

УДК 546.222.4: 661.8...516: 544.18

## НАСКОЛЬКО ХОРОШО КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОПИСЫВАЮТ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ ПОЛИСУЛЬФИДОВ

Панкратьев Е.Ю.

Уфимский федеральный исследовательский центр РАН  
450054, г. Уфа, пр. Октября, д. 71  
e-mail: evgeniy@pankratyev.com

На примере молекул  $S_2$ ,  $S_2^+$ ,  $S_2H_2$ ,  $S_8$  произведено сравнение экспериментальных и расчетных данных геометрического строения (длины связей S-S и S-H) полисульфидов. Показано (табл. 1), что квантово-химические приближения PBERBE/ $\Lambda$ 22 и CAM-B3LYP/aug-CC-pVTZ характеризуются наименьшим значением средне-квадратичного отклонения (rms.) между теоретическими и экспериментальными данными.

**Табл. 1.** Статистические характеристики квантово-химических методов, Å

Метод	min	max	avg.	rms.	min	max	avg.	rms.
«ПРИРОДА»	Нерелятивистский				Скалярно-релятивистский			
PBERBE/3 $\zeta$	0.021	0.043	0.034	0.034	–	–	–	–
PBERBE/ $\Lambda$ 2	0.021	0.037	0.031	0.032	0.021	0.037	0.031	0.032
PBERBE/ $\Lambda$ 3	0.021	0.037	0.031	0.031	0.021	0.037	0.031	0.031
PBERBE/ $\Lambda$ 22	0.021	0.037	0.030	0.030	0.021	0.037	0.030	0.030
PBERBE/ $\Lambda$ 33	0.020	0.037	0.029	0.030	0.021	0.037	0.029	0.030
«Gaussian»	6-311+G(d,p)				aug-CC-pVTZ			
PBERBE	0.021	0.047	0.034	0.035	0.021	0.037	0.031	0.032
TPSSTPSS	0.021	0.043	0.034	0.034	0.021	0.037	0.031	0.031
M06L	0.021	0.037	0.029	0.030	0.011	0.037	0.027	0.029
B3LYP	0.021	0.038	0.033	0.033	0.021	0.037	0.030	0.031
PBE1PBE	0.018	0.037	0.029	0.030	0.006	0.037	0.026	0.029
TPSSh	0.021	0.037	0.031	0.032	0.018	0.037	0.029	0.030
M06	0.021	0.037	0.030	0.031	0.014	0.037	0.028	0.029
LC- $\omega$ PBE	0.013	0.037	0.028	0.029	0.019	0.037	0.029	0.030
CAM-B3LYP	0.015	0.037	0.028	0.029	0.004	0.037	0.026	0.029
CCSD	0.021	0.037	0.030	0.031	0.014	0.037	0.035	0.033
	SVP				TZVP			
B3LYP	0.021	0.037	0.032	0.032	0.021	0.042	0.033	0.034
	6-31+G(d,p)				aug-CC-pVDZ			
B3LYP	0.021	0.039	0.033	0.033	0.021	0.045	0.034	0.035