

НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

УДК 539.194

**ВОЛНООБРАЗНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ РИДБЕРГОВСКИХ
 Σ^+ -СОСТОЯНИЙ ЭКСИПЛЕКСНЫХ МОЛЕКУЛ Me–Rg:
НЕЭМПИРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ Na–He****Сергей Владимирович Козлов, Елена Александровна Пазюк,
Андрей Владиславович Столяров**¹ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия**Автор, ответственный за переписку:** Елена Александровна Пазюк,
pazyuk@phys.chem.msu.ru

Аннотация. Многоссылочным методом конфигурационного взаимодействия с использованием однократных и двукратных возбуждений (MR–CISD), *I*-независимого остожно-поляризационного потенциала (CPP) и насыщенных диффузными функциями полноэлектронных cc-pVQZ и aug-cc-pV5Z базисных наборов для атомов Na и He соответственно выполнены нерелятивистские расчеты кривых потенциальной энергии и собственных дипольных моментов для основного и возбужденных состояний эксиплексной молекулы NaHe, вплоть до энергии Na(6^2S)-состояния. Полученные в широком интервале межъядерных расстояний R [1.7, 20.0] (Å) *ab initio* результаты количественно подтвердили волнообразное поведение межатомных потенциалов, предсказанное ранее в рамках теории неупругого рассеяния. Установлено, что при больших значениях R функции потенциальной энергии и дипольных моментов возбужденных (3, 6, 10) $^2\Sigma^+$ -состояний молекулы NaHe, сходящихся на диссоциационном пределе к Na ($n = 4, 5, 6^2S$) + He(2^2S) атомам, количественно модулируются узловой структурой волновой функции ридберговского ($n > 3$) *s*-электрона атома Na при его взаимодействии с удаленным атомом He.

Ключевые слова: ридберговские состояния, псевдопотенциал Ферми, неэмпирические расчеты, электронная структура молекул

DOI: 10.55959/MSU0579-9384-2-2024-65-4-352-360

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-13-00207).

Для цитирования: Козлов С.В., Пазюк Е.А., Столяров А.В. Волнообразные потенциалы ридберговских Σ^+ -состояний эксиплексных молекул Me–Rg: неэмпирическое моделирование Na–He // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2024. Т. 65. № 4. С. 352–360.

ORIGINAL ARTICLE

UNDULATING POTENTIALS OF RYDBERG Σ^+ -STATES OF Me–Rg
MOLECULES: NON-EMPIRICAL TREATMENT OF Na–He EXCIPLEX

Sergey V. Kozlov, Elena A. Pazyuk, Andrey V. Stoloyarov

Lomonosov Moscow State University, Chemistry Department, Moscow, Russia

Corresponding Author: Elena A. Pazyuk, pazyuk@phys.chem.msu.ru

Abstract. The multi-reference configuration interaction method based on single and double excitations (MR–CISD), l -independent core polarization potential (CPP) and diffuse function-saturated cc-pVQZ and aug-cc-pV5Z basis sets for Na and He atoms, respectively, have been used to perform non-relativistic calculations of potential energy curves and permanent dipole moment functions for the ground and excited electronic states of the exciplex Na–He molecule up to the Na(6^2S) state. The *ab initio* results obtained in a wide range of internuclear distances R [1.7, 20.0] (Å) have quantitatively claimed the undulating behavior of interatomic potentials, predicted within the framework of the inelastic scattering theory. It has been established that at large R the interatomic potentials and dipole moments of highly excited $(3,6,10)^2\Sigma^+$ states, converging to Na ($n = 4, 5, 6^2S$)+He(2^2S) atomic limits, are modulated by the nodal structure of the radial Rydberg wave function ($n > 3$) s -electron of Na atom during its scattering on the remote He atom.

Keywords: Rydberg states, Fermi pseudopotential, *ab initio* calculations, electronic structure of molecules.

For citation: Kozlov S.V., Pazyuk E.A., Stoloyarov A.V. Undulating Potentials of Rydberg Σ^+ -States of Me–Rg Molecules: Non-Empirical Treatment of Na–He Exciplex // Vestn. Mosk. un-ta. Ser. 2. Chemistry. 2024. T. 65. № 4. S. 352–360.

