Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.

Подраздел: Неорганическая химия.

Регистрационный код публикации: 12-32-12-149

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". http://butlerov.com/readings/ Поступила в редакцию 23 ноября 2012 г. УДК 541.1+530.145.

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

$\ \ \ \,$ Полещук $^{1+}$ Олег Хемович, Фатеева 2 Елена Геннадьевна и Ковалева²* 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 гидроксиламин, гидразин и тетраметиламин.