  $\beta$  подбираются из условия равенства полной экспериментальной энергии для атома, взятой из [6] с поправками на релятивистские эффекты, значению функционала (1) в приближении МЛПС, то при вычислении первой вариации эти параметры можно считать неизменными. В этих условиях, можно вычислять вариацию по электронной плотности, считая параметры аппроксимации постоянными.

Вычисляя вариацию функционала (1) по электронной плотности  $n(r)$  и приравнявая её к нулю, получим выражение для неизвестного потенциала  $V_{at}(r)$ :

$$V_{at}(r) = \nu_{xc}(r) + \nu_{har}(r) - \frac{Z}{r}. \quad (18)$$

Здесь  $Z$  – заряд ядра атома,  $\nu_{har}(r)$  – хартриевский и  $\nu_{xc}(r)$  – обменно-корреляционный потенциалы атома в приближении МЛПС.

Варьируя (1) по электронной плотности  $n(r)$ , с учётом (14), для суммы потенциалов  $\nu_{har}[r] + \nu_{xc}[r]$ , входящих в (18), получим выражение

$$\nu_{xc}[r] + \nu_{har}[r] = \frac{(N_e - 1)}{N_e} \int \frac{n(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} d\vec{r}_2 + V_s[n] + V_{xcp}[n]. \quad (19)$$

Здесь введено обозначение для потенциала Слетера  $V_s[n]$ :

$$V_s[n] = -(N_e - 1) \cdot \frac{\beta}{N_e} \cdot [n(r)]^{1/3}, \quad (20)$$

а также для потенциала перераспределённого обменно-корреляционного заряда  $V_{xcp}[n]$ :

$$V_{xcp}[n] = (N_e - 1) \cdot \frac{q_{xcp}(r)}{r}. \quad (21)$$

"Заряд"  $q_{xcp}(r)$ , приходящийся на один электрон в сферически симметричном атоме, задаётся формулой:

$$q_{xcp}(r) = \frac{4\pi \cdot (3 + N_e^{1/3}) \cdot F(r)}{N_e} \int_r^R x^2 F(x) n(x) \left(1 - \frac{r}{x}\right) dx. \quad (22)$$

Из (22) видно, что в МЛПС для сферического атома потенциал  $V_{xcp}[n]$  получается локальным без дополнительных приближений.

На рис. 1 приведён график перераспределённого обменно-корреляционного заряда  $(N_e - 1) \cdot q_{xcp}(r)$  для атома Al. Этот график рассчитывался нами по формуле (22).

Подставляя в (18) выражения (19) – (22) с аппроксимирующей функцией (10), получим для сферического атома

$$V_{at}(r) = -\frac{Z}{r} + \frac{(N_e - 1)}{r} \cdot (1 - q_{har}(r) + q_s(r) + q_{xcp}(r)). \quad (23)$$

Величина  $q_s(r)$ , которую можно назвать зарядом Слетера, приходящимся на одну частицу, имеет вид

$$q_s(r) = -\frac{\beta \cdot r}{N_e} \cdot [n(r)]^{1/3}. \quad (24)$$

будет располагаться выше оси абсцисс. Обычно константа  $\beta$  не велика, и заряд Слетера играет роль малой добавки к аппроксимированному обменно-корреляционному заряду, а полный перераспределенный заряд имеет вид аналогичный показанному на рис. 1.

Для иллюстрации этого положения на рис. 3 показаны графики суммы перераспределённого заряда  $(N_e - 1) \cdot q_{xcp}(r)$  и слетеровского заряда  $(N_e - 1) \cdot q_s(r)$  в атомах кислорода с отрицательным коэффициентом  $\beta$  и алюминия с положительным коэффициентом  $\beta$ .

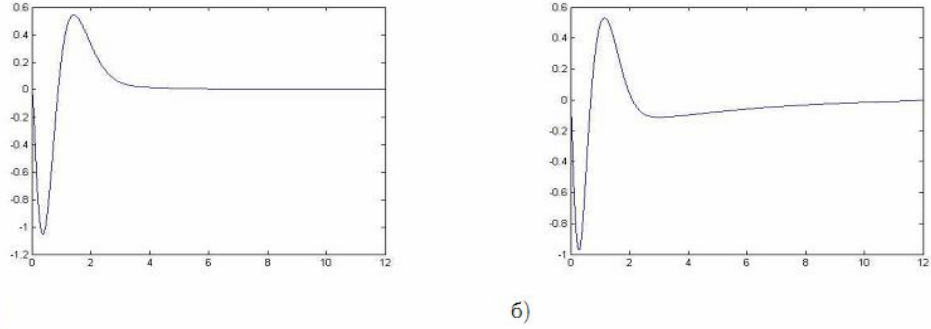


Рис. 3. Полные перераспределенные обменно-корреляционные заряды в атомах кислорода (а) и алюминия (б). Расстояние электрона от ядра даётся в радиусах Бора.