Многолетние спектроскопические исследования высоковозбужденных ридберговских электронных состояний изолированных атомов и молекул оказали существенное влияние на развитие молекулярной спектроскопии и химии высоких энергий [1]. Прорывные достижения последних десятилетий в области охлаждения и улавливания (удержания) атомов и молекул при сверхнизких температурах позволили с уникальной точностью и детализацией исследовать коллективные квантовые процессы в слабосвязанных атомно-молекулярных системах (конденсатах Бозе – Эйнштейна) с использованием ридберговских электронных состояний в качестве микронзонда [2, 3].

Появление высокоэффективных низкотемпературных атомных ловушек (atomic traps) дало возможность использовать процессы упругого и неупругого рассеяния атомных частиц в широком диапазоне энергий бинарных и многочастичных столкновений [4] для получения информации о коллективном устройстве квантового мира атомно-молекулярных ансамблей, что окончательно сместило фокус как фундаментальных, так и прикладных исследований, на холодные и ульт-

тра холодные атомно-молекулярные столкновения [5].

Псевдопотенциал Ферми V_F , заданный уравнением [6]:

$$V_F = V_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (1)$$

где $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ – дельта-функция радиальной координаты ридберговского электрона (\mathbf{r}) и межатомного расстояния (\mathbf{R}), впервые был использован в теории квантовых столкновений ридберговских электронов в двухатомных молекулах, когда было показано, что широко используемый формализм для описания уширения и сдвига ридберговских линий атомов [7–9] может быть с успехом использован также для построения реалистичных борн-оппенгеймеровских (БО) кривых потенциальной энергии молекул, хотя и на очень больших межатомных расстояниях [10]. В предложенной авторами двухатомной модели [11] предполагается, что если один из атомов молекулы, находится в высоковозбужденном ридберговском состоянии, то на его энергетический спектр будет неизбежно влиять второй атом (находящийся в своем основном электронном состоянии), который удален на расстояние R

от первого атома. В приложении к эксиплексной молекуле NaHe, БО-потенциалы ($U_{nl\Lambda}^{BO}$) ее высоко возбужденных электронных состояний могут быть выражены так:

$$U_{nl\Lambda}^{BO}(R) = E_{nl}^{\text{Na}} + 2\pi a_s \left| \Phi_{nl\Lambda}^{\text{Na}}(R) \right|^2, \quad (2)$$

где E_{nl}^{Na} – энергия атома Na в состоянии nl , a_s – длина рассеяния ридберговского s -электрона при нулевой энергии столкновений с атомом He, $\Phi_{nl\Lambda}^{\text{Na}}$ – радиальная волновая функция ридберговского электрона атома Na.

Таким образом, молекулярный сдвиг ридберговских состояний, задаваемый уравнением (2), предлагает моделировать потенциальную энергию двухатомной молекулы через квантомеханическую плотность вероятности ридберговского электрона, т.е. через квадрат модуля его радиальной волновой функции в зависимости от положения возмущающего атома. Выражение (2) означает, что модельный БО-потенциал должен изменяться волнообразно в зависимости от величины R , следуя конгруэнтно осцилляциям волновой функции ридберговского электрона [12]. Более того, если длина рассеивания этого электрона на втором атоме окажется отрицательной ($a_s < 0$), то соответствующий межатомный потенциал будет обладать неглубокими минимумами, локализованными на больших расстояниях R , причем эти минимумы могут поддерживать связанные колебательные уровни энергии.

Следовательно, эффективные межатомные потенциалы, возникающие в результате рассеяния s -волны ридберговского электрона на основном состоянии поляризованного атома в зависимости от межъядерного расстояния должны иметь две характерные особенности: волнообразное поведение кривой потенциальной энергии и наличие в ней связанных колебательно-вращательных уровней энергии, локализованных на очень больших расстояниях [13]. Принимая во внимание тот факт, что энергия связывания этих термов ожидается значительно меньшей, чем 1 см^{-1} , то обнаружены они могут быть только спектральными методами в условиях ультранизких температур.

