

ISSN (Print) 2616-6836
ISSN (Online) 2663-1296

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

ХАБАРШЫСЫ

BULLETIN

of L.N. Gumilyov Eurasian
National University

ВЕСТНИК

Евразийского национального
университета имени Л.Н. Гумилева

ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

PHYSICS. ASTRONOMY Series

Серия **ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

№3(132)/2020

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Нұр-Сұлтан, 2020

Nur-Sultan, 2020

Нур-Султан, 2020

Бас редакторы:
ф.-м.ғ.д., профессор, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ
А.Т. Ақылбеков (Қазақстан)

Бас редактордың орынбасары

Гиниятова Ш.Г. ф.-м.ғ.к., доцент
Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ (Қазақстан)

Редакция алқасы

Арынгазин А.Қ.	ф.-м.ғ. докторы, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ(Қазақстан)
Алдонгаров А.А.	PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Балапанов М.Х.	ф.-м.ғ.д., проф., Башқұрт мемлекеттік университеті (Ресей)
Бахтизин Р.З.	ф.-м.ғ.д., проф., Башқұрт мемлекеттік университеті (Ресей)
Даулетбекова А.Қ.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Ержанов Қ.Қ.	ф.-м.ғ.к., PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Жүмаділов Қ.Ш.	PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Здоровец М.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ(Қазақстан)
Қадыржанов Қ.Қ.	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Кайнарбай А.Ж.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Козловский А.Л.	PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Кутербеков Қ.А.	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Лущик А.Ч.	ф.-м.ғ.д., проф., Тарту университеті (Эстония)
Попов А.И.	ф.-м.ғ.д., проф., Латвия университеті (Латвия)
Морзабаев А.К.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Мырзақұлов Р.Қ.	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ(Қазақстан)
Нұрахметов Т.Н.	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Сауытбеков С.С.	ф.-м.ғ.д., проф., Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ (Қазақстан)
Салиходжа Ж.М.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Скуратов В.А.	ф.-м.ғ.д., проф., Біріккен ядролық зерттеулер институты (Ресей)
Тлеуқенов С.К.	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Усеинов А.Б.	PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
Хоши М.	PhD, проф., Коши университеті (Жапония)
Шункеев Қ.Ш.	ф.-м.ғ.д., проф., Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе мемлекеттік университеті (Қазақстан)

Редакцияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Сәтбаев к-сі, 2, 402 б., Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті.
Тел.: +7(7172) 709-500 (ішкі 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Журнал менеджері: Г. Мендыбаева

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.
ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

Меншіктенуші: "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті" Коммерциялық емес акционерлік қоғам

Мерзімділігі: жылына 4 рет. Басуға 28.09.2020 ж. қол қойылды. Жазылу индексі: 76093

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігінде 27.03.2018ж.

№16999-ж тіркеу куәлігімен тіркелген.

Ашық қолданудағы электрондық нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz/>

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Қажымұқан к-сі, 12/1, 102 б., Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті. Тел.: +7(7172)709-500 (ішкі 31-428)

© Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті

Editor-in-Chief

Doctor of Phys.-Math. Sciences, Professor, ENU
A.T. Akilbekov (Kazakhstan)

Deputy Editor-in-Chief

Giniyatova Sh.G., Candidate of Phys.-Math. Sciences,
Assoc. Prof., ENU (Kazakhstan)

