

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КАТИОНА
МОНООКСИДА КРЕМНИЯ

Турченко П.Д. (СПбГУ, ПИЯФ)

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, доцент

Скрипников Л.В. (СПбГУ, ПИЯФ)

Введение. В настоящее время международной коллаборацией учёных на базе Массачусетского технологического института готовится эксперимент по обнаружению эффектов, нарушающих пространственную чётность в катионе $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$ [1]. Постановка эксперимента нуждается в теоретической поддержке, заключающейся в описании электронной структуры этой молекулы. Этой задаче был посвящён ряд работ [2—8], однако среди них не нашлось места применению метода связанных кластеров, являющемуся сегодня эталоном точности.

Основная часть. Многоэлектронная задача решалась в релятивистском случае и состояла из следующих этапов:

- 1) Описание электронных термов в адиабатическом и диабатическом представлениях при помощи метода связанных кластеров, учитывающих высокие степени электронных возбуждений.
- 2) Уточнение колебательных и вращательных спектров низкоэнергетических электронных состояний при помощи численных методов решения радиального уравнения Шрёдингера на сетке.
- 3) Усреднение матричного элемента слабого взаимодействия по волновым функциям первых нескольких колебательных и вращательных состояний.
- 4) Расчёт спектроскопических констант, таких как электронные термы, гармонические частоты, ангармонические поправки и т. д.

Выводы. Описана электронная структура катиона монооксида кремния на современном уровне точности.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 24-12-00092 и «Базис» № 24-1-1-36-3.

Список использованных источников:

1. Karthein J., Udrescu S.M., Moroch. S.B., et al. Electroweak Nuclear Properties from Single Molecular Ions in a Penning Trap // Phys. Rev. Lett. – 2024. – № 133. – P. 033003.
2. Cai Z.-L., François J.P. Ab Initio Study of the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ States of the SiO^+ Cation Including the Effect of Core Correlation // Chem. Phys. – 1998. – № 234. – P. 59–68.
3. Cai Z.-L., François J.P. An Internally Contracted Multireference Configuration Interaction Analysis of the $\text{SiO}^+ B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ Transition Moment // Chem. Phys. Lett. – 1998. – № 282. P. 29–38.
4. Cai Z.-L., François J.P. Ab Initio Study of the Electronic Spectrum of the SiO^+ Cation // J. Mol. Spectrosc. – 1999. – № 197. – P. 12–18.
5. Chattopadhyaya S., Chattopadhyay A., Das K.K. Electronic Spectrum of SiO^+ : A Theoretical Study // J. Mol. Struct. (Theochem). – 2003. – № 639. – P. 177–185.
6. Shi D., Li W., Xing W., et al. MRCI Study on Electronic Spectrum of Several Low-Lying Electronic States of the SiO^+ Cation // Comput. Theor. Chem. – 2012. – № 980. – P. 73–84.
7. Li R., Yuan X., Liang G.-Y., et al. Laser Cooling of the SiO^+ Molecular Ion: A Theoretical Contribution // Chem. Phys. – 2019. – № 525. – P. 110412.
8. Li R., Liang G.-Y., Lin X.-H., et al. Explicitly Correlated Configuration Interaction Investigation on Low-Lying States of SiO^+ and SiO // Chin. Phys. B. – 2019. – № 28(4). – P. 043102.