

Teoretyczny opis oddziaływań cząsteczki H₂S z matrycą argonową

Piotr Sobiecki

Kierownik: **dr hab. Tatiana Korona, prof. ucz.**

Współkierujący: **dr Marcin Gronowski, Wydział Fizyki**

H₂S w matrycy argonowej jest układem stosowanym w spektroskopii izolacji matrycowej (*matrix isolation spectroscopy*) - technice spektroskopowej, w której bada się interesującą nas cząsteczkę w chemicznie obojętnej gazie [1][2]. Niewiele jednak wiadomo o teoretycznych szczegółach oddziaływania cząsteczki z matrycą gazową. Aby wypełnić tę lukę, niezbędne są metody chemii kwantowej. W niniejszej pracy układ H₂S-Ar₂ został zbadany na poziomie CCSD(T), obliczone też zostały poprawki relatywistyczne schematem Douglasa-Krolla-Hessa (DKH) na tym samym poziomie teorii. Znalezionych zostało 6 minimów lokalnych układu. Następnie rachunek zaburzeń o adaptowanej symetrii (SAPT) został wykorzystany do znalezienia dalekozasięgowego zachowania energii oddziaływania i jej różnych wkładów. Układy H₂S-Ar_n ($2 \leq n \leq 28$) zbadano przy użyciu metod DFT w celu znalezienia informacji o oddziaływaniu gość-gospodarz między cząsteczką H₂S i matrycą argonową. Wykazano, że pierwsza otoczka solwatacyjna wokół H₂S zbudowana jest z 15 atomów argonu, a wewnątrz niej cząsteczka H₂S wykazuje zahamowaną rotację. Korzystając z obliczonych częstości drgań każdego układu, znaleziono, że pasma absorpcyjne IR H₂S w matrycy argonowej są przesunięte o kilkanaście cm⁻¹ w kierunku wyższych energii w stosunku do gazowego H₂S, co znajduje potwierdzenie w eksperymencie [3].

Literatura:

[1] Eric Whittle, David A Dows, and George C Pimentel. Matrix isolation method for the experimental study of unstable species. *The Journal of Chemical Physics*, 22(11):1943–1943, 1954.

[2] A Barnes, WJ Orville-Thomas, R Gaufrès, and Achim Müller. *Matrix isolation spectroscopy*, volume 76. Springer Science & Business Media, 2012.

[3] Esa Isoniemi, Mika Pettersson, Leonid Khriachtchev, Jan Lundell, and Markku Räsänen. Infrared spectroscopy of H₂S and SH in rare-gas matrixes. *The Journal of Physical Chemistry A*, 103(6):679–685, 1999.