

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/15-41-2-82 Подраздел: Органическая химия.
Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном
форуме “Бутлеровское наследие-2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 541.1 + 530.145. Поступила в редакцию 25 февраля 2015 г.

Исследование химической связи в комплексах интергалогенов на основании теории функционала плотности

© Поleshchuk^{1*} Олег Хемович, Яркова² Анна Геннадьевна,
Фатеев² Александр Владимирович, Ермаханов³ Мырзабек Нысанбекулы
и Саидахметов³ Пулат Абилтаевич

¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет.
пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия.

² Томский государственный педагогический университет. ул. Киевская, 60. г. Томск, 634061. Россия.

³ Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова. пр. Тауке хана, 5. г. Шымкент.
Республика Казахстан. E-mail: poleshch@tspu.edu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: микроволновая спектроскопия, теория функционала плотности, химическая связь, квадрупольное взаимодействие, молекулярные орбитали.

Аннотация

На основании расчета методом теории функционала плотности проведен анализ ряда комплексов ХYL, образованных между молекулами I₂, ICl, IBr и пиридином. Геометрические параметры, ИК-спектры и константы ядерного квадрупольного взаимодействия йода, полученные из этих расчетов, согласуются с данными микроволновой спектроскопии и ядерного квадрупольного резонанса. Хорошие корреляции между экспериментальными и рассчитанными энергиями связи внутренних электронов атомов углерода, хлора, йода и азота обнаружены при расчете как с Гауссовыми, так и со Слетеровскими функциями. Сравнение экспериментального и рассчитанного изменения электронной плотности на атомах при комплексообразовании позволило выбрать схемы расчета эффективного заряда на атомах, которые позволяют интерпретировать экспериментальные спектры. Показано, что использование обоих расчетных схем позволяет рассчитывать энтальпию комплексообразования, близкую к экспериментальным значениям. Из энергетического анализа следует, что в комплексах электростатическое связывание преобладает над ковалентным.