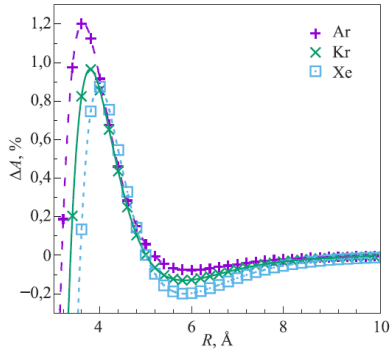
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СДВИГА КОНСТАНТЫ СТВ АТОМА LI В МАТРИЦАХ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Тараканова А.С.[(1)], *Каморзин Б.Б.*[(2)], *Клещина Н.Н.*[(1)]
[(1)] Московский государственный университет
119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1
[(2)] Сколковский институт науки и технологий
121205, г. Москва, Большой бул., д. 30, стр. 1

Одной из задач изучения матрично-изолированных атомов является определение геометрии сайтов захвата, а также сопоставление их со спектральными полосами. Спектры ЭПР могут быть более информативны, чем оптические, так как уширение полосы в них, как правило, существенно меньше, чем в оптических спектрах различных сайтов захвата.

В настоящей работе на примере атома лития, являющимся самым простым примером матрично-изолированного металла, была предложена методика моделирования ЭПР спектров атома Li в кристаллах инертных газов Ar, Kr и Xe (Li@RG) в рамках модели, основанной на анализе выпуклых оболочек, позволяющей определять стабильные сайты захвата и их геометрию. Зависимость изотропной компоненты тензора СТВ *A* от расстояния в комплексах Li–RG была рассчитана в программном пакете ORCA с матрицами нерелаксированной плотности уровня CCSD в аддитивном приближении (см. рисунок).



Сдвиг константы *A* от расстояния в комплексах Li–RG

В системах Li@RG устойчивыми являются четыре сайта захвата: внедрение атома Li в октаэдрическую полость ГЦК ячейки Oh, вакансия замещения SS, тетраэдрическая TV и октаэдрическая HV вакансии. В ходе работы, учитывая особенности спектров, полученных при различном приготовлении образцов в трех разных матрицах, было получено, что для наиболее устойчивых сайтов захвата сдвиги константы *A* в ЭПР спектрах составляют: 11,4% для вакансии SS в системе Li@Ar, 8,9% для вакансии SS и 0(3)% для сайта IS(Oh) в системе Li@Kr и 6,5% для вакансии SS в системе Li@Xe.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 17-13-01466).