

# Коэффициент усиления анапольного момента в молекуле $SiO^+$

ТУРЧЕНКО Петр Дмитриевич

Всероссийская научно-практическая конференция  
«Современные проблемы химической физики и теоретической химии и  
экспериментальных методов исследования материалов современной энергетики»

Научный руководитель:  
к.ф.-м.н., доцент кафедры квантовой  
механики СПбГУ,  
Скрипников Леонид Владимирович



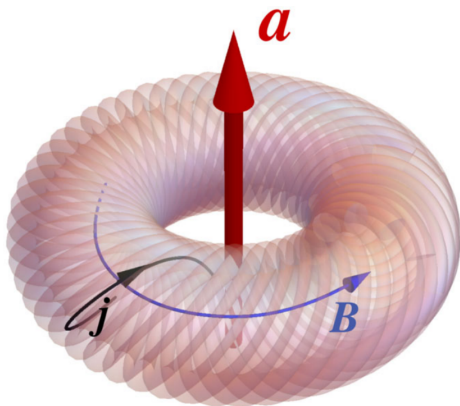
Санкт-Петербург  
2023 г.

# Анапольный момент

$$\vec{a} = -\pi \int r^2 \vec{j}(\vec{r}) d^3 r$$

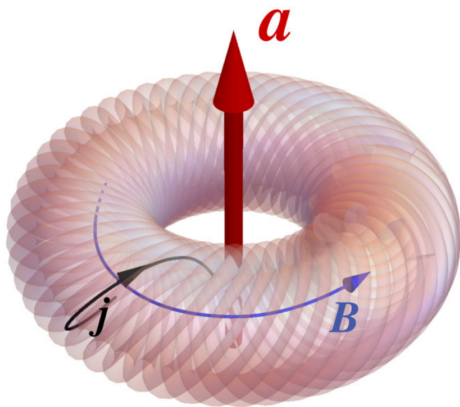
# Анапольный момент

$$\vec{a} = -\pi \int r^2 \vec{j}(\vec{r}) d^3r$$



# Анапольный момент

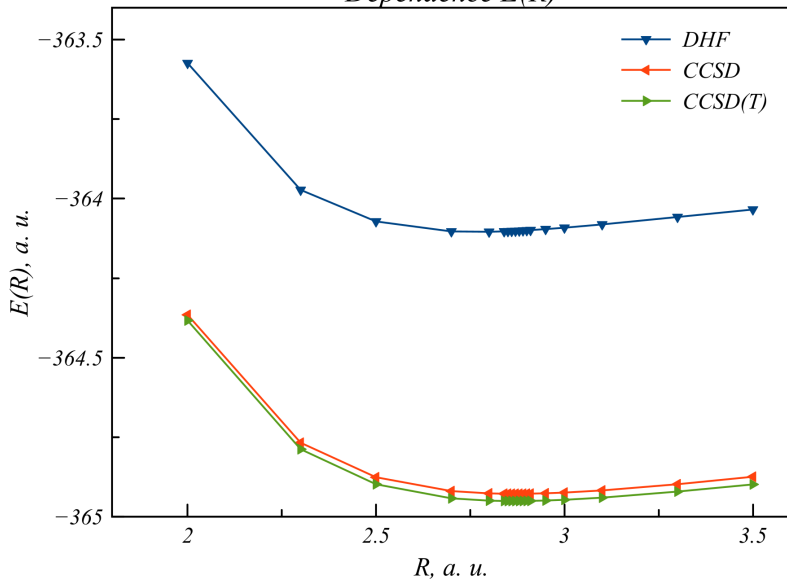
$$\vec{a} = -\pi \int r^2 \vec{j}(\vec{r}) d^3r$$



$$S \sim k_a W_a$$

# Кривые потенциальных энергий

Dependence  $E(R)$



# Сравнение с экспериментами

Таблица: Равновесные расстояния

	$R_e, \text{Å}$
<i>Данный расчёт</i>	1.517
<i>K.P. Huber et al. (1979)</i>	1.519
<i>E.A. Colbourn et al. (1978)</i>	1.512

# Сравнение с экспериментами

Таблица: Равновесные расстояния

	$R_e, \text{Å}$
Данный расчёт	1.517
<i>K.P. Huber et al. (1979)</i>	1.519
<i>E.A. Colbourn et al. (1978)</i>	1.512

Таблица: Колебательные частоты

	$\omega_e, \text{cm}^{-1}$
Данный расчёт	1144
<i>E.A. Colbourn et al. (1978)</i>	1120
<i>S.N. Ghosh et al. (1979)</i>	1164

# Коэффициент $W_a$

Таблица:  $W_a$  на разных уровнях точности (значения приведены в Гц).  
Терм основного состояния  $^2\Sigma_{1/2}$ ,  $R = 2.9$  а. е.

Базис	2z (9)	2z (15)	3z (9)	3z (15)	4z (21)	ext4z (21)
CCSD	10.00	10.55	10.87	11.54	13.67	14.17
CCSD(T)	10.19	10.72	11.09	11.74	13.86	14.37
CCSDT(Q)	10.00	10.51	10.91	11.55	—	—
$\Delta W_a$	-0.20	-0.21	-0.18	-0.19	—	—



# Коэффициент $W_a$

Таблица:  $W_a$  на разных уровнях точности (значения приведены в  $\Gamma_u$ ).  
Терм основного состояния  $^2\Sigma_{1/2}$ ,  $R = 2.9$  а. е.

Базис	2z (9)	2z (15)	3z (9)	3z (15)	4z (21)	ext4z (21)
CCSD	10.00	10.55	10.87	11.54	13.67	14.17
CCSD(T)	10.19	10.72	11.09	11.74	13.86	14.37
CCSDT(Q)	10.00	10.51	10.91	11.55	—	—
$\Delta W_a$	-0.20	-0.21	-0.18	-0.19	—	—

$$W_a = (14.2 \pm 0.6) \Gamma_u, \quad \epsilon \approx 3.9 \%$$

# СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

## Контакты:

- телефон: +7 (921) 596-68-72;
- почта: p.d.turchenko@vk.com;
- VK: <https://vk.com/p.d.turchenko>;
- TG: [https://t.me/petr\\_turchenko](https://t.me/petr_turchenko).

# Dependence $E(R)$