Editorial Board

Aryngazin A.K.	Doctor of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Aldongarov A.A.	PhD, ENU (Kazakhstan)
Balapanov M.Kh.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., BashSU (Russia)
Bakhtizin R.Z.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., BashSU (Russia)
Dauletbekova A.K.	Candidate of Phys.-Math. Sci., PhD, ENU (Kazakhstan)
Hoshi M.	PhD, Prof., Kyushu University (Japan)
Kadyrghanov K.K.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Kainarbay A.Zh.	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Kozlovskiy A.L.	PhD, ENU (Kazakhstan)
Kuterbekov K.A.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Lushchik A.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., University of Tartu (Estonia)
Morzabayev A.K.	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Myrzakulov R.K.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Nurakhmetov T.N.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Popov A.I.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., University of Latvia (Latvia)
Sautbekov S.S.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., KazNU (Kazakhstan)
Salikhodzha Z. M	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Skuratov V.A.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., Joint Institute for Nuclear Research (Russia)
Tleukenov S.K.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Useinov A.B.	PhD, ENU (Kazakhstan)
Yerzhanov K.K.	Candidate of Phys.-Math. Sci., PhD, ENU (Kazakhstan)
Zdorovets M.	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Zhumadilov K.Sh.	PhD, ENU (Kazakhstan)
Shunkeyev K.Sh.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., Zhubanov University (Kazakhstan)

Editorial address: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2, Satpayev str., of. 402,
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008
Tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Managing Editor: G. Mendybayeva

Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University.
PHYSICS. ASTRONOMY Series

Owner: Non-profit joint-stock company "L.N. Gumilyov Eurasian National University"

Periodicity: 4 times a year. Signed in print 28.09.2020. Subscription index: 76093

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan.

Registration certificate №16999-ж from 27.03.2018.

Available at: <http://bulphysast.enu.kz/>

Address of printing house: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 12/1 Kazhimukan str.,
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008;

tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)

Главный редактор:
доктор ф.-м.н., профессор
А.Т. Акилбеков, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)

Зам. главного редактора

Ш.Г. Гиниятова к.ф.-м.н., доцент
ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)

Редакционная коллегия

Арынгазин А.К.	д.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Алдонгаров А.А.	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Балапанов М.Х.	д.ф.-м.н., проф., БашГУ (Россия)
Бахтизин Р.З.	д.ф.-м.н., проф., БашГУ (Россия)
Даулетбекова А.К.	д.ф.-м.н., PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Ержанов К.К.	к.ф.-м.н., PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Жумадилов К.Ш.	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Здоровец М.	к.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Кадыржанов К.К.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Кайнарбай А.Ж.	к.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Козловский А.Л.	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Кутербек К.А.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Лущик А.Ч.	д.ф.-м.н., проф., Тартуский университет (Эстония)
Морзабаев А.К.	д.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Мырзакулов Р.К.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Нурахметов Т.Н.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Попов А.И.	д.ф.-м.н., проф., Латвийский университет (Латвия)
Сауытбеков С.С.	д.ф.-м.н., проф., КазНУ им. аль-Фараби (Казахстан)
Салиходжа Ж.М.	к.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Скуратов В.А.	д.ф.-м.н., проф., Объединенный институт ядерных исследований (Россия)
Тлеукиенов С.К.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Усеинов А.Б.	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Хоши М.	PhD, проф., Коши университет (Япония)
Шункеев К.Ш.	д.ф.-м.н., проф., АРГУ имени К. Жубанова (Казахстан)

Адрес редакции: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Сатпаева, 2, каб. 402, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева.

Тел.: (7172) 709-500 (вн. 31-428)

E-mail: vest_phys@enu.kz

Менеджер журнала: Г. Мендыбаева

Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева.

Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

Собственник Некоммерческое акционерное общество "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева"

Периодичность: 4 раза в год. Подписано в печать 28.09.2020 г. Подписной индекс: 76093

Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16999-ж от 27.03.2018г.

Электронная версия в открытом доступе: <http://bulphysast.enu.kz/>

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Кажимукана, 12/1, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева. тел.: +7(7172)709-500 (вн. 31-428)

Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ
ХАБАРШЫСЫ. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

