

Анализ взаимодействия поверхности металлической ртути с аммонийными основаниями на основании теории функционала плотности

© Полешук¹⁺ Олег Хемович, Фатеева² Елена Геннадьевна
и Ковалева^{2*} Светлана Владимировна

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 неорганической химии. Томский государственный педагогический университет. пр. Комсомольский, 75. г. Томск, 634041. Россия. Тел.: (3822) 43-19-06.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: теория функционала плотности, псевдопотенциал, аммонийные основания, металлическая ртуть, натуральные орбитали связи.

Аннотация

Проведены расчеты некоторых ртутьсодержащих молекул в газовой фазе на основании расчетов методом функционала плотности с использованием псевдопотенциального базисного набора для атома ртути и 6-311+G(d,p) для других атомов в программном пакете GAUSSIAN 03 и TZ2P+ в программе Амстердамский функционал плотности. Показано, что катион аммония по сравнению с радикалом аммония с большей вероятностью может взаимодействовать с поверхностью металлической ртути. Рассчитанные термодинамические параметры указывают на невозможность взаимодействия с поверхностью металлической ртути таких аминов как гидросиламин, гидразин и тетраметиламин.