

Исследование электронного строения комплексов Льюиса методом функционала плотности

© Поleshchuk^{1*+} Олег Хемович, Фатеев² Александр Владимирович,
Утелбаева³ Акмарал Болысбековна, Ермаханов³ Мырзабек Нысанбекулы
и Саидахметов³ Пулат Абилтаевич

¹ 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

² 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

³ 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

* 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 SO₃. 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.