№3(132)/2020

МАЗМҰНЫ

<i>Жасыбаева М.Б., Есмаханова К.Р.</i> Дарбу түрлендіруі және Фокас-Ленэллс теңдеуінің нақты бір солитонды шешімі	8
<i>Горлачев И., Глуценко Н., Иванов И., Киреев А., Курахмедов А., Платов А., Самбаев У., Здоровец М.</i> Нысаналы атомдарды ауыр иондармен қоздыруға арналған РІХЕ әдісінің шектері	14
<i>Ергалиев Д.С., Әбдірашев Ө.К., Жумабаева А.С.</i> Робототехникалық құрылғылар кешенін ақпараттық-метрологиялық қамтамасыз ету	25
<i>Қаптағай Г., Сандибаева Н., Байжадамова Л., Утебаева А.</i> Сутегін өндірудегі кобальт шпинелінің энергетикалық сипаттамаларын жақсартудағы азоттың рөлі	30
<i>Әбуова А.Ү., Инербаев Т.М., Әбуова Ф.Ү., Сазанбай А., Нураканов А.</i> Төмен өлшемді допирленген термоэлектрикте зарядтау динамикасы	36
<i>Ногай А.А., Стефанович С.Ю., Салиходжа Ж.М., Ногай А.С.</i> Қатты ерітінділеріндегі иондық өткізгіштік және фазалық ауысулар $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Yb}_{2x}(\text{PO}_4)_3$	44
<i>Ногай А.С., Ускенбаев Д.Е.</i> Платинасыз катализаторлары бар NaFon мембраналарында поляризациялық және өткізгіш қасиеттері	51
<i>Бимуханов А.Н., Алдонгаров А.А.</i> $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$ бейтарап гексакоординация кешенінің дұрыс геометриялық параметрлерін болжау үшін функционалдық үйлесімділік пен тығыздықтың функционалды теориясының негіз жиынтықтарын сынау	59
<i>Базарбек А.Б., Сағатов Н.Е., Инербаев Т.М., Ажилбеков А.Т.</i> Жоғары қысымда никель фосфидтерінің тұрақтылығын алғашқы принципті есептеу	67
<i>Карипбаев Ж.Т., Мусаханов Д.А., Лисицын В.М., Алпысова Г.К., Куженова А., Усеинов А.Б., Абдрахметова А.А., Байжуманов М.Ж.</i> Радиация өрісінде синтезделген YAG:Ce негізіндегі люминофорлардың импульстік фотолюминесценциясы	74

BULLETIN OF L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS.
ASTRONOMY SERIES

№3(132)/2020

CONTENTS

<i>Zhassybayeva M.B., Yesmakhanova K.R.</i> Darboux transformation and exact one-soliton solution of the Fokas-Lenells equation	8
<i>Gorlachev I., Gluchshenko N., Ivanov I., Kireev A., Kurakhmedov A., Platov A., Sambayev Ye., Zdorovets M.V.</i> The limits of the PIXE method for excitation of target atoms by heavy ions	14
<i>Yergaliyev D.S., Abdirashev O.K., Zhumabaeva A.S.</i> Information and metrological support for the complex of robotic devices	25
<i>Kaptagay G., Sandibaeva N., Baikadamova L., Utebaeva A.</i> Role of nitrogen for enhancement energetically characteristics in producing hydrogen	30
<i>Abuova A.U., Inerbaev T.M., Abuova F.U., Sazanbay A., Nurakanov A.</i> Charging dynamics in a low-dimensional doped thermoelectric	36
<i>Nogai A.A., Stefanovich S.Yu., Salikhodja J.M., Nogai A.S.</i> Ionic conductivity and phase transitions in solid solutions $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Yb}_{2x}(\text{PO}_4)_3$	44
<i>Nogai A.S., Uskenbayev D.E.</i> Polarizing and conductive properties in Nafion membranes with platinum-free catalysts	51
<i>Bimukhanov A.N., Aldongarov A.A.</i> Testing of combinations of Density Functional Theory functionals and basis sets for predicting correct geometrical parameters of neutral hexacoordinated $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$ complex	59
<i>Bazarbek A.B., Sagatov N.E., Inerbaev T.M., Akilbekov A.T.</i> First principle calculations of the stability of nickel phosphides at high pressures	67
<i>Karipbaev Zh., Musahanov D., Lisitsyn V., Alpyssova G., Kukenova A., Usseinov A., Abdrahmetova A., Baizhumanov M.</i> Pulsed photoluminescence of YAG: Ce phosphors synthesized in the radiation field	74

