

А.А. Иванова

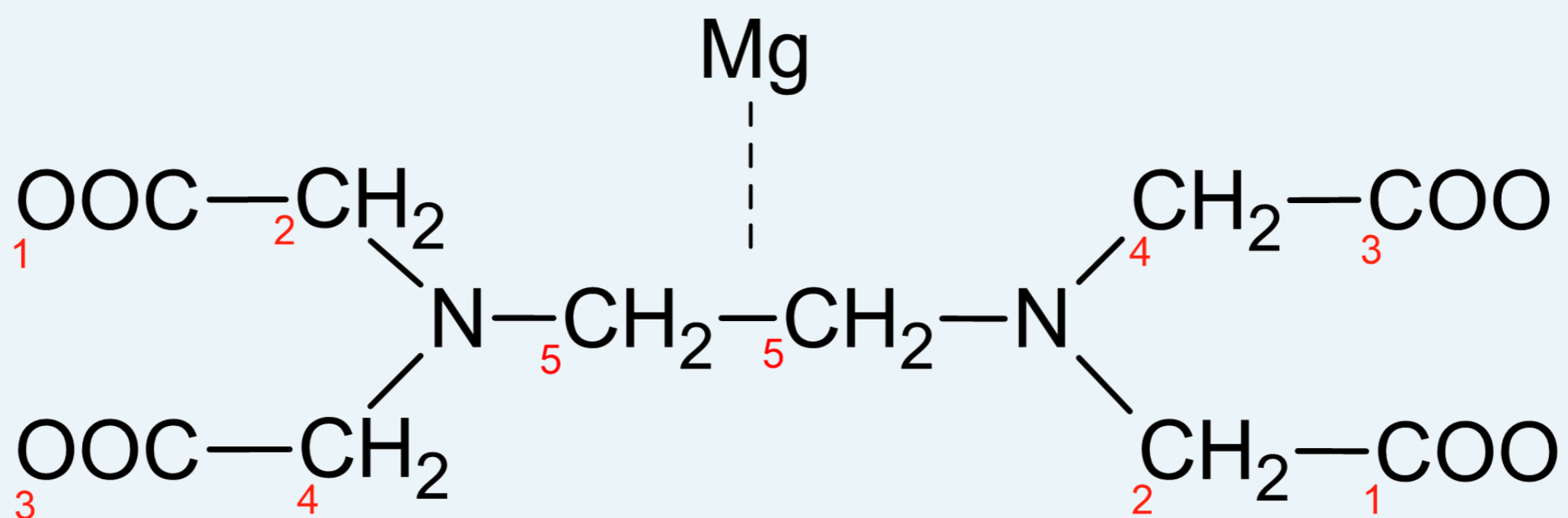
Интегральные электронные характеристики групп этилендиаминтетраацетата магния

Кафедра неорганической и аналитической химии ТвГУ
Руководитель Н.П. Русакова

e-mail: aaivanova4@edu.tversu.ru

Объект исследования: Комплекс этилендиаминтетраацетата магния.

Цель: Получение данных о распределении электронной плотности в комплексе этилендиаминтетраацетата магния.



Структура комплекса
этилендиаминтетраацетата магния

Результаты:

1COO	2CH ₂	N	3COO	4CH ₂	5CH ₂	Mg
Заряд, q (R)						
-0,865	0,299	-1,039	-0,879	0,305	0,306	1,743
Энергия, E (R)						
-188,631	-39,164	-55,226	-188,649	-39,181	-39,153	-200,145
Объем по контуру 0.001 а.е., V (R)						
308,70	151,02	61,28	308,75	149,10	151,32	36,69

Выводы: в ходе вычислений было выявлено, что отличия в значениях зарядов, энергии и объема по контуру между группами одинокого состава невелики.