

Саегаев А.Р.¹, Тупицын И.И.¹, Усов Д.П.¹

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ РАСЧЁТЫ АДИАБАТИЧЕСКИХ КРИВЫХ ГИДРИДОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

В данной работе представлены результаты релятивистских расчётов основных состояний гидридов щелочных металлов. Конфигурация атомов щелочных металлов содержит одну незамкнутую валентную s -оболочку. Исследована зависимость длины связи и собственного дипольного момента молекул LiH, NaH, KH, RbH, CsH и FrH от атомного номера металла.

Релятивистские расчеты молекулярных орбиталей были выполнены методом Дирака-Фока (ДФ). Для учета корреляционных эффектов был использован релятивистский метод связанных кластеров с учетом однократных, двукратных и приближенным образом трехкратных кластерных амплитуд (CCSD(T)). Расчеты были выполнены с использованием пакета программ DIRAC [1], где реализованы методы ДФ и CCSD(T).

Значения равновесных межъядерных расстояний, полученные методом CCSD(T), хорошо соотносятся с экспериментальными значениями [2, 3]. Демонстрировано увеличение корреляционных вкладов в энергию молекулы с ростом числа электронов. Значения дипольных моментов, полученные методом CCSD(T), близки к значениям, полученным тем же методом, в других работах [4, 5, 6].

Ключевые слова: гидрид щелочного металла, равновесное межъядерное расстояние, дипольный момент.

Список литературы

1. Saue T. et al. The DIRAC code for relativistic molecular calculations // The Journal of chemical physics. – 2020. – Т. 152. – № 20.
2. K.P. Huber и G. Herzberg. “Constants of diatomic molecules”. В: Molecular Spectra and Molecular Structure: IV. Constants of Diatomic Molecules. Boston, MA: Springer US, 1979, с. 8–689.
3. Giroud M., Nedelec O. Spectroscopy of the nah, nad, kh, and kd $x 1\sigma^+$ ground state by laser excited fluorescence in a high frequency discharge // The Journal of Chemical Physics. – 1980. – Т. 73. – № 9. – С. 4151–4155.
4. Avramopoulos A., Papadopoulos M.G. Trends in the electronic and vibrational contributions to the dipole moment, polarizabilities, and first and second hyperpolarizabilities of the hydrides of Li, Na and K // Molecular Physics. – 2002. – Т. 100. – № 6. – С. 821–834.
5. Urban M., Sadlej A.J. A study of the accuracy of the CCSD+ T (CCSD) approximation. Electric properties of KH and RbH // The Journal of chemical physics. – 1991. – Т. 95. – №. 7. – С. 5490–5491.
6. Deb N. et al. Blackbody-mediated rotational laser cooling schemes in MgH⁺, DCl⁺, HCl⁺, LiH and CsH // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2013. – Т. 15. – №. 34. – С. 14270–14281.

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Россия, 199034, Санкт-Петербург, Университетская набережная, 7/9.