

## Исследование электронного строения комплексов Льюиса методом функционала плотности

© Поleshchuk<sup>1\*+</sup> Олег Хемович, Фатеев<sup>2</sup> Александр Владимирович,  
Утелбаева<sup>3</sup> Акмарал Болысбековна, Ермаханов<sup>3</sup> Мырзабек Нысанбекулы  
и Саидахметов<sup>3</sup> Пулат Абилтаевич

<sup>1</sup> Кафедра естественно-научного образования. Юргинский технологический институт Томского политехнического университета. Ул. Ленинградская, 26. г. Юрга, 652055. Россия.  
Тел.: (9138) 29-14-54. E-mail: [poleshch@tspu.edu.ru](mailto:poleshch@tspu.edu.ru)

<sup>2</sup> Кафедра органической химии. Томский государственный педагогический университет.  
пр. Комсомольский, 75. г. Томск, 634041. Россия. Тел.: (9528) 85-70-25.  
E-mail: [fateevav@tspu.edu.ru](mailto:fateevav@tspu.edu.ru)

<sup>3</sup> Кафедры теории и методики преподавания химии и физики. Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова. пр. Тауке хана, 5. г. Шымкент. Республика Казахстан.  
Тел.: (701) 608-03-35. E-mail: [myrza1964@mail.ru](mailto:myrza1964@mail.ru)

\* Ведущий направления; + Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** функционал плотности; квадрупольное взаимодействие; приближение Клопмана; разделение энергии; галогениды металлов; триоксид серы; интергалогены.

### Аннотация

Методом функционала плотности проведены квантово-химические расчеты комплексов галогенидов металлов I, IV и V групп, галогенов и интергалогенов, комплексов триоксида серы с рядом лигандов различной донорной способности. Впервые теория функционала плотности, включенная в программные пакеты Гауссиан и АФП применена одновременно. Показано, что геометрические параметры, вращательные постоянные и колебательные частоты в ИК спектрах, полученные из расчетов методами Гауссиан и АФП, согласуются с данными микроволновой спектроскопии в газовой фазе. Полноэлектронный базис DGDZVP и приближение ZORA показали хорошие результаты в вычислении констант квадрупольного взаимодействия на атомах азота, галогенов и металлов. Впервые найдены корреляции между зарядовым донированием и рассчитанными энергиями связей в комплексах галогенов и SO<sub>3</sub>. Отмечено значительное отличие между комплексами галогенов и триоксида серы с одной стороны и галогенидов металлов с другой. На основании анализа разделения энергии в рамках метода АФП и приближения Клопмана впервые показано, что химическая связь в комплексах галогенидов металлов и интергалогенов в основном является электростатической, в то время как в комплексах триоксида серы присутствует большой вклад ковалентного взаимодействия.