Как видно из рис. 3а и 3б, разный знак заряда Слетера приводит к незначительному перераспределению обменно-корреляционного заряда в области последней занятой электронной оболочки.

В формуле (24) введено также обозначение  $q_{har}(r)$  для величины, которую можно назвать средним зарядом Хартри, приходящимся на один электрон:

$$q_{har}(r) = \frac{4\pi}{N_e} \int_r^R x^2 n(x) \left(1 - \frac{r}{x}\right) dx. \quad (25)$$

Для удобства используем формулу (18) и перепишем выражение (1) для полной энергии  $E$  в виде

$$E = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \varepsilon_{\alpha} - \int V_{at}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + E_{har}[n] + E_{xc}[n] + \int V_e(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (26)$$

Подставляя (24) в (27) и приводя подобные члены, получим окончательное выражение для полной энергии атома:

$$E = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \varepsilon_{\alpha} - (N_e - 1) \cdot 2\pi \cdot \int_0^R r \cdot n(r) \cdot (1 - q_{har}(r) + 0.5 \cdot q_s(r) + q_{xcp}(r)) dr. \quad (27)$$

Здесь использованы обозначения (25) для среднего заряда Хартри  $q_{har}(r)$  и (24) для заряда Слетера  $q_s(r)$ , приходящегося на одну частицу.

**3. Вычислительный эксперимент.** Результаты апробации выведенных нами формул мы дадим на примере расчетов полных нерелятивистских энергий атомов таблицы

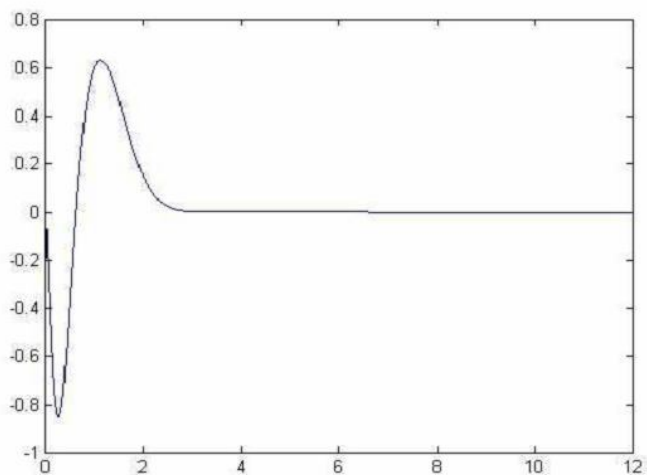


Рис. 1. Перераспределённый заряд  $(N_e - 1) \cdot q_{xcp}(r)$  в атоме Al. Расстояние электрона от ядра даётся в радиусах Бора.

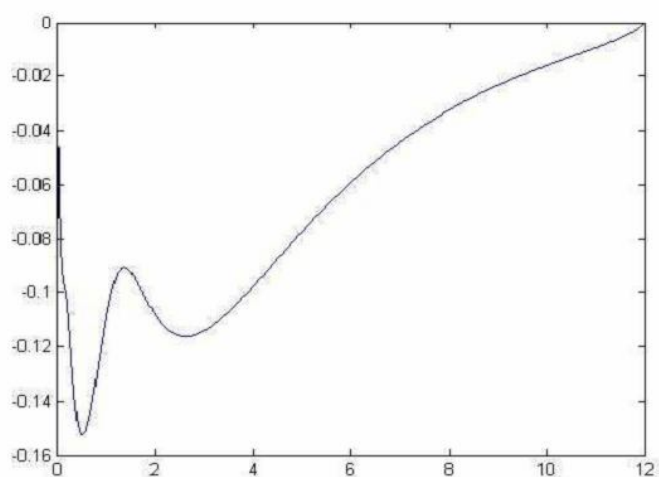


Рис. 2. Заряд Слетера  $(N_e - 1) \cdot q_s(r)$  в атоме Al. Расстояние электрона от ядра даётся в радиусах Бора.

На рис. 2 приведён график зависимости этого заряда от расстояния электрона от ядра для атома Al, рассчитанный по формуле (24). В модели М.ЛСП константа  $\beta$ , определяющая величину слетеровского заряда, не связана напрямую с обменом, поэтому её знак не всегда положителен. График на рис. 2 соответствует положительному значению  $\beta = 0,2047$ . Однако, например, в случае кислорода имеем параметр  $\beta = -0,0855$ , и похожий график



Менделеева, от He до Ar. Для нахождения усреднённой по сфере электронной плотности  $n(r)$  и занятых уровней энергии  $\epsilon_i$  самосогласованное уравнение Кона-Шема (17) с потенциалом (24) решается итерационным методом аналогично [1].

