

Коэффициент усиления анапольного момента в молекуле SiO^+

ТУРЧЕНКО Петр Дмитриевич

X Всероссийский с международным участием
Молодежный научный форум Open Science

Научный руководитель:
к.ф.-м.н., с.н.с. ЛКХ ОПР НИЦ КИ – ПИЯФ,
доц. каф. квантовой механики СПбГУ,
Скрипников Леонид Владимирович



Гатчина

15–17 ноября 2023 г.

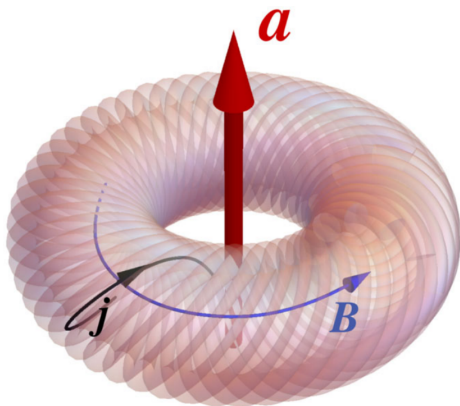


Анапольный момент

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

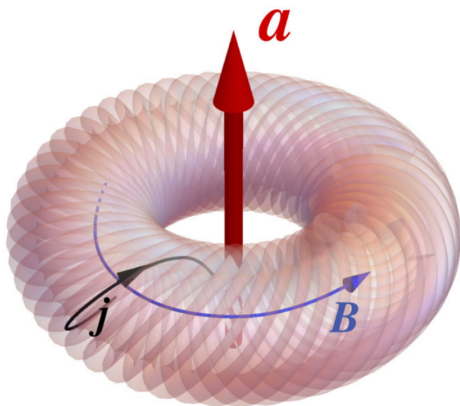
Анапольный момент

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



Анапольный момент

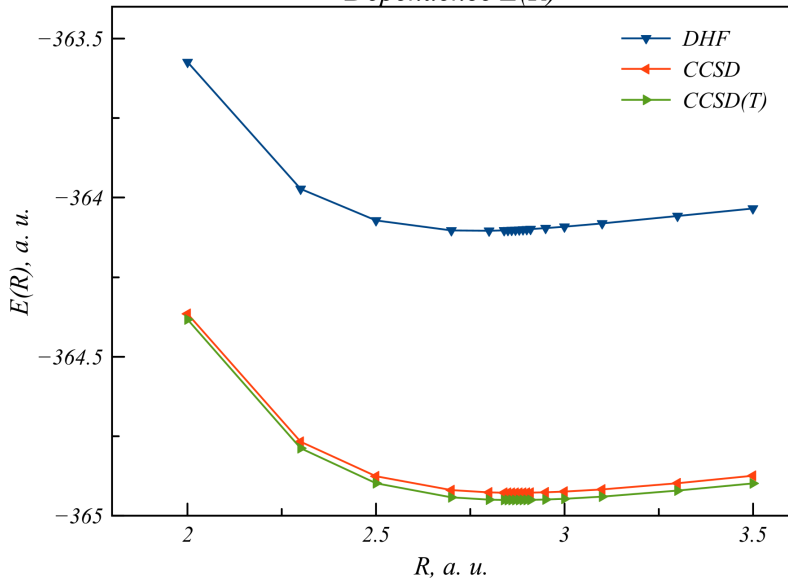
$$\vec{a} = -\pi \int r^2 \vec{j}(\vec{r}) d^3r$$



$$S \sim k_a W_a$$

Кривые потенциальных энергий (QZ , $R_e = 1.517 \text{ \AA}$)

Dependence $E(R)$



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. у.

