



Международная научная конференция
студентов, аспирантов и молодых учёных

ЛОМОНОСОВ – 2024

Секция «Химия»

12–26 апреля 2024

Материалы конференции



lomonosov2024.chem.msu.ru



УДК 54
ББК 24я43
М34

Отв. ред.: Дзубан А.В.

М34 **Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2024», секция «Химия».** – М.: Издательство «Перо», 2024. – 57 МБ. [Электронное издание]. – Систем. требования: процессор x86 с тактовой частотой 500 МГц и выше; 512 Мб ОЗУ; Windows XP/7/8; видеокарта SVGA 1280x1024 High Color (32 bit). – Загл. с экрана.

ISBN 978-5-00244-410-6

ISBN 978-5-00244-410-6

УДК 54
ББК 24я43
© Авторы статей, 2024



Поверхности потенциальной энергии и равновесные геометрии низколежащих возбуждённых состояний молекулы Cs₃

Лихарев А.С., Бормотова Е.А.

Студент, 6 курс специалитета

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

E-mail: a_liharev@mail.ru

Ультрахолодные молекулы открывают большие возможности для теоретических исследований и практического применения, поскольку их можно приготовить в точно заданных квантовых состояниях. Однако синтез тримеров щелочных металлов до сих пор остается трудной задачей. Среди возможных подходов к синтезу изолированного тримера можно выделить синтез внутри гелиевых капель и различные схемы лазерно-индуцированной фотоассоциации. Точное знание электронной структуры таких молекул позволит исследовать столкновения и химические реакции на квантовом уровне.

В настоящей работе были проведены квантово-химические расчеты основного и низколежащих электронно-возбужденных дублетных $7/3/3/7$ и квартетных $3/2/1/4$ состояний соответствующих симметриям $a_1/a_2/b_1/b_2$ молекулы Cs₃. Неэмпирические расчеты электронной структуры тримера цезия были выполнены при помощи девятиэлектронного эффективного остоного потенциала (ЕСР46МДФ) многоференсным методом конфигурационного взаимодействия с учётом однократных и двукратных возбуждений (MR-CISD) и с явной динамической корреляцией только трех валентных электронов. Молекулярные орбитали (МО) оптимизировались усредненным по дублетным и квартетным состояниям многоконфигурационным методом самосогласованного поля (SA-CASSCF). Остовно-валентные корреляции учитывались неявным образом с помощью одноэлектронного не зависящего от углового момента остонополяризационного потенциала (СРР), заданного в форме Мёллера-Майера. Все расчёты были выполнены с помощью пакета программ Molpro.

В результате расчетов были построены ППЭ с шагом $0.1 \text{ \AA}$ в широком диапазоне межъядерных расстояний ($2\text{--}15 \text{ \AA}$). Для установления точного положения локальных и глобальных минимумов, соответствующим треугольным и линейным геометриям молекулы Cs₃ (т.е. равновесные геометрии основного и возбуждённых состояний), была написана программа на языке Python, которая в заданном интервале межъядерных расстояний ($0.5 \text{ \AA}$ по каждой координате) позволила за 50-70 итераций рассчитать соответствующие минимумы с точностью $10^{-3} \text{ \AA}$, 1 см^{-1} .

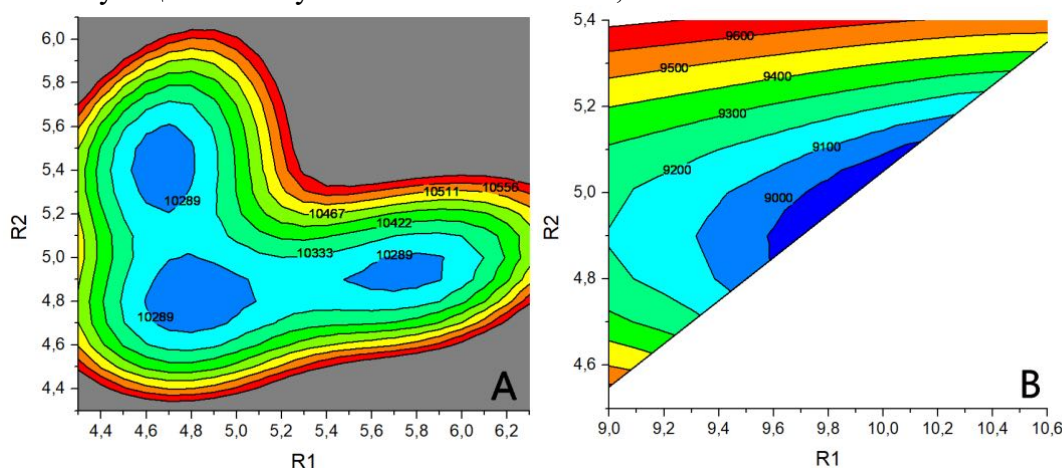


Рис. 1. Проекция ППЭ электронных состояний молекулы Cs₃. Сплошными линиями с подписями к ним обозначены значения энергии в см^{-1} , R_1 и $R_2 = R_3$ – межъядерные расстояния в $\text{\AA}$. (А) $(4)^2A_1$ состояние с тремя минимумами энергии; (В) $(3)^2A_1$ состояние с локальным минимумом соответствующим линейной геометрии молекулы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-00095, <https://rscf.ru/project/22-73-00095/>.