ВЕСТНИК ЕВРАЗИЙСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА
ИМЕНИ Л.Н.ГУМИЛЕВА. Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

№3(132)/2020

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Жасыбаева М.Б., Есмаханова К.Р.</i> Преобразование Дарбу и точное односолитонное решение уравнения Фокаса-Ленэлла	8
<i>Горлачев И., Глуценко Н., Иванов И., Киреев А., Курахмедов А., Платов А., Самбаев Е., Здоровец М.</i> Пределы определения РИХЕ метода при возбуждении атомов мишени тяжелыми ионами	14
<i>Ергалиев Д.С., Абдирашев О.К., Жумабаева А.С.</i> Информационно-метрологическое обеспечение комплекса робототехнических устройств	25
<i>Каптагай Г., Сандибаева Н., Байкадамова Л., Утебаева А.</i> Роль азота в совершенствовании энергетических характеристик шпинели кобальта для производства водорода	30
<i>Абуова А.У., Инербаев Т.М., Абуова Ф.У., Сазанбай А., Нураканов А.</i> Зарядовая динамика в низкоразмерном допированном термоэлектрике	36
<i>Ногай А.А., Стефанович С.Ю., Салиходжа Ж.М., Ногай А.С.</i> Ионная проводимость и фазовые переходы в твердых растворах $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Yb}_{2x}(\text{PO}_4)_3$	44
<i>Ногай А.С., Ускенбаев Д.Е.</i> Поляризационные и проводящие свойства в мембранах типа NaFоп с безплатиновыми катализаторами	51
<i>Бимуханов А.Н., Алдонгаров А.А.</i> Тестирование комбинаций функционалов и базисных наборов теории функционала плотности для предсказания правильных геометрических параметров нейтрального гексакоординационного комплекса $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$	59
<i>Базарбек А.Б., Сагатов Н.Е., Инербаев Т.М., Акилбеков А.Т.</i> Первопринципные расчеты стабильности фосфидов никеля при высоких давлениях	67
<i>Карипбаев Ж.Т., Мусаханов Д.А., Лисицын В.М., Алтысова Г.К., Куженова А., Усеинов А.Б., Абдрахметова А.А., Байжуманов М.Ж.</i> Импульсная фотолуминесценция синтезированных в поле радиации люминофоров на основе YAG:Ce	74

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы, 2020, том 132, №3, 59-66 беттер
<http://bulphysast.enu.kz>, E-mail: vest_phys@enu.kz

МРНТИ: 29.29.49

A.N. Bimukhanov, A.A. Aldongarov

*L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan
(E-mail: bimukhanov.92@gmail.com, enu-2010@yandex.kz)*

Testing of combinations of Density Functional Theory functionals and basis sets for predicting correct geometrical parameters of neutral hexacoordinated Si(bzimpy)₂ complex

Abstract: we present a study of geometrical parameters of the optimized cluster structure of hexacoordinated Si(bzimpy)₂ complex, containing the 2,6-bis(benzimidazol-2'-yl) pyridine ligand. The purpose of this work is benchmarking different basis sets and functionals to study the Si(bzimpy)₂. Computational studies were performed using functionals B3LYP, BHandHLYP and CAM-B3LYP and 6-311++g(d,p), cc-pVDZ and cc pVTZ basis sets. Obtained theoretical data of the geometric parameters were compared with the experimental values. On the ground of comparison of theoretical and experimental structural data it was shown that the theoretical method we have used describes Si(bzimpy)₂ silicon complex reasonably well.

