

## Оценка химических сдвигов тетраоксоферратов(IV-VIII) в мёссбауэровских спектрах на основании квантово-химических расчетов методом функционала плотности

© Полешук Олег Хемович,<sup>1\*</sup> Дедушенко Сергей Константинович,<sup>2</sup>  
Шпак Михаил Юрьевич<sup>1</sup> и Перфильев Юрий Дмитриевич<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Кафедра органической химии. Томский государственный педагогический университет.  
пр. Комсомольский, 75. г. Томск, 634041. Россия. Тел.: (3822) 59-14-54. E-mail: [poleshch@tspu.edu.ru](mailto:poleshch@tspu.edu.ru)

<sup>2</sup> Лаборатория ядерно-химических методов. Московский государственный университет.  
Воробьевы горы 1, стр. 3. г. Москва, 119991. Россия.

\*Ведущий направления; <sup>†</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, ADF, мёссбауэровская спектроскопия, химический сдвиг, феррат.

### Аннотация

Рассчитанная электронная плотность на ядре атома железа проанализирована на основании теории функционала плотности. Длины связей и электронная плотность на ядре атома железа согласуются с известными структурными и Мёссбауэровскими данными. Для ферратов химический сдвиг зависит от заселенности 4s-орбиталей атома железа. Проведенные расчеты позволили оценить химические сдвиги тетраоксоферрата(VII),  $KFeO_4$ , и оксида железа(VIII),  $FeO_4$ .