

АННОТАЦИЯ НИР

Григоричевой Э.К.

«Теоретическое изучение вибронного взаимодействия в катион-радикале имидазола с использованием многоконфигурационного зависящего от времени метода Хартри (MCTDH)»

Неадиабатические процессы, подразумевающие ядерную динамику на поверхностях потенциальной энергии нескольких вибронно связанных состояний, широко распространены и представляют собой одну из нерешенных проблем современной молекулярной физики и химии.

Для выхода за рамки приближения Борна–Оппенгеймера может быть использована теория вибронного связывания; потенциал которой в полной мере раскрывается в сочетании с зависящим от времени многоконфигурационным методом Хартри (MCTDH). Такой подход является на сегодня наиболее эффективным для изучения и интерпретации молекулярной динамики, так как обеспечивает очень компактное описание волнового пакета, что позволяет рассматривать системы с большим числом степеней свободы, используя относительно небольшие вычислительные ресурсы.

Возможности метода MCTDH по изучению вибронного взаимодействия спектрах ионизации пиридина были продемонстрированы в недавно опубликованной работе [J.Chem.Phys., 2020, Vol. 153, P. 164307], в то время как вычислительные аспекты и методология проведенных расчётов были представлены на прошедшей в ИГУ конференции DYSC-2020 [J.Phys.Conf.Ser., 2021, Vol.1847, P.012053].

Недавно нашими коллегами (D.M.P. Holland et al.) в синхротронной лаборатории MAX IV был получен фотоэлектронный спектр имидазола, позволяющий предположить наличие вибронного связывания в низколежащих состояниях образующегося при ионизации катион-радикала. Поскольку молекула имидазола играет чрезвычайно важную роль в биологии, понимание данного вопроса очень важно, в частности, для правильной интерпретации многих явлений и процессов в живой природе. Данное обстоятельство обосновывает актуальность и значимость заявляемого проекта по теоретическому изучению в рамках метода MCTDH ядерной динамики, связанной с тремя низшими состояниями катион-радикала имидазола.