Почти через десять лет после предсказания сверхдальнодействующие ридберговские молекулы были действительно получены экспериментально в виде ультрахолодного ансамбля, состоящего из атомов рубидия, в котором часть атомов была возбуждена в Rb(35s)-состоянии [14]. Двухступенчатое лазерное возбуждение было использовано для фотоас-

социации ультрахолодных атомов в ультрадлинных Rb(5s)---Rb(35s) квазимолекулы, в которых удалось экспериментально наблюдать оптические переходы между несколькими слабосвязанными колебательными уровнями. Последующие лазерно-индуцированные эксперименты позволили синтезировать сверхдальнодействующие ридберговские молекулы в различных начальных состояниях атомного углового момента, включая так называемые «трилобитные» ридберговские состояния [15].

Очевидно, что необычное для традиционных молекул волнообразное поведение кривых потенциальной энергии на больших межатомных расстояниях не может быть особенностью исключительно модельных представлений их электронного строения, а должно подтверждаться высокоточными расчетами электронной структуры из первых принципов [16].

Цель настоящей работы состояла в прямом квантово-химическом подтверждении волнообразного (в виде затухающих осцилляций) поведения межатомных потенциалов для ряда возбужденных состояний эксиплексной молекулы NaHe, которое было предсказано ранее на основе модельных представлений псевдопотенциала Ферми [10, 11] и численных расчетов методом конечных элементов в рамках остовно-поляризационной модели для молекулярного ридберговского электрона [17].

Квантово-химический расчет электронной структуры молекулы NaHe

Борн-оппенгеймеровские кривые потенциальной энергии $U^{BO}(R)$ и соответствующие им функции собственных (перманентных) дипольных моментов $d(R)$ были рассчитаны из первых принципов для низколежащих $(1-10)\Sigma^+$, $(1-6)\Pi$, $(1-3)\Delta$ и $(1)\Phi$ -дублетных состояний эксиплексной молекулы NaHe в широком интервале межъядерных расстояний R (Å) [1,7; 20,0] и энергий электронного возбуждения – вплоть до $36\,500 \text{ см}^{-1}$.

Нерелятивистские расчеты электронной структуры были выполнены с использованием программного пакета MOLPRO [18] в рамках чистого случая связи по Гунду, внутренне контрактированного многоссылочным методом конфигурационного взаимодействия, а также ограниченного однократными и двукратными электронными возбуждениями (*ic*-MR-CISD). Для атомов натрия и гелия применяли полноэлектронные базы *cc-pVQZ* и *aug-cc-pV5Z* соответственно.

Причем библиотечный набор для атома Na был дополнен шестью обобщенными *s*-, *p*-, *d*-, *f*- и *g*-диффузными функциями для достижения адекватного описания ридберговских молекулярных орбиталей (МО). Оптимизированные МО были получены многоконфигурационным методом самосогласованного поля (MCSCF), реализованным в полном активном пространстве (CASSCF) с усреднением по первым нижним $(1-10)^2\Sigma^+$, $(1-6)^2\Pi$, $(1-3)^2\Delta$ и $(1)^2\Phi$ состояниям, взятым с равными весами (SA-CASSCF). Полное активное пространство для корреляции всех 13 электронов молекулы состояло из 18/7/7/0 орбиталей (в представлении точечной группы C_{2v}), причем нижние (по энергии) шесть 4/1/1/0 орбиталей, используемые для распределения двенадцати субвалентных электронов, предполагались дважды занятыми как на этапе учета статической (CASSCF), так и на этапе динамической (CI) электронной корреляции. Остаточная корреляция единственного валентного электрона с субвалентными учитывалась модельным способом

с помощью так называемого *l*-независимого (от углового момента электрона) остожно-поляризованного потенциала (CPP), со статической поляризуемостью катиона натрия 0,9947 а.у. и параметром усечения $r_c = 0,62$ а.у., слегка скорректированного для точного воспроизведения экспериментальной энергии 4^2S-3^2S -перехода атома Na. Дальнейшие методические подробности используемой MRCI-CPP-процедуры можно найти в предыдущих работах по димерам щелочных металлов [19, 20].