Keywords: DFT method, hexacoordinate silicon, functional, basis set.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2020-132-3-59-66>

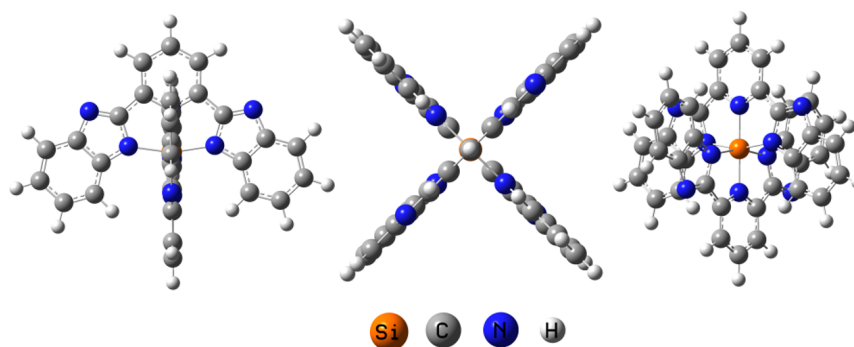
Received: 01.09.2020 / Accepted: 21.09.2020

Introduction. As early as 2018 Schmedake and co-workers reported on successful synthesis of silicon hexacoordinated Si(bzimpy)₂ complex. The interest in this structure is supported by the fact that Si(pincer)₂ complexes are a promising new class of metal chelates for organic electronic devices, and the rich synthetic diversity of dianionic pincer ligands should provide a number of desirable and tailorable complexes for electron transport and electroluminescence applications. In recent years, there has been a significant increase in the structural diversity of stable hexacoordinate silicon complex, especially ones containing N or O chelating ligands, and the bipyridine ligand is an especially well-known and important ligand for stabilizing hexacoordinate silicon complex [1].

Organic electronic devices have attracted significant attention over the last several decades as a potential low-cost, lightweight, flexible, semitransparent, and customizable solution for a wide variety of applications. The most researched device applications have been organic photovoltaics (OPVs) [2-5], organic light-emitting diodes (OLEDs) [6-9], and organic field-effect transistors (OFETs) [10-13]. Although organic materials are unlikely to outperform inorganic conductors or semiconductors, a number of qualities make them desirable alternatives. Organic molecules are produced through versatile synthetic routes involving inexpensive reactants and reaction conditions that only deviate slightly from ambient; by harnessing a vast array of well-established organic chemistries, the properties of these molecules can also be tuned systematically via post-synthesis derivatization and functionalization [14, 15]. Unlike materials traditionally used in electronics, organic molecules are often processed at or near room temperature. The promise of facile processing obviates the need for costly, high-temperature, high-vacuum deposition, and patterning procedures that inorganics require and could translate into immense capital and operational savings [16, 17].

In this paper, the object of study is the neutral hexacoordinated Si(bzimpy)₂ complex (Figure 1), containing the 2,6-bis(benzimidazol-2'-yl) pyridine ligand.

The previously obtained experimental data [1, 18, 19] in this area provide a prospect for further study in subsequent studies. The purpose of this work is to find a more suitable functionals and a basis sets that will describe Si(bzimpy)₂ silicon complex reasonably well.

Рисунок 1 – Optimized structures of $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$ complex

Calculation methods. DFT and TD DFT are the important tools in organic electronics. They are used to correlate experimental results with electronic structure calculations and theoretical physical properties to evolve new design strategies effectively [20-25].

All quantum-chemical calculations of the hexacoordinated $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$ complex have been carried out using density functional method, implemented in the Gaussian09 software package [26]. Nowadays, this method includes a wide range of different functional. Optimization of the structure was calculated using B3LYP, BHandHLYP and CAM-B3LYP, and 6-311++g(d,p) [27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35], cc-pVDZ [36, 37, 38] and cc-pVTZ [39, 40, 41] basis sets.

All calculations carried out using the computational resources of the National Scientific Laboratory for the shared use of information and Space Technologies at the K.I. Satpayev Kazakh National Research Technical University.

Results and discussion. Bond lengths and linear angles of optimized $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$ structure in all the functionals and basis sets are represented in Table 1. Figure 2 shows a simplified single structure for clarity of atomic numbers. All functionals show relatively close values. However, the method BHandHLYP/cc-pVTZ gives closest results to known experimental data.

