

# ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕКТРАЛЬНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТЯЖЁЛЫХ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ В БЕЛОРУССКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ И ЛАТВИЙСКОМ УНИВЕРСИТЕТАХ

*А.А. Минько, М.Б. Шундалов*  
*Белорусский государственный университет*  
*e-mail: [minko@bsu.by](mailto:minko@bsu.by)*

В последнее время полярные двухатомные молекулы, в состав которых входят атомы различных щелочных металлов (KRb, KCs, RbCs и др.), являются предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований. Это обусловлено возможным использованием холодных и ультрахолодных (ниже мкК) полярных двухатомных молекул при разработке квантовых компьютеров, для проверки фундаментальной теории электрического дипольного момента электрона, для создания наноструктурированных слоёв, обладающих определёнными свойствами, для определения возможностей когерентного контроля химических реакций и для других целей.

Наряду с полярными двухатомными молекулами, в состав которых входят атомы только щелочных металлов, перспективными объектами для синтеза ультрахолодного квантового вещества являются полярные двухатомные молекулы, состоящие из атомов одного из щелочных металлов и одного из переходных металлов (например, Yb). Такие соединения обладают специфической формой потенциальной кривой в некоторых возбуждённых электронных состояниях, что позволяет эффективно управлять переводом таких молекул из возбуждённых ровибронных состояний в основное. Кроме этого, некоторые из таких атомных пар наряду с постоянным электрическим дипольным моментом могут обладать также и постоянным магнитным дипольным моментом, что позволяет эффективно управлять молекулярным квантовым веществом при помощи не только внешнего электрического, но и магнитного полей.

Одной из возможностей получения молекулярного квантового вещества с контролируемыми свойствами является перевод полярных двухатомных молекул в основное состояние с минимальной энергией, в котором вращательное и колебательное движения «заморожены», за счёт первоначального оптического возбуждения в вышележащие ровибронные состояния. В этом случае для высокой эффективности процессов возбуждения и последующей релаксации молекулярной системы требуется знание точных функций потенциальной энергии комбинирующих электронных состояний, а также спектрально-энергетических и динамических характеристик их колебательно-вращательных подсистем. Построение точных «экспериментальных» термов выполняется на основе анализа и интерпретации ровибронных спектров высокого разрешения, и во многом основывается на квантово-химических *ab initio* потенциальных кривых. Кроме этого, *ab initio* расчёт

системы электронных термов позволяет с высокой точностью вычислять весь необходимый спектр энергетических, спектральных и других характеристик ровибронных состояний.

Сотрудники Лазерного центра Латвийского университета (проф. Р. Фербер и д-р М. Таманис) имеют многолетний опыт исследований спектральных характеристик как отдельных атомов щелочных металлов, так и тяжёлых двухатомных молекул, в состав которых входят такие атомы. Сотрудники кафедры физической оптики физического факультета БГУ (проф. А.А. Минько, доценты М.Б. Шундалов и Г.А. Пицевич), со своей стороны, имеют большой опыт разработки теоретических методов для расчёта структурных, энергетических и спектральных характеристик сложных молекулярных систем. Результаты таких расчётов можно с высокой эффективностью применять при анализе и интерпретации экспериментальных спектров.

Объединение усилий двух научных групп было реализовано при выполнении совместного белорусско-латвийского проекта «Исследование спектрально-энергетических характеристик полярных двухатомных молекул для моделирования и создания наноструктур» в 2014–2016 гг., осуществлённого при поддержке Государственного комитета по науке и технологиям Республики Беларусь (№ Ф14ЛАТ-060) и Министерства образования и науки Латвийской Республики (Nr. LVBY/2015/3).

В результате выполнения проекта с высокой точностью определены спектральные, энергетические и динамические характеристики основного и нижних возбуждённых состояний молекул KRb и YbRb. Так, для терма основного состояния молекулы KRb отклонение рассчитанной энергии диссоциации от экспериментально измеренной величины составляет всего 0.1%. Это на порядок точнее, чем лучший из выполненных другими авторами квантово-химических расчётов. По результатам исследований опубликованы 2 статьи в международных научных журналах, сделано 9 докладов на научных конференциях различного уровня; к печати подготовлены ещё 2 статьи, приняты 2 доклада.

В рамках продолжения сотрудничества с Лазерным центром Латвийского университета начаты аналогичные исследования молекулы YbCs, которая представляется перспективной для решения упомянутых выше научно-практических задач. Подготовлены предложения в новый совместный белорусско-латвийский проект (БГУ – Латвийский университет) на 2017 – 2019 гг. В рамках указанного проекта кроме определения спектрально-энергетических характеристик молекулы YbCs и других аналогичных объектов, планируется проводить исследования, связанные с возможностями использования двухатомных молекул, в состав которых входят атомы щелочных металлов, при создании наноструктурированных слоёв для их практического применения в нано- и микроэлектронике.