Обсуждение результатов

В рамках описанного выше метода MRCI-CPP были получены БО-кривые потенциальной энергии для всех дублетных $(1-10)\Sigma^+$, $(1-6)\Pi$, $(1-3)\Delta$ и $(1)\Phi$ состояний молекулы NaHe, коррелирующие на диссоциационном пределе вплоть до атомных состояний $Na(6^2S) + He(2^2S)$. Для частичного подавления систематической (*R*-зависимой) ошибки в *ab initio* расчетах энергий БО-потенциалов возбужденных

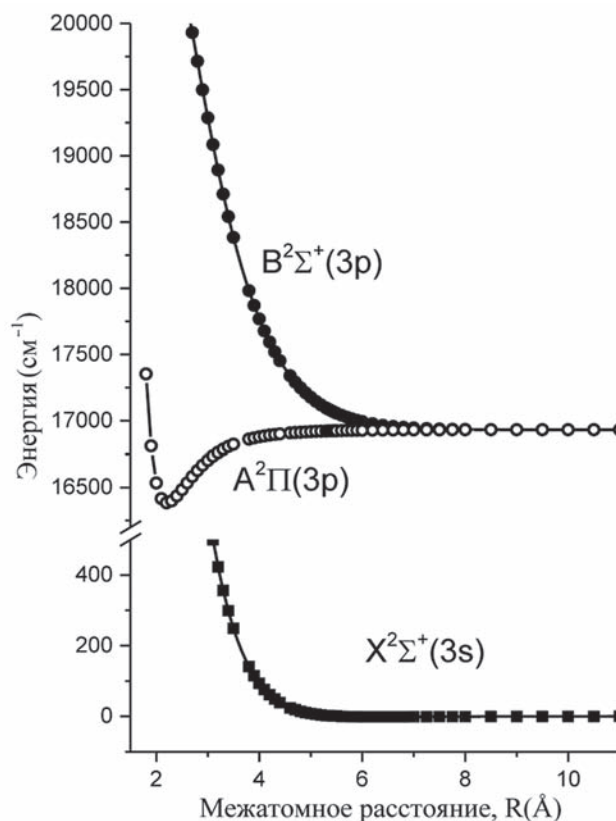


Рис. 1. БО-функции потенциальной энергии для основного $X^2\Sigma^+(3s)$ и первых двух возбужденных $A^2\Pi(3p)$, $B^2\Sigma^+(3p)$ электронных состояний эксиплексной молекулы NaHe, полученные методом MRCI-CPP

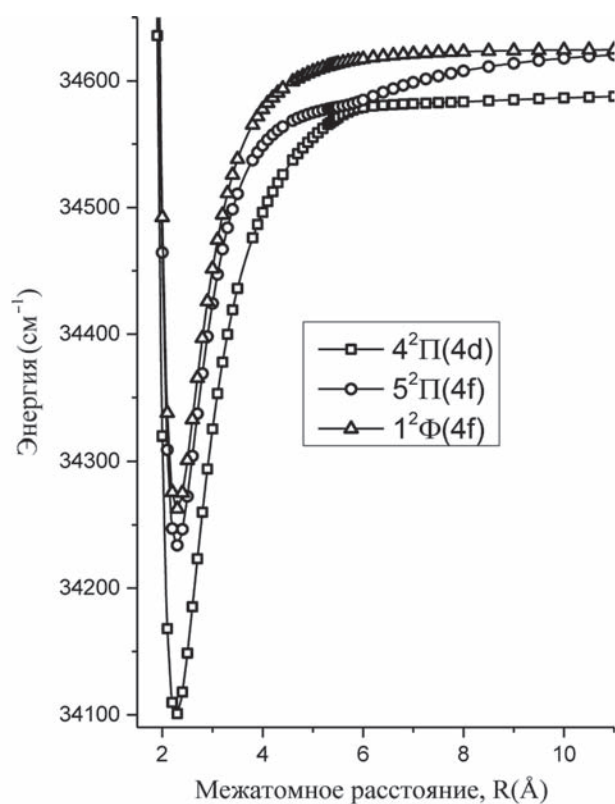


Рис. 2. Неэмпирические БО межатомные потенциалы электронно-возбужденных $(4,5)^2\Pi(4d,4f)$ и $1^2\Phi(4f)$ состояний молекулы NaHe, полученные методом MRCI-CPP

