

УДК 541.1:546.654(075)  
ББК Г511.2:Г123.5/6я7  
Р69

*Печатается по решению редакционно-издательского совета  
Казанского национального исследовательского технологического университета*

*Рецензенты:  
д-р хим. наук, проф. Я. А. Верещагина  
канд. физ.-мат. наук В. С. Лобков*

**Романова К. А.**

**Р69** Квантово-химическое моделирование лантаноидсодержащих координационных соединений : учебное пособие / К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов; Минобрнауки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2020. – 88 с.

ISBN 978-5-7882-2964-5

Рассмотрены особенности молекулярного строения и физико-химического поведения координационных соединений лантаноидов, а также основные подходы и методы, используемые для квантово-химического моделирования их молекулярного строения и некоторых физико-химических свойств.

Предназначено для бакалавров, обучающихся по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология», и магистров, обучающихся по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая технология».

Подготовлено на кафедре физической и коллоидной химии.

УДК 541.1:546.654(075)  
ББК Г511.2:Г123.5/6я7

*Ответственный за выпуск С. В. Шилова*

Подписано в печать 30.12.2020

Формат 60×84 1/16

Бумага офсетная

Печать ризографическая

5,12 усл. печ. л.

5,5 уч.-изд. л.

Тираж 100 экз.

Заказ 192/20

Издательство Казанского национального исследовательского  
технологического университета

Отпечатано в офсетной лаборатории Казанского национального  
исследовательского технологического университета

420015, Казань, К. Маркса, 68

ISBN 978-5-7882-2964-5

© Романова К. А., Галяметдинов Ю. Г., 2020

© Казанский национальный исследовательский  
технологический университет, 2020

## Содержание

ВВЕДЕНИЕ .....	4
СПИСОК УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ .....	5
1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ В ХИМИИ .....	7
1.1. Молекулярное моделирование в химии .....	7
1.2. Квантово-химические подходы и методы .....	7
2. ОСОБЕННОСТИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ LN .....	20
2.1. Люминесценция координационных соединений LN.....	20
2.2. Особенности строения координационных соединений LN.....	22
2.3. Координационные соединения LN, обладающие жидкокристаллическими свойствами .....	25
3. МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ LN .....	28
3.1. Моделирование строения координационных соединений LN.....	28
3.2. Моделирование физико-химических свойств координационных соединений LN .....	31
4. МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ LN В ПРОГРАММАХ MORAS И ORCA .....	36
4.1. Моделирование строения комплексов LN.....	37
4.1.1. Построение геометрии комплексов Ln с использованием программы Gabedit.....	39
4.1.2. Оптимизация геометрии комплексов Ln.....	43
4.1.3. Расчет гессуана при моделировании комплексов Ln .....	48
4.1.4. Построение орбиталей комплексов Ln.....	54
4.2. РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ И СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ, МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА В КОМПЛЕКСАХ LN.....	58
4.3. Моделирование комплексов LN с учетом влияния растворителя .....	62
4.4. Моделирование ИК-спектров комплексов LN .....	63
4.5. Моделирование спектров поглощения комплексов LN.....	66
4.6. Моделирование нелинейных оптических свойств комплексов LN .....	72
4.7. Моделирование механизмов реакций комплексов LN и переходных состояний.....	75
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК .....	85