

А.А. Иванова

## Компьютерное моделирование структуры этилендиаминтетраацетатоаквамагния

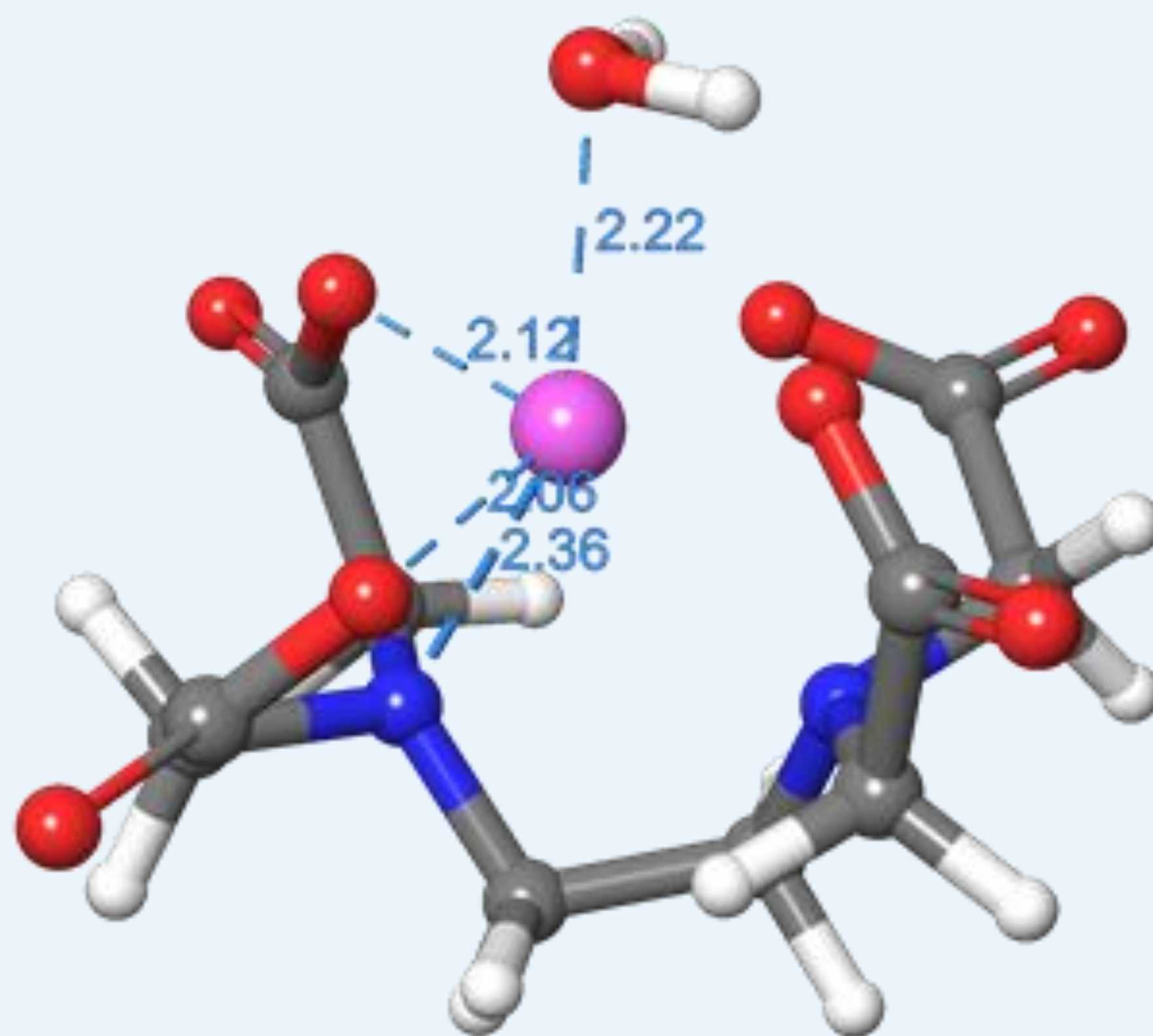
Кафедра неорганической и аналитической химии ТвГУ  
Руководитель В.Г. Алексеев

e-mail: aaivanova4@edu.tversu.ru

**Объект исследования:** Комплекс этилендиаминтетраацетатоаквамагния.

**Цель:** Выбор функционала для корректного расчета структуры комплекса  $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})\text{edta}]^{2-}$  методом DFT с использованием базисов, рекомендованных к работе [1].

Модель комплекса  $[\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})\text{edta}]^{2-}$ , рассчитанная методом DFT с использованием базиса 6-31G\*\*++ и функционала M06-2X-D3.



### Результаты:

Связь	Эксперимент	B3LYP-D3	M05-2X-D3	M06-D3	M06-2X-D3	M06-HF
Mg–O (H <sub>2</sub> O)	2.06	2.33	2.25	2.28	2.22	2.22
Mg–O	2.08	2.08	2.07	2.07	2.06	2.07
Mg–O	2.27	2.11	2.12	2.11	2.12	2.13
Mg–N	2.38	2.41	2.36	2.42	2.36	2.34

**Выводы:** Результаты, наиболее близкие к экспериментальным данным [2], обеспечивает использование функционалов M05-2X-D3 и M06-2X-D3.

- Goerigk L., Hansen A., Bauer C., Ehrlich S., Najibi A., Grimme S. // Physical Chemistry Chemical Physics. 2017. Vol.48. P.32184.
- Stezowski J.J., Countryman R., Hoard J.L. // Inorganic Chemistry. 1973. Vol.12. № 8. P.1749–1754.