В табл. 1 приведены результаты расчета полной энергии и соответствующие им экспериментальные энергии [6] в электрон-вольтах с поправками на релятивистские эффекты. Полная энергия атома рассчитывалась по формулам (27), (22), (25) и (24), а функция  $F(r)$  – по формуле (10). Для сравнения приведены энергии Хартри-Фока, взятые из работы [7]. В таблице также приведены значения энергий ионизации лёгких атомов из [6] и коэффициентов  $\beta$  для заряда Слетера вместе с коэффициентами  $b$  для аппроксимирующей функции  $F(x)$  соответствующих атомов. Коэффициенты  $\beta$  подбирались так, чтобы экспериментальные энергии ионизации равнялись вычисленным значениям энергии последнего занятого уровня в соответствующих атомах. При этом коэффициенты  $b$  подбирались так, чтобы экспериментальные полные энергии совпадали с полными энергиями, вычисленными по формуле (27).

В заключение хочется отметить, что предложенная модификация метода функционала электронной плотности позволяет при очень высокой скорости расчетов получать точные полные энергии и энергии ионизации.

Таблица 1

Результаты расчета полной энергии и энергий ионизации лёгких атомов, а также соответствующие им экспериментальные энергии [6]

Z	At	$E_{exp}[eV]$	$E_{HF}[eV]$	$E_{teor}[eV]$	$E_{iexp}[eV]$	$E_{iteor}[eV]$	$\beta$	b
2	He	-79,00	-77,872	-79,0021	-24,5876	-25,7655	0	0,54
3	Li	-203,4	-202,257	-203,397	-5,3918	-5,39199	-0,1614	0,1570
4	Be	-399,1	-396,560	-399,0979	-9,3227	-9,32272	0,0717	0,2035
5	B	-670,8	-667,480	-670,811	-8,2981	-8,29808	0,0192	0,1892
6	C	-1029,7	-1025,57	-1029,694	-11,2643	-11,26434	0,3044	0,7822
7	N	-1485,3	-1480,34	-1485,299	-14,53414	-14,53416	0,4191	1,2304
8	O	-2042,1	-2035,69	-2042,11	-13,618	-13,61809	-0,0855	0,1403
9	F	-2713,2	-2705,1	-2713,163	-17,423	-17,42308	0,0997	0,3369
10	Ne	-3507,8	-3497,99	-3507,803	-21,565	-21,5649	0,2699	0,7032
11	Na	-4415,9	-4404,46	-4415,86	-5,1391	-5,13917	0,0861	0,1785
12	Mg	-5446	-5431,85	-5445,95	-7,6463	-7,6464	0,1635	0,3084
13	Al	-6598	-6581,88	-6598,05	-5,9858	-5,98589	0,2047	0,4003
14	Si	-7879	-7860,22	-7878,96	-8,1517	-8,15172	0,3085	0,6098
15	P	-9291	-9271,54	-9290,93	-10,4868	-10,48676	0,4049	0,9016
16	S	-10839	-10816,79	-10839,03	-10,3600	-10,3601	0,1996	0,6399
17	Cl	-12531	-12503,29	-12530,97	-12,968	-12,9676	0,2940	0,8556
18	Ar	-14371	-14335,6	-14370,98	-15,760	-15,75967	0,3839	1,1275



**Литература**

1. Шкловский А.Г. Аппроксимация обменно-корреляционного потенциала в методе функционала электронной плотности // Научные ведомости БелГУ. Серия: Физико-математические науки. – 2007. – 6(37);13. – С.150-155.
2. Теория неоднородного электронного газа / под ред. С. Лундквиста, Н. Марча. – М.: Мир, 1987. – 400 с.
3. Старовойтов А.С., Шкловский А.Г. Обменно-корреляционная энергия в методе локального функционала электронной плотности // Научные ведомости БелГУ. Серия: Физико-математические науки. – 2006. – 6(26);12. – С.114-121.
4. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел / Дж. Слэтер. – М.: Мир, 1978. – 658 с.
5. Wigner E.P., Seitz F. // Phys. Rev. – 1933. – 43. – P.804.
6. Бабичев А.П. Физические величины. Справочник / А.П. Бабичев, И.А. Бабушкина, А.М. Братковский, и др. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
7. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей / С. Фудзинага. – М.: Мир, 1983. – 460 с.

**MODIFIED LOCAL POTENTIAL  
FOR CALCULATION OF ATOMIC IONIZATION ENERGIES****A.S. Starovoitov, A.G. Shklovskii**Belgorod State University  
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: [shklovskii@bsu.edu.ru](mailto:shklovskii@bsu.edu.ru)

New model of the exchange-correlated energy at the calculation of total energy by the method of the local functional of electron density is proposed. It makes be possible to compute total atom energies in the accordance with experimental accuracy. It is used the modified local potential which includes the Slater potential and the approximating exchange-correlated potential proposed ealier. To choose the modified potential, it is taken into account that calculated energies of last filled levels would be equal to experimental ionization energies for each corresponding atom.

Key words: electron density functional, local potential, Slater  $X_\alpha$ -potential, ionization energy.