

Использование функционала плотности для оценки изотопных сдвигов в соединениях свинца

© Полешук Олег Хемович,¹⁺ Егоров Николай Борисович,^{2*}
Жерин Иван Игнатьевич² и Ивановский Александр Леонидович³

¹ 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

² Кафедра химической технологии редких, рассеянных и радиоактивных элементов. Национальный исследовательский Томский политехнический университет. Пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия.
Тел.: (3822) 41-91-07. E-mail: egorov@tpu.ru

³ Лаборатория квантовой химии и спектроскопии Института химии твердого тела УрОРАН.
Ул. Первомайская, 91. г. Екатеринбург, 620990. Россия.
Тел.: (343) 374-53-31. E-mail: ivanovskii@ihim.uran.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: теория функционала плотности, B3LYP/SDD, спектры Рамана, изотопный сдвиг.

Аннотация

В настоящей работе на уровне теории B3LYP/SDD и BP86/TZ2P+ проведены квантово-химические расчеты кластеров серы, соединений двухвалентного и четырехвалентного свинца, а также сульфида свинца. Показано, что данный уровень теории применим для оценки геометрических параметров, спектров Рамана и ИК спектров, термодинамических характеристик в соединениях серы и свинца. Показано, что существуют зависимости между экспериментальными и рассчитанными характеристиками сульфида свинца. Оценено влияние изотопного сдвига свинца и серы на изменение термодинамических параметров и спектров Рамана для сульфида свинца.