

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 9-15-1-10 Подраздел: Квантовая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 539.196.3+544.032.732. Поступила в редакцию 15 февраля 2009 г.

Моделирование молекулярных наноразмерных кластеров методами квантовой химии

© Байсупова Элина Рашитовна и Аминова Роза Мухаметовна*[†]

Лаборатория молекулярной фотохимии. Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН.
Сибирский тракт, д. 10/7. г. Казань, 420029. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 292-76-14. E-mail: raminova@rambler.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: супермолекула, метод КМ/ММ, метод молекулярной механики, калибровочно-инвариантные атомные орбитали, GIAO, функционал плотности DFT, РСМ, ядерное магнитное экранирование, химический сдвиг.

Аннотация

Методами квантовой химии проведены расчеты влияния эффектов растворителя на химические сдвиги ядер фосфора ³¹P. При моделировании структур молекулярных кластеров фосфорсодержащих молекул в растворе использовались методы молекулярной механики (ММ), комбинированный метод квантовой механики и молекулярной механики (КМ/ММ) и метод функционала плотности DFT. Расчеты констант ядерного магнитного экранирования проводили с применением калибровочно-инвариантных атомных орбиталей (GIAO) и базисного набора 6-31G(d,p) в рамках метода функционала плотности DFT с функционалом UB3LYP. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными ЯМР данными.