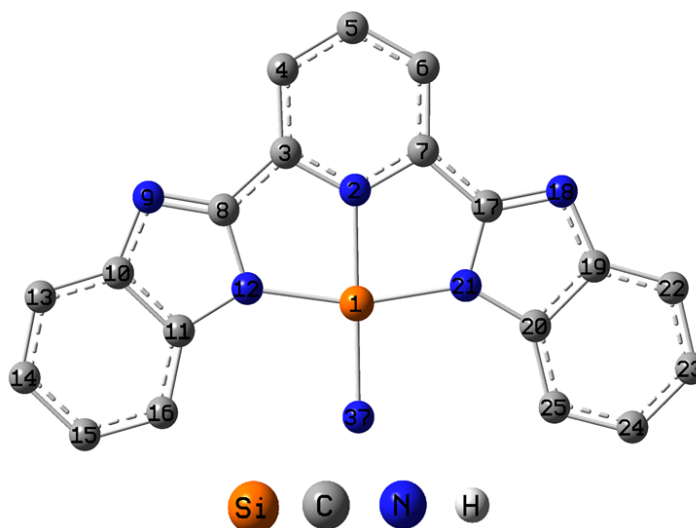


Рисунок 2 – Simplified single structure

The total spent time on optimizing the structure is 945 hours. The BHandHLYP/cc-pVDZ method showed the shortest time taken to complete the calculation, which is 14 hours. The most time spent on the optimization task was taken by the CAM-B3LYP method – 221 hours. From the obtained time data on the task execution, it can be noted that the speed of the calculation of the structure directly depends on the selected basis set. Regardless of the selected functional, the cc-pVDZ basis set is the fastest in terms of calculation of structure optimization, where the average optimization

time takes 17.3 hours. The basis set 6-311++g(d,p) took longer, the average time spent is 96.3 hours. The cc-pVTZ basis set took the most time – 201.3 hours.

Table 1

Bond lengths and linear angles of Si(bzimpy)₂ compound

Functional	B3LYP			experimental
Basis set	6-311++g(d,p)	cc-pVDZ	cc-pVTZ	
Atom number	Bond length (Å)			
Si1-N12	1.90425	1.91361	1.90291	1.8705
N12-C11	1.38127	1.3821	1.3782	1.364
C11-C16	1.40142	1.40585	1.39809	1.395
C16-C15	1.3867	1.39074	1.38287	1.367
C15-C14	1.41177	1.41573	1.40787	1.405
C14-C13	1.38337	1.38756	1.37956	1.387
C13-C10	1.40292	1.40727	1.3992	1.38
C10-N9	1.37468	1.37742	1.37209	1.395
N9-C8	1.31618	1.32086	1.31342	1.306
C8-C3	1.44434	1.44732	1.44111	1.47
C7-N2	1.35157	1.35394	1.34687	1.355
N2-Si1	1.89855	1.90717	1.89482	1.8745
	Linear angle			
N12-Si1-N21	163.379°	163.355°	163.435°	164.23°
Functional	BHandHLYP			experimental
Basis set	6-311++g(d,p)	cc-pVDZ	cc-pVTZ	
Atom number	Bond length (Å)			
Si1-N12	1.88275	1.89302	1.88148	1.8705
N12-C11	1.37248	1.37297	1.36938	1.364
C11-C16	1.39399	1.39792	1.39079	1.395
C16-C15	1.37564	1.37917	1.37193	1.367
C15-C14	1.40332	1.40691	1.39965	1.405
C14-C13	1.37294	1.37664	1.36929	1.387
C13-C10	1.39419	1.39815	1.39068	1.38
C10-N9	1.36749	1.36974	1.36495	1.395
N9-C8	1.29852	1.30284	1.29609	1.306
C8-C3	1.44378	1.44608	1.44058	1.47
C7-N2	1.33674	1.33909	1.33212	1.355
N2-Si1	1.88484	1.89435	1.8816	1.8745
	Linear angle			
N12-Si1-N21	163.511°	163.42°	163.548°	164.23°
Functional	CAM-B3LYP			experimental
Basis set	6-311++g(d,p)	cc-pVDZ	cc-pVTZ	
Atom number	Bond length (Å)			
Si1-N12	1.88835	1.8975	1.88698	1.8705
N12-C11	1.37794	1.3787	1.37489	1.364
C11-C16	1.39822	1.40268	1.39494	1.395
C16-C15	1.37909	1.38327	1.37536	1.367
C15-C14	1.40738	1.41143	1.40364	1.405
C14-C13	1.37656	1.38086	1.37287	1.387
C13-C10	1.39812	1.40255	1.39454	1.38
C10-N9	1.37427	1.37683	1.37164	1.395
N9-C8	1.3054	1.31004	1.30291	1.306

