

# СИЛЬНОЕ КОНФИГУРАЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСАХ UBr62- И UCl62-

ДУНИНА Е.Б.<sup>1</sup>, ФОМИЧЕВА Л.А.<sup>1</sup>, КОРНИЕНКО А.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Витебский государственный технологический университет, Беларусь,  
210035, Витебск, Московский просп., 72

## КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:

КОНФИГУРАЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ, CONFIGURATION INTERACTION,  
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ ПОЛЕ, CRYSTAL FIELD, ШТАРКОВСКАЯ СТРУКТУРА, STARK  
STRUCTURE, АКТИНОИД, ACTINIDE

## АННОТАЦИЯ:

В приближении слабого и аномально сильного конфигурационного взаимодействия выполнен анализ шарковской структуры мультиплетов иона U<sup>4+</sup> в молекулярных комплексах UBr<sub>6</sub><sup>2-</sup> и UCl<sub>6</sub><sup>2-</sup> с учетом влияния возбужденных конфигураций, соответствующих переносу заряда. Показано, что применение модифицированной теории кристаллического поля в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия приводит к значительному улучшению согласия теории с экспериментом. На основе описания экспериментальных данных по шарковской структуре впервые определены параметры ковалентности для U<sup>4+</sup>-Br<sup>-</sup> и U<sup>4+</sup>-Cl<sup>-</sup>. Предложена удобная для компьютерной реализации методика определения погрешностей параметров теории, используемой для описания экспериментальных результатов. С помощью этой методики вычислены погрешности параметров  $B_04$ ,  $B_06$ ,  $\gamma_{sf}$ ,  $\gamma_{lf}$ ,  $\Delta c_1$ ,  $\Delta c_2$ ,  $\Delta c_3$  гамильтониана кристаллического поля, полученного в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия.