

**Теоретическое исследование электронной структуры молекул молекул,  
содержащих лантаноиды**

*П.А. Хадеева<sup>1</sup>, В.М. Шахова<sup>1</sup>, Ю.В. Ломачук<sup>1</sup>, Н.С. Мосягин<sup>1</sup>, А.В. Титов<sup>1</sup>*

E-mail: poliakhadeyeva@gmail.com

<sup>1</sup>*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Химические соединения, содержащие в своем составе f- и d-элементы, обладают рядом исключительных свойств, из-за которых они представляют широкий практический интерес. Однако теоретическое исследование их электронной структуры связано с рядом трудностей. Как правило, расчеты требуют одновременного учета релятивистских и корреляционных эффектов на самом высоком уровне. Связано это с тем, что поливалентные тяжелые d- и f-элементы часто имеют ярко выраженный мультиконфигурационный характер и высокую плотность низколежащих электронных состояний, для корректного описания которых требуется очень высокая точность.

Объектами исследования выбраны молекулы  $\text{YbHal}_n$  ( $\text{Hal} = \text{F}, \text{Cl}, n = 2, 3$ ). Атом иттербия находится в двух разных валентных состояниях: +2 и +3. В первом случае 4f-оболочка полностью закрыта, а во втором – открыта.

Для проведения теоретического исследования данных молекул, в работе был использован метод релятивистского псевдопотенциала остова, который позволяет кардинально сократить вычислительные затраты путем уменьшения числа электронов, явно участвующих в расчете. На следующем этапе исследования проводится восстановление волновых функций в области ядра [1] для вычисления различных свойств, сконцентрированных в остоковой области тяжелого атома.

В качестве критерия проверки корректности воспроизведения электронной плотности был выбран химический сдвиг (ХС) линий рентгеновского эмиссионного спектра (РЭС) атома [2]. Данное свойство является характеристическим для каждого атома, а также обладает высокой чувствительностью к изменениям электронной структуры в остове.

Для данных молекул были вычислены структурные параметры, а именно длины связей  $\text{Yb-Hal}$  и углы между  $\text{Hal-Yb-Hal}$ . Также проведен расчет химических сдвигов линий  $K_{\alpha 1}$  и  $K_{\alpha 2}$  – линий РЭС в молекуле  $\text{YbHal}_3$  относительно молекулы  $\text{YbHal}_2$  и изучена зависимость значения ХС от размера базисного набора на галогене.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 20-13-00225*

1. Titov A.V. et al. Recent advances in the theory of chemical and physical systems // Springer, Dordrecht. 2006. С. 253-283.
2. Lomachuk Y.V., Titov A.V. Method for evaluating chemical shifts of x-ray emission lines in molecules and solids// PRA. 2013. V. 88, 6. p. 062511.