

**Полная исследовательская публикация** Тематический раздел: Квантово-химические исследования.  
Регистрационный код публикации: 13-36-11-22 Подраздел: Неорганическая химия.  
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>  
УДК 541.1+530.145. Поступила в редакцию 22 ноября 2013 г.

## **Анализ взаимодействия четырехатомного кластера серебра с поверхностью диоксида кремния методами теории функционала плотности**

© **Изаак<sup>1\*</sup> Татьяна Ивановна, Мартынова<sup>1</sup> Дарья Олеговна и Полещук<sup>2+</sup> Олег Хемович**

<sup>1</sup> *Национально-исследовательский Томский государственный университет. Пр. Ленина, 36. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: 909 546 6306. E-mail: taina\_i@mail.ru*

<sup>2</sup> *Национально-исследовательский Томский политехнический университет. Пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: 913 829 1454. E-mail: poleshch@tspu.edu.ru*

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, DGDZVP, диоксид кремния, металлическое серебро, натуральные орбитали связи.

### **Аннотация**

Проведены расчеты некоторых серебро- и кремний содержащих молекул в газовой фазе методом функционала плотности с использованием полноэлектронного базисного набора DGDZVP в программном пакете GAUSSIAN'03 и TZ2P+ в программе Амстердамский функционал плотности. Показано, что диоксид кремния с большой вероятностью может взаимодействовать с кластером серебра. Рассчитанные рентгеноэлектронные уровни натуральные орбитали связи указывают на существенное взаимодействие между разрыхляющими орбиталями атомов серебра.