



Международная научная конференция
студентов, аспирантов и молодых учёных

ЛОМОНОСОВ – 2024

Секция «Химия»

12–26 апреля 2024

Материалы конференции

lomonosov2024.chem.msu.ru



УДК 54
ББК 24я43
М34

Отв. ред.: Дзубан А.В.

М34 **Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2024», секция «Химия».** – М.: Издательство «Перо», 2024. – 57 МБ. [Электронное издание]. – Систем. требования: процессор x86 с тактовой частотой 500 МГц и выше; 512 Мб ОЗУ; Windows XP/7/8; видеокарта SVGA 1280x1024 High Color (32 bit). – Загл. с экрана.

ISBN 978-5-00244-410-6

ISBN 978-5-00244-410-6

УДК 54
ББК 24я43
© Авторы статей, 2024

**Квантово-химические исследования электронной структуры астрономически интересных молекул: NH₂, SO₂, OH₂, CN**

Паханьян И.М.¹, Лихарев А.С.¹, Дзюба К.О.², Лахмачев И.М.², Кондратенко В.А.², Горепекин М.А.², Казакова В.А.², Кашина А.В.², Косов Н.С.², Погодина Л.П.², Бормотова Е.А.¹

Студент, 6 курс специалитета

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

²Университетская гимназия Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: pakhanyan.I.M@gmail.com

В межзвёздном пространстве часто встречаются такие простейшие молекулы, как NH и SH, OH и CN. Один из предполагаемых механизмов образования первых трёх молекул – это атака атомом азота, серы или кислорода на молекулу водорода. В данном исследовании рассматриваются потенциальные поверхности, симулирующие такого рода сближения атакующего атома и исходной молекулы, и уход образовавшейся молекулы от атома водорода. Имея прецизионные *ab initio* данные о поверхности потенциальной энергии, можно будет рассчитать константы скорости реакции. Молекула CN является весьма распространённой молекулой во вселенной, и наблюдалась в атмосферах звёзд, в кометах и других объектах, и её дублетные состояния весьма хорошо исследованы – однако темновые квартетные состояния этой молекулы остаются неисследованными.

Так, целью данной работой представляется проведение высокоточных квантов химических расчётов потенциальных энергий (ПЭ) молекул NH₂, SO₂, OH₂, CN. Расчёты поверхностей ПЭ выполнялись при помощи пакета квантово-химических программ Molpro 2010 с базисом aug-cc-pVTZ. Хартри-фоковские молекулярные орбитали (МО) были оптимизированы методом самосогласованного поля в полном активном пространстве (CASSCF) с усреднением по спине. При этом, для трёхатомных молекул субвалентные электроны оставались на дважды занятых МО. Активное пространство подбиралось так, чтобы дальнейшее расширение мало влияло на исследуемые состояния в исследованной области геометрий. Оптимизированные в CASSCF волновые функции служили в качестве ссылочного пространства для дальнейшего учета динамической корреляции внутренне-контрактированным многоореференсным методом конфигурационного взаимодействия с учетом однократных и двухкратных возбуждений (ic-MRCISD). Были получены поверхности ПЭ, соответствующие первым состояниям каждой симметрии и мультиплетности для трёх атомных молекул, и кривые ПЭ для первых 12-ти квартетных возбуждённых состояний молекулы CN. Для исследованных состояний получены спектроскопические константы T_e , R_e и D_e .

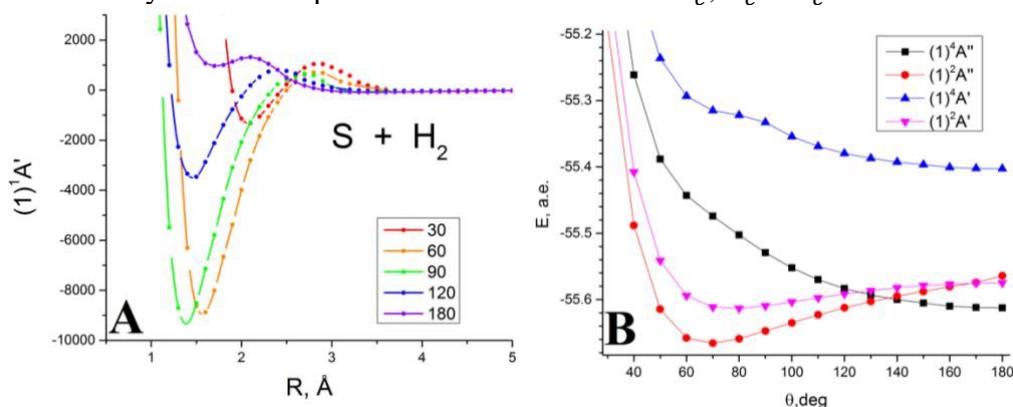


Рис. 1. **А** Потенциальные энергии (в cm^{-1}) сближения атома S к молекуле водорода под разными углами атаки, соответствующими реакции $S + H_2 \rightarrow SH + H$ для (суммарного) состояния трёхатомной системы $(1)^1 A'$; **В** Зависимость энергии молекулы NH₂ от угла N-H-N, при расстояниях N-N и N-H равными 1.2 и 0.74144 \AA , соответственно.

