

Квантово-химические расчеты констант квадрупольного взаимодействия и Мёссбауэровских химических сдвигов галогенидов некоторых металлов на основании теории функционала плотности

© Полещук Олег Хемович,^{1*} Бранчаделл Висенс,² Риттер Роман Александрович¹
и Фатеев Александр Владимирович¹

¹ Кафедра органической химии. Томский государственный педагогический университет.
Просп. Комсомольский, 75. г. Томск, 634041. Россия.

² Departament de Química. Universitat Autònoma de Barcelona. Edifici, 08193 Bellaterra. Spain.

*Ведущий направление; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квадрупольное взаимодействие, функционал плотности, приближение Клопмана, галогениды металлов.

Аннотация

На основании расчетов с использованием теории функционала плотности проведен расчет констант ядерного квадрупольного взаимодействия ряда соединений золота, сурьмы, платины, ниобия и тантала. Геометрические параметры и константы ядерного квадрупольного взаимодействия, полученные из этих расчетов, хорошо соответствуют данным микроволновой и ЯКР спектроскопии. Нами был проведен анализ качества вычислений с использованием псевдопотенциала на тяжелых атомах и полноэлектронного базисных наборов. Метод ZORA показал достойную альтернативу при оценке констант квадрупольного взаимодействия атомов галогенов в молекулах. К тому же модель ZORA, в отличие от псевдопотенциальной модели, приводит к реалистичным значениям констант для всех исследованных металлов. Из приближения Клопмана следует, что соотношение между электростатическим и ковалентным связыванием зависит от природы центрального атома. Результаты Мёссбауэровских химических сдвигов также находятся в хорошем согласии с координационным числом центрального атома.