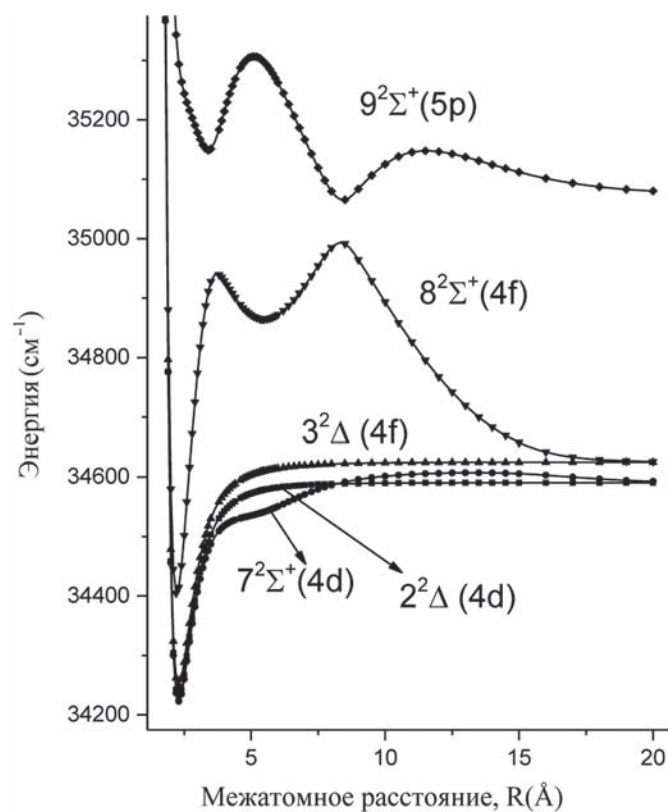


Рис. 3. БО межатомные потенциалы высоковозбужденных $(7-9)^2\Sigma^+(4d,4f,5p)$ и $(2,3)^2\Delta(4d,4f)$ состояний молекулы NaHe, полученные методом MRCI-CPP

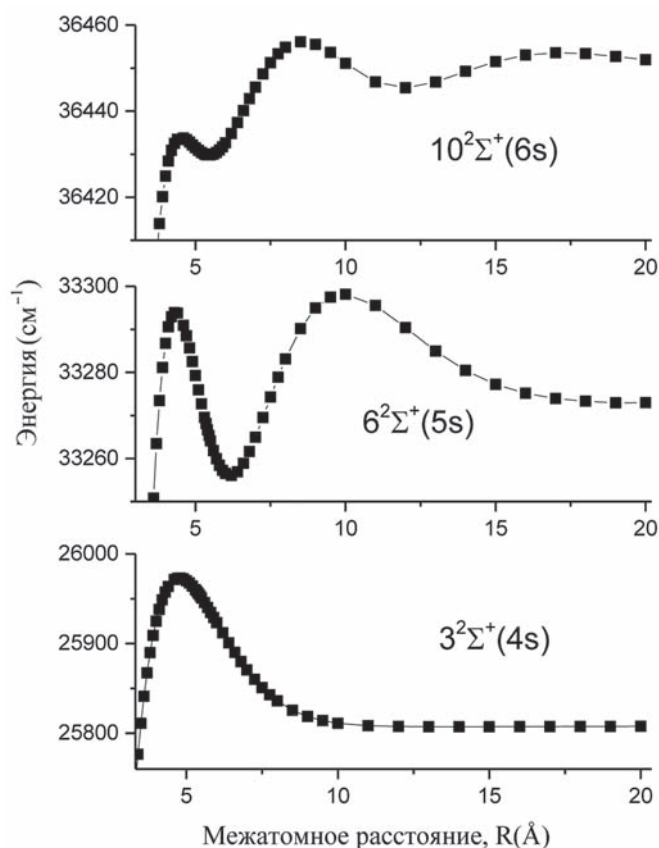


Рис. 4. Волнообразное поведение *ab initio* БО межатомных потенциалов, наблюдаемое для высоковозбужденных (3, 6, 10)²Σ⁺(4s,5s,6s)-состояний молекулы NaHe на средних и больших межъядерных расстояниях

электронных состояний использовался метод «разностных» потенциалов [21]:

$$U_i^{exc}(R) = U_X^{CCSD(T)}(R) + [U_i^{ab}(R) - U_X^{ab}(R)], \quad (3)$$

где $U_X^{CCSD(T)}$ – высокоточный БО-потенциал основного состояния, полученный недавно в работе [22] в рамках метода CCSD(T) с учетом суперпозиционной ошибки базиса (BSSE) и экстраполяции к полному базисному набору (CBS), U_i^{ab} и U_X^{ab} – потенциалы, рассчитанные нами в рамках описанной выше процедуры MRCI–CPP.

