

## A NOVEL IDENTIFICATION OF THE EXTENDED-RYDBERG POTENTIAL ENERGY FUNCTION<sup>1)</sup>

© 2019 г. S. A. Surulere<sup>1,\*</sup>, M. Y. Shatalov<sup>1</sup>, A. C. P. G. Mkolesia<sup>1</sup>, J. O. Ehigie<sup>2</sup>

<sup>1)</sup> Department of Mathematics and Statistics, Tshwane University of Technology, Pretoria 0001, Republic of South Africa;

<sup>2)</sup> Department of Mathematics and Statistics, University of Lagos, Akoka 100213, Nigeria)

\*e-mail: samuel.abayomi.sas@gmail.com

Поступила в редакцию 29.12.2018 г.  
Переработанный вариант 29.12.2018 г.  
Принята к публикации 10.04.2019 г.

**Новое определение обобщенной функции потенциальной энергии Ридберга.** Обобщенный потенциал Ридберга имеет широкую применимость при определении свойств двухатомных молекул. В настоящей работе мы оцениваем обобщенный потенциал Рюдберга с использованием нового подхода, основанного на объективных функциях наименьших квадратов дифференциального, интегрально-дифференциального и интегрального методов для оценки потенциала. Получены интересные результаты исследований, так как численное дифференцирование (дифференциальный подход), интегрирование (интегрально-дифференциальный и интегральный подходы) согласуются с экспериментальными наборами данных атомов золота. Хорошо известно, что чем больше параметров имеет полуэмпирический межатомный потенциал, тем более гибким и точным он является для экспериментальной подгонки кривой, но это занимает больше вычислительного времени. Через процессорное время мы устанавливаем эффективность и новизну нашего подхода для пяти параметров. Библ. 13. Фиг. 5.

**Ключевые слова:** межатомные потенциалы, наименьшие квадраты, Мюррей–Сорби, объективная функция наименьших квадратов.

**DOI:** 10.1134/S0044466919080155

---

<sup>1)</sup>Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.