

АННОТИРОВАННЫЙ ОТЧЕТ
о результатах НИР по гранту за 2021 год
Конкурс 2021 года на соискание грантов
для поддержки научно-исследовательской работы
аспирантов и молодых сотрудников ИГУ.

Направление *Химия и химические технологии* Шифр гранта 091-21-309

1. Наименование НИР по гранту

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

2. Структурное подразделение (кафедра, лаборатория)

Лаборатория квантовохимического моделирования молекулярных систем

3. Исполнитель НИР: *Григоричева Эмма Константиновна*

4. Координаты исполнителя НИР: *emma@cc.isu.ru*

5. Ожидаемые результаты в соответствии с заявленным планом работы:

целью проекта было теоретическое изучение в рамках метода MCTDH ядерной динамики, связанной с тремя низшими состояниями катион-радикала имидазола

6. Основные полученные научные результаты:

показано наличие вибронного связывания возбужденных состояний A и B катион-радикала имидазола при участии основного состояния X. Построена соответствующая модель, позволившая охарактеризовать параметры взаимодействия и найти минимальные энергии конических пересечений поверхностей потенциальной энергии. Проведенные с использованием модели динамические расчеты в рамках зависящего от времени метода Хартри позволили на хорошем качественном уровне воспроизвести спектр ионизации имидазола в рассматриваемой области энергий

7. Предполагаемое использование результатов, в том числе в учебном процессе:

полученные результаты станут основой для статьи по исследованию ядерной динамики низших состояний катион-радикала имидазола

8. Перечень публикаций по результатам работы (статьи, доклады) с приложением оттисков или рукописей, направленных в печать:

Григоричева Э.К., Скитневская А.Д., Трофимов А.Б. / Изучение вибронного взаимодействия электронных состояний катион-радикала имидазола с использованием многоконфигурационного зависящего от времени метода Хартри (MCTDH) // Современная химическая физика, XXXIII Симпозиум, Сборник тезисов — с.70

Исполнитель НИР по гранту:

Григоричева Э.К.