Рассчитанные в широком интервале межъядерных расстояний R и энергий электронного возбуждения функции потенциальной энергии подтвердили «необычную» форму межатомных БО-потенциалов, предсказанную для ряда состояний в рамках теории неупругого рассеяния и методом конечных элементов [17], а также рассчитанных ранее альтернативными методами неэмпирической квантовой химии, в том числе, совсем недавно, с явным учетом скалярных и спин-орбитальных релятивистских эффектов [22].

Как и следовало ожидать, анализ электронного строения эксиплекса NaHe показал, что его основное (нижнее по энергии) $X^2\Sigma^+$ -состояние является практически отталкивательным (несвязанным) во всем интервале R с очень неглубоким минимумом глубиной $\sim 1 \text{ см}^{-1}$, который присутствует при больших межъядерных расстояниях и, очевидно, вообще не поддерживает связанные уровни энергии (рис. 1).

В отличие от основного, подавляющее большинство электронно-возбужденных термов молекулы NaHe, обладающие, в частности, П-, Δ- и Ф-симметрией (так называемые вырожденные состояния) (рис. 2, 3), имеют достаточно глубокие локализованные при малых и средних значениях R -минимумы, которые могут поддерживать некоторое число связанных колебательно-вращательных состояний.

Наблюдаемый на коротких расстояниях относительно глубокий (первый слева) минимум на БО-потенциалах возбужденных состояний, по сути, вызван кулоновским взаимодействием эффективного (экранированного островными

электронами) ридберговского электрона молекулы с ее сильно поляризованным двухатомным катионом (остовом) NaHe^+ , полная энергия которого может быть описана с помощью модельного БО-потенциала, предложенного Милликеном [23]:

$$U_{n\Lambda}^{BO}(R) = U_{X^1\Sigma^+}^{ion}(R) - 1/2[n - \mu_{l\Lambda}(R)]^2, \quad (4)$$

где $\mu_{l\Lambda}$ – R -зависимая функция квантового дефекта нейтральной молекулы, $U_{X^1\Sigma^+}^{ion}$ – потенциал основного электронного состояния иона NaHe^+ .

Легко заметить, что поскольку при увеличении энергии возбуждения (n) взаимодействие ридберговского электрона молекулы с ее положительно заряженным остовом систематически ослабевает, эффективный заряд катиона приближается к $+1e$, а БО-потенциалы электронно-возбужденной молекулы сходятся к БО-потенциалу ее катиона. Поэтому можно ожидать, что традиционные спектроскопические константы, характеризую-

щие основную (первую и наиболее глубокую) яму на БО-потенциалах нейтральной молекулы NaHe , имеют тенденцию монотонно приближаться к соответствующим равновесным константам катиона NaHe^+ , находящегося в основном $X^1\Sigma^+$ -электронном состоянии.

Как и многие экциплексы типа щелочной металл / инертный газ (Me-Rg), высоко возбужденные (ридберговские) термы молекулы NaHe , обладающие $^2\Sigma^+$ -симметрией, демонстрируют на средних и больших межъядерных расстояниях необычный характер поведения кривых потенциальной энергии (рис. 3, 4), который вызван конкурирующим действием двух внутримолекулярных процессов:

- 1) хорошо известным эффектом «непересечения» электронных термов одинаковой симметрии, соответствующих двум близким атомным конфигурациям ридберговского электрона;
- 2) волнообразным (осциллирующим) поведением межатомного потенциала изолированного