Table 1 (continued)

C8-C3	1.44871	1.45143	1.44531	1.47
C7-N2	1.34224	1.34464	1.33765	1.355
N2-Si1	1.89254	1.90096	1.88885	1.8745
Linear angle				
N12-Si1-N21	163.615°	163.615°	163.664°	164.23°

Conclusions. Here in we have studied experimental and theoretical data of the neutral hexacoordinated Si(bzimpy)₂ complex. We performed calculations to obtain the geometric parameters of the structure under consideration using the B3LYP, BHandHLYP and CAM-B3LYP functionals and using different basis sets. Obtained theoretical data of the geometric parameters were compared with the experimental values. On the ground of comparison of theoretical and experimental structural data it was shown that all methods we have used describe Si(bzimpy)₂ silicon complex reasonably well. However, we can say that the BHandHLYP functional with the cc-pVTZ basis set has the closest values to the experimental data. This work shows that computational methods can help in the further study of future structures, as well as predict the future parameters of as yet unexplored silicon complexes.

References

- Kocherga M., Castaneda J., Walter M.G., Zhang Y., Saleh N.-A., Wang L., Jones D.S., Merkert J., Donovan-Merkert B., Li Y., Hofmann T., Schmedake T.A. Si(bzimpy)₂ – a hexacoordinate silicon pincer complex for electron transport and electroluminescence // *Chem. Comm.* – 2018. – Vol. 54. – P. 14073-14076. DOI: 10.1039/c8cc07681b.
- Green M.A., Hishikawa Y., Warta W., Dunlop E.D., Levi D.H., Hohl-Ebinger J., Ho Baillie A.W.H. Solar cell efficiency tables (version 50) // *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* – 2017. – Vol. 25. – P. 668-676.
- Zhao W., Li S., Yao H., Zhang S., Zhang Y., Yang B., Hou J. Molecular Optimization Enables over 13 Efficiency in Organic Solar Cells // *J Am Chem Soc* – 2017. – Vol. 139. – P. 7148-7151.
- Kang H., Kim G., Kim J., Kwon S., Kim H., Lee K. Bulk-Heterojunction Organic Solar Cells: Five Core Technologies for Their Commercialization // *Adv Mater* – 2016. – Vol. 28. – P. 7821-7861.
- Hedley G.J., Ruseckas A., Samuel I.D. Light Harvesting for Organic Photovoltaics // *Chem Rev* – 2017. – Vol. 117. – №2. – P. 796-837.
- Tremblay J.-F. The rise of OLED displays // *C&EN* – 2016. – Vol. 94. – № 28. – P. 30-34.
- Kim Y., Choi C., Chen E.-C., Daniel A.G.S., Masurkar A., Schwartz T.H., Ma H., Kymissis I. An ultra thin implantable system for cerebral blood volume monitoring using flexible OLED and OPD // *Int. El. Devices Meet* – 2015. – P. 29.6.1-26.6.4.
- Man J.-X., He S.-J., Zhang T., Wang D.-K., Jiang N., Lu Z.-H. Black Phase-Changing Cathodes for High-Contrast Organic Light-Emitting Diodes // *ACS Photonics* – 2017. – Vol. 4. – P. 1316-1321.
- Levermore P., Schenk T., Tseng H.-R., Wang H.-J., Heil H., Jatsch A., Buchholz H., Bohm E. Ink-Jet-Printed OLEDs for Display Applications // *SID Int. Symp. Dig. Tec.* – 2016. – Vol. 47. – P. 484-486.
- Chow P.C.Y., Matsuhisa N., Zalar P., Koizumi M., Yokota T., Someya T. Dual-gate organic phototransistor with high-gain and linear photoresponse // *Nat. Commun.* – 2018. – Vol. 9. – № 1. – P. 4546.
- Ren H., Cui N., Tang Q., Tong Y., Zhao X., Liu Y. High-Performance, Ultrathin, Ultraflexible Organic Thin-Film Transistor Array Via Solution Process // *Small*. – 2018. – Vol. 14. – P. 1801020.
- Sekitani T., Yokota T., Kuribara K., Kaltenbrunner M., Fukushima T., Inoue Y., Sekino M., Isoyama T., Abe Y., Onodera H., Someya T. Ultraflexible organic amplifier with biocompatible gel electrodes // *Nat. Commun.* – 2016. – Vol. 7. – P. 11425.
- Wang S., Xu J., Wang W., Wang G.-J.N., Rastak R., Molina-Lopez F., Chung J.W., Niu S., Feig V.R., Lopez J., Lei T., Kwon S.K., Kim Y., Foudeh A.M., Ehrlich A., Gasperini A., Yun Y., Murmann B., Tok J.B.H., Bao Z. Skin electronics from scalable fabrication of an intrinsically stretchable transistor array // *Nature*. – 2018. – Vol. 555(7694). – P. 83-88.
- Loo Y.L., McCulloch I. Progress and challenges in commercialization of organic electronics // *MRS Bull.* – 2008. – Vol. 33. – №7. – P. 653-662.
- Loo Y.L. Solution-processable organic semiconductors for thin-film transistors: Opportunities for chemical engineers // *AIChE J.* – 2007. – Vol. 53. – P. 1066-1074.
- Lee K.S., Blanchet G.B., Gao F., Loo Y.-L. Direct patterning of conductive water-soluble polyaniline for thin-film organic electronics // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – Vol. 86. – P. 1-3.

