

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Ивановский государственный химико-технологический университет  
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева

*При финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных  
исследований*

# **VII Всероссийская конференция по структуре и энергетике молекул**

## **СБОРНИК ТЕЗИСОВ**

*Посвящается 100-летию со дня рождения  
профессора К.С. Краснова*

ИГХТУ. Иваново. 19 – 23 ноября 2018 г.

Материалы VII Всероссийской конференции по структуре и энергетике молекул (19 – 23 ноября 2018 г.), Иваново, 2018, 112 с.

Ответственные за выпуск:

д.х.н., проф. Гиричев Г.В.

д.х.н., проф. Белова Н.В.

**Тезисы публикуются в авторской редакции**

**ISBN 978-5-9616-0539-6**

© ФГБОУ ВО «Ивановский государственный  
химико-технологический университет», 2018

## РАСЧЕТ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛЫ ДИБОРАНА МЕТОДОМ ОПЕРАТОРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКА

**Краснощеков С.В.<sup>1</sup>**

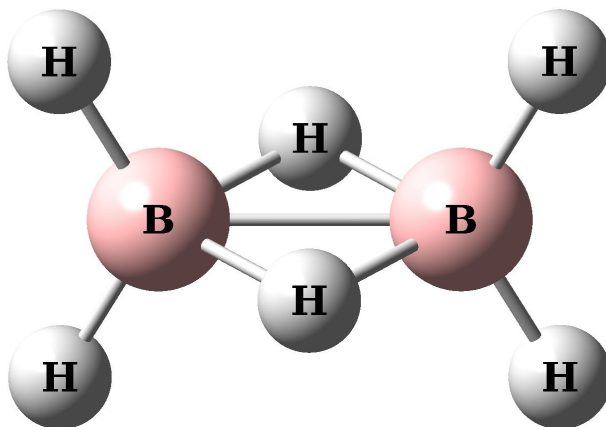
<sup>1</sup>*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Ленинские горы, 3-1, г. Москва, Россия, sergeyk@phys.chem.msu.ru*

Восьмиатомная молекула диборана ( $B_2H_6$ ) (см. рис. 1) представляет значительный теоретический интерес ввиду ее необычной электронной структуры и наличия сильных колебательных резонансных взаимодействий. Ее ангармонические колебательные состояния изучались различными методами, в том числе с помощью теории возмущений второго порядка (VPT2) и матричным вариационным методом [1,2].

Численно-аналитическая операторная реализация канонической колебательной теории возмущений Ван Флека (Canonical Van Vleck Perturbation Theory, CVPT) позволяет расширить обычные границы второго порядка (CVPT2) до четвертого (CVPT4) и более высоких порядков, в зависимости от размера молекулы [3].

На примере пяти- и шестиатомных молекул (дигалогенметаны и 1,1-дифторэтилен) было показано [4,5], что поправки в четвертом порядке могут иметь порядок нескольких обратных сантиметров и должны быть учтены в прецизионных расчетах, использующих высококачественные теоретические силовые поля.

В настоящей работе на основе гибридного квантово-механического секстичного силового поля MP2/aug-cc-pVTZ (ангармоническая часть) + CCSD(T)/aug-cc-pVQZ (гармоническая часть) с помощью операторной теории возмущений четвертого порядка (CVPT4) были рассчитаны колебательные состояния восьмиатомных молекул  $^{11}B_2H_6$  и  $^{10}B_2H_6$ . Достигнута хорошая точность ( $\sim 5 \text{ см}^{-1}$ ) теоретического предсказания фундаментальных частот, охарактеризованы колебательные резонансы, показана важность учета поправок четвертого порядка и продемонстрирован систематический характер ошибок в использованном квантовомеханическом силовом поле.



*Рисунок 1. Структура молекулы диборана*

1. John F. Stanton and Jürgen Gauss // J. Chem. Phys., 1998, V. 108, p. 9218-9220.
- Didier Begue, Claude Pouchan, Jean-Claude Guillemin, Abdessamad Benidar // Theor. Chem. Acc., 2012, V. 131, p. 1122(1-11).
- Sergey V. Krasnoshchekov, Elena V. Isayeva and Nikolay F. Stepanov // J. Phys. Chem. A, 2012, V. 116, p. 3691-3709.
- Sergey V. Krasnoshchekov, Norman C. Craig, Nikolay F. Stepanov // J. Phys. Chem. A, 2013, V. 117, p. 3041-3056.
- Sergey V. Krasnoshchekov, Roman S. Schutski, Norman C. Craig, Marat Sibaeve and Deborah L. Crittenden // J. Chem. Phys., 2018, V. 148, p. 084102(1-13).