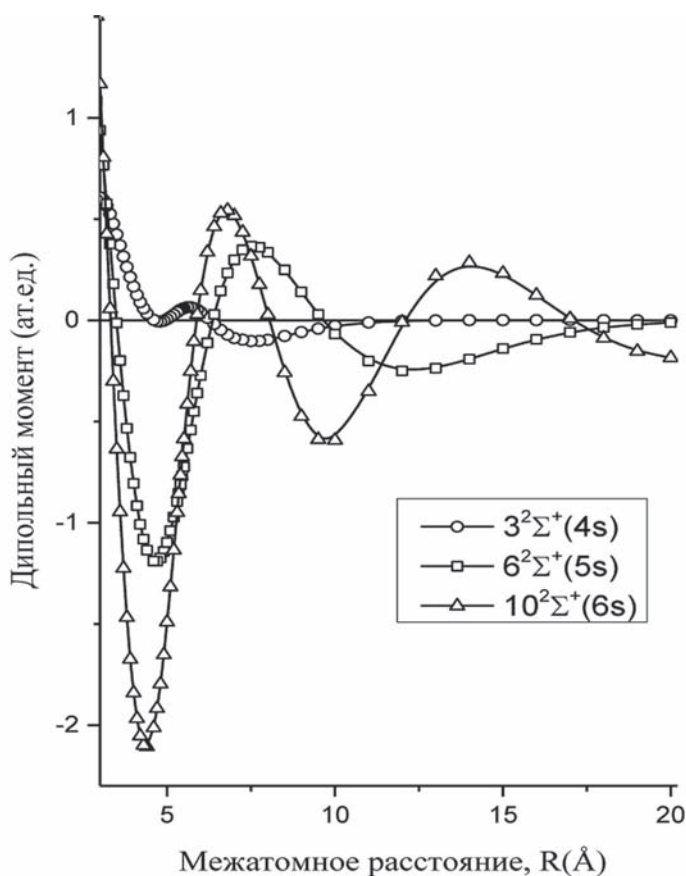


Рис. 5. Функции собственных электрических дипольных моментов $(3,6,10)^2\Sigma^+$ -состояний молекулы NaHe , рассчитанные методом MRCI-CPP

электронного состояния, локальные экстремумы которого модулируются узловой структурой волновой функции ридберговского электрона атома щелочного металла.

Общее число барьеров (локальных максимумов) или число вторичных минимумов на межатомном потенциале $^2\Sigma^+$ -состояния, которое сходится на диссоциационном пределе к возбужденному состоянию атома щелочного металла $Me(n^2S)$ и основному состоянию атома инертного газа Rg, равно $n-m$, где m – принципиальное квантовое число основного состояния атома металла $Me(m^2S)$ и, разумеется, $n > m$ [12].

На рис. 4 показано волнообразное поведение межатомных потенциалов $3^2\Sigma^+$, $6^2\Sigma^+$ и $10^2\Sigma^+$ состояний молекулы NaHe, которые сходятся к основному He(1^2S) и возбужденным 4^2S , 5^2S и 6^2S состояниям атома Na соответственно. Как известно, ридберговская $4s$ -орбиталь Na имеет один узел в валентной области, разделенный двумя максимумами электронной плотности, один из которых локализован на малом радиальном расстоянии, близком к равновесному, а второй – на большом. По мере движения вдоль межъядерной оси атом He последовательно взаимодействует с осциллирующим градиен-

том электронной плотности, характерной для $4s$ -электрона Na. В результате молекулярное состояние $3^2\Sigma^+(4s)$ имеет единственный потенциальный барьер в диссоциационной области. Соответственно, состояние $6^2\Sigma^+(5s)$ имеет два потенциальных барьера, разделенных второй потенциальной ямой, поскольку $5s$ -орбиталь Na имеет уже два узла. И наконец, состояние $10^2\Sigma^+(6s)$ имеет три потенциальных барьера, разделенных двумя мелкими минимумами и одной глубокой ямой при равновесных значениях R (рис. 4). Аналогичное осциллирующее поведение в зависимости от величины R демонстрируют также функции собственных дипольных моментов рассматриваемых состояний (рис. 5).