Базис	2z (9)	2z (15)	3z (9)	3z (15)	4z (21)	QZ (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	—	—
ΔW_a	-0.20	-0.21	-0.18	-0.19	—	—

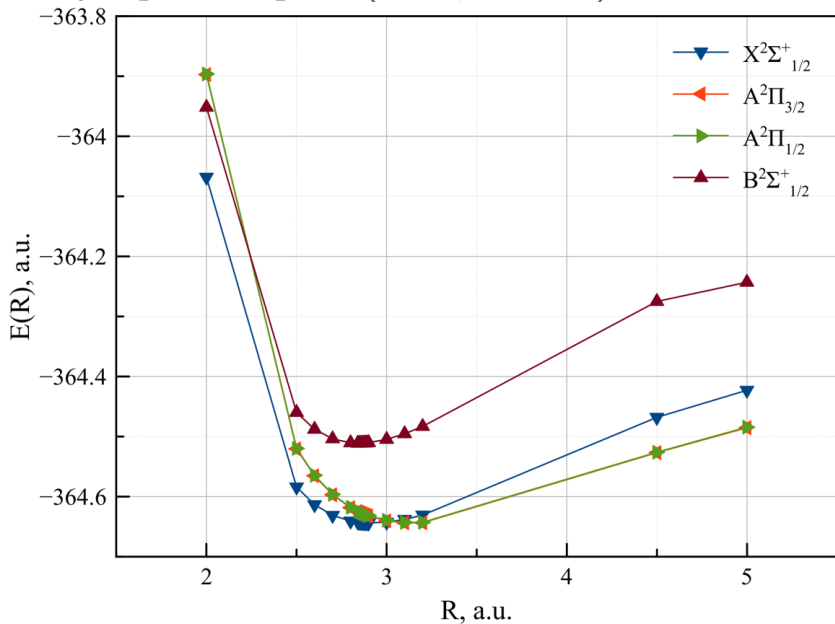
Коэффициент W_a

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

Базис	2z (9)	2z (15)	3z (9)	3z (15)	4z (21)	QZ (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	—	—
ΔW_a	-0.20	-0.21	-0.18	-0.19	—	—

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

Молекулярные термы (*ae3z*, *CCSD*)



Заключение

- Сокращение ошибки W_a

Заключение

- Сокращение ошибки W_a
- Уточнение спектроскопических констант

Заключение

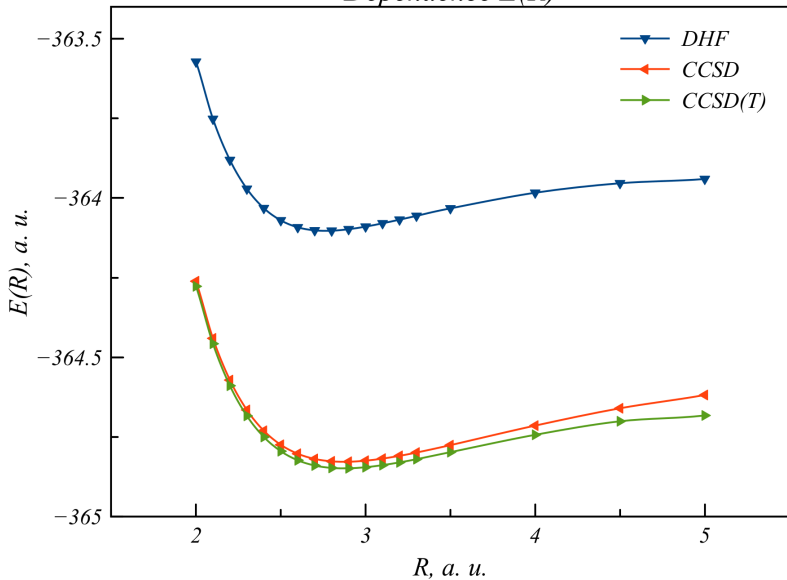
- Сокращение ошибки W_a
- Уточнение спектроскопических констант
- Учёт Брейтовских поправок

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

Контакты:

- Телефон: +7 (921) 596-68-72
- E-mail: p.d.turchenko@vk.com
- VK: <https://vk.com/p.d.turchenko>
- TG: https://t.me/petr_turchenko

Dependence $E(R)$



Сравнение с экспериментами

Таблица: Равновесные расстояния

	$R_e, \text{Å}$
<i>Данный расчёт</i>	1.517
<i>К.Р. Huber et al. (1979)</i>	1.519
<i>Е.А. 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

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