

КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ КОНСТАНТ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ

© Аминова Роза Мухаметовна

Кафедра химической физики. Физический факультет. Казанский государственный университет.
Ул. Кремлёвская, 18. г. Казань 420008. Татарстан. Россия. E-mail: aminov@ksu.ru

Ключевые слова: тензор ядерного магнитного экранирования, химический сдвиг, градиентно-инвариантные атомные орбитали, вариационная теория возмущений, поляризационный пропагатор, теория функционала плотности, приближение случайных фаз, влияние электрических полей, водородосвязанные комплексы.

Резюме

В данном обзоре последовательно изложены основные современные теоретические методы и подходы (как неэмпирические, так и полуэмпирические), применяемые для интерпретации химических сдвигов в спектрах ядерного магнитного резонанса. Даны определения и рассмотрены основные трудности, возникающие при квантовохимических расчетах констант ядерного магнитного экранирования – проблема калибровочной инвариантности и выбора базисного набора, учета эффектов электронной корреляции. Кратко изложена суть методов GIAO, IGLO, LORG, методов вторичного квантования – SOPPA, а также методов DFT. Изложены некоторые результаты исследований автора в области теории и расчетов констант ядерного магнитного экранирования (модифицированные вариационные методы, методы учета влияния электрических полей на химические сдвиги в сочетании с волновыми функциями локализованных молекулярных фрагментов, расчеты магнитного экранирования в комплексах с водородной связью).