**Модификация метода МКССП для моделирования электронных состояний**

**в присутствии сильных магнитных полей**

***Бодунов А.А.,1 Озеров Г.К.2***

*Аспирант, 2 года обучения*

*1Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*2Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*

*E–mail:* [*artembodunov@mail.ru*](mailto:artembodunov@mail.ru)

Единственным способом исследования звезд и других астрофизических объектов, их строения и протекающих внутри них процессов является изучение их спектров. Интересными примерами таких небесных тел являются звезды “белые карлики”. Для понимания устройства жизненного цикла звезд важно изучение их химического состава на разных этапах развития. В литературе приведен качественны анализ химического состава белых карликов [1]. Сообщается, что в их составе помимо легких водорода и гелия также содержится ряд элементов второго периода [2]. Лабораторный вариант получения похожих спектров на данный момент представляется невозможным, поскольку в данных астрофизических системах на атомы действуют очень сильные магнитные поля, которые не возможно получить в лаборатории на современном уровне развития науки.

Данная работа продолжает исследование моделирования электронных структуры атомов второго периода в сильных магнитных полях. Наиболее точным на сегодняшний день подходом является способ, разработанный в группе проф. Стопкович. Данный метод модифицирует стандартные алгоритмы квантовой химии путем введения в одночастичную часть электронного гамильтониана вклады, явно зависящие от спина и орбитального момента электрона. Таим образом матрицы, с которыми приходится работать уже явно являются не просто самосопряженными, но также комплексными, а спинорбитали для электронов с разным значением спина уже не могут иметь одинаковые пространственные части. Все это значительно замедляет скорость расчета. В литературе приведены реализации такого подхода на уровне методов связанных кластеров [3–4] и его варианта EOM-CC для расчета возбужденных состояний. Данный метод позволяет учитывать эффекты динамической электронной корреляции и получать хорошее согласие для элементов I и VII группы периодической системы, где хорошо работает метод EOM-CC. Для систем с полузаполненными электронными оболочками этот метод применим хуже.

Ранее нами был предложен способ расчета электронной структуры в варианте методов UHF, UMP2 и метод полного КВ в рамках аналогичного формализма [5]. В данной работе рассмотрен метод МКССП. Проведен расчет элементов II периода; изучена картина изменения орбитальных энергия и состава орбиталей в случае последовательного увеличения значения внешнего магнитного до экстремальных значений. Отдельно рассчитаны энергетические вклады в различные компоненты магнитных взаимодействий и выявлены общие закономерности в зависимостях энергий электронных уровней от внешнего магнитного поля от параметров изучаемой системы.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-23-01180).*

**Литература**

1. Kepler S. O., Koester D., Ourique G. A white dwarf with an oxygen atmosphere // Science. 2016. Vol. 352. P. 67-69.

2. Dufour P. et al. White dwarf stars with carbon atmospheres // Nature. 2007. Vol. 450. P. 522-524.

3. Stopkowicz S. et al. Coupled-cluster theory for atoms and molecules in strong magnetic fields // The Journal of Chemical Physics. 2015. Vol. 143. P. 074110.

4. Hampe F., Stopkowicz S. Equation-of-motion coupled-cluster methods for atoms and molecules in strong magnetic fields // The Journal of Chemical Physics. 2017. Vol. 146. P. 154105.

5. Бодунов А.А., Озеров Г.К. //Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2022», секция «Химия». 2022.