- 17 Tarver J., Sezen-Edmonds M., Yoo J.E., Loo Y.-L. Organic Electronic Devices With Water-Dispersible Conducting Polymers // *Comprehensive Nanoscience and Nanotechnology*, 2nd edition. – 2019. – Vol. 5. – P. 1-34.
- 18 Ala'aeddeen S., P. Blake J. St. Onge, Justin F. B., Riccardo S., Neil B., Charles L. B. M. 2,6-Bis(benzimidazol-2-yl)pyridine complexes of group 14 elements // *Dalton Transactions*. – 2019. – Vol. 48. – P. 7835–7843. DOI: 10.1039/c9dt00995g.
- 19 Andrew Q., David J.W. The crystal structure of the complex salt: benzimidazolebenzimidazolium fluoroborate // *S. Can. J. Chem.* – 1976. – Vol. 54. – P. 2482.
- 20 Jen A.K., Rao V.P., Wong K.Y., Drost K.J. Functionalized Thiophenes: second-order nonlinear optical materials // *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* – 1993. – P. 90–92.
- 21 Janaki A., Balachandran V., Lakshmi A. First order molecular hyperpolarizabilities and intramolecular charge transfer from vibrational spectra of NLO material: 2,6-dichloro-4-nitroaniline // *Indian J. Pure Appl. Phys.* – 2013. – Vol. 51. – P. 601–614.
- 22 Garrett K, Sosa V.X., Egri S.B., Wilmer J., Johnson L.E., Robinson B.H., Isborn C.M. Optimum exchange for calculation of excitation energies and Hyperpolarizabilities of organic electro-optic Chromophores // *J. Chem. Theory Comput.* – 2014. – Vol. 10. – P. 3821–3831. – doi.org/10.1021/ct500528z.
- 23 Kinnibrugh T.L., Salman S., Getmanenko Y.A., Coropceanu V., Porter W