

**ПРИМЕНИМОСТЬ ФУНКЦИОНАЛОВ В БАЗИСЕ СЛЕТЕРОВЫХ
ФУНКЦИЙ К РАСЧЕТУ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ¹**

Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А.

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», 170100 Тверь, ул. Желябова, 33,
e-mail: turtsma@tversu.ru.

Теоретическое изучение свойств молекул и радикалов требует предварительной калибровки методов на известных соединениях. Если в дальнейшем предполагается применять отобранные модели к большим многоатомным молекулам, кластерам, поверхностям и кристаллам, то с самого начала нужно ограничиться потенциалами DFT.

Нами с помощью программы ADF.2014 была выполнена оптимизация строения $r_e(\text{Ge-O})$ и найдены частоты ω_{harm} оксидов GeO, GeO₂ (а также проведено сравнение с C₂H₆) в больших слетеровых декартовых (6d 10f) базисах QZ4P, aug-TZ2P и TZ2P в два этапа: а) с учетом скалярной релятивистской поправки ZORA (GeO и GeO₂) и б) без учета поправки (GeO, GeO₂ и C₂H₆). Изучена зависимость ошибки расчета от величины базиса.

В результате показано, что для GeO функционалы (в порядке убывания) B1LYP, X3LYP, LDA, TPSSH, B3LYP, M06L, OPBE, M06, CAMY-B3LYP, M06-2X, MPW1PW, B1PW91, PBE0 правильно воспроизводят $r_e(\text{Ge-O})$, а функционалы OPBE, revTPSS, PBEsol, LDA, TPSS, M06L, HTBS, TPSSH – достаточно корректно ω_{harm} . В GeO₂ лучше воспроизводят длину связи BLYP, RPBE, revPBE, mPBE, BP, mPW,PBE и функционалы TPSS, PW91, revTPSS, PBE, BP, HTBS, mPBE колебательные частоты. Длины связей в этане правильно дают M06-HF, BLYP, revPBE, RPBE, TPSS, mPBE, revTPSS и частоты BLYP, RPBE, BP, revPBE, HTBS.

¹ Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках реализации ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 - 2020 годы», Соглашение 14.577.21.0004 (RFMEFI57714X0004)