Таким образом, выполненные в настоящей работе неэмпирические расчеты электронной структуры эксиплексной молекулы NaHe однозначно показали, что необычное волнообразное поведение межатомных потенциалов и функций собственных дипольных моментов, наблюдаемое на больших межъядерных расстояниях для высоковозбужденных $^2\Sigma^+$ -состояний, определяется осцилляциями узловой структуры радиальной волновой функции ридберговского s -электрона атома щелочного металла.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Herzberg G. // Ann. Rev. Phys. Chem. 1987. Vol. 38. P. 279357 (DOI: 10.1146/annurev.pc.38.100187.000331).
2. Quemener G., Julienne P. // Chem. Rev. 2012. Vol. 112. P. 4949 (DOI: 10.1021/cr300092g).
3. Schlagmüller M., et al. // Phys. Rev. 2016. Vol. X6. P. 031020 (DOI: 10.1103/PhysRevX.6.031020).
4. Tellinghuisen J. // Applied Atomic Collision Physics 2017. Vol. 3. P. 251. ISBN: 9781483218687.
5. Weiner J., Vanderlei S. // Rev. Mod. Phys. 1999. Vol. 71. P. 1 (DOI: 10.1103/RevModPhys.71.1).
6. Cohen M.L. // Am. J. Phys. 1984. Vol. 52 (8). P. 695 (DOI: 10.1119/1.13572).
7. Mironov A., Goldschlag W., Eden J. // Appl. Phys. Lett. 2015. Vol. 107. P. 041112 (DOI: 10.1063/1.4927536).
8. Hongling Cheng et al. // Jpn. J. Appl. Phys. 2017. Vol. 56. P. 032701 (DOI: 10.7567/JJAP.56.032701).
9. Burrows A., Volobuyev M. // Astrophys. J. 2003. Vol. 583, P. 985 (DOI: 10.1086/345412).
10. Ning Yi Du, Chris H. Greene // Phys.Rev.A. 1987. Vol.36(2), P. 971 (DOI: 10.1038/s41467-018-04135-6).
11. Greene C.H., et al. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. P. 2458 (DOI: 10.1103/PhysRevLett. 85. 2458).
12. Yiannopoulou A., et al. // Phys.Rev.A. 1999. Vol. 59 (2). P. 1178 (DOI: 10.1016/S0009-2614(00)00634-5).
13. Geum N., Jeung G.-H. // Chem. Phys. Lett. 2001. Vol. 333. P. 314 (DOI: 10.1086/345412).
14. Greene C.H., et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97. P. 233002 (DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.223002).
15. Bendkowsky V., et al. // Nature 2009. Vol. 458 (7241). P. 1005 (DOI: 10.1038/ncomms5546).
16. Theodorakopoulos G., Petsalakis I.D. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1993. Vol. 26, P. 4367 (DOI: 10.1088/0953-4075/26/23/010).
17. Elfimov S.V., et al. // J. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 2019. Vol. 235. P. 120 (DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.06.028).
18. Werner H.-J., Knowles P.J., Knizia G., Manby F.R., Schütz M., et al., MOLPRO, version 2010.1, a package of ab initio programs, <http://www.molpro.net>.
19. Pazyuk E.A., et al. // Chemical Physics. 2015. Vol. 462. P. 51 (DOI: 10.1016/j.chemphys.2015.07.018).
20. Pazyuk E.A., et al. // J. Quant. Spectrosc. and Radi-

- at. Transfer, 2016. Vol. 177. P. 283 (DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.01.004).
21. A. Zaitsevskii, et al. // Phys. Rev. A. 2005. Vol. 71(1). P.012510 (DOI: 10.1103/PhysRevA.71.012510).
22. Di Liu, et al. // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2024. Vol. 317 (DOI: 10.1016/j.jqsrt.2024.108924).
23. Mulliken R.S. // J. Am. Chem. Soc. 1964. Vol. 86 (16) P. 3183 (DOI: 10.1021/ja01070a001).

Информация об авторах

Сергей Владимирович Козлов – ст. науч. сотр. кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова (kozlovsv@my.msu.ru);

Елена Александровна Пазюк – профессор кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова (pazyuk@phys.chem.msu.ru);

Андрей Владиславович Столяров – зав. кафедрой лазерной химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова (avstol@phys.chem.msu.ru)

Вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Соблюдение этических стандартов

В данной работе отсутствуют исследования человека и животных.

Статья поступила в редакцию 01.04.2024;
одобрена после рецензирования 16.04.2024;
принята к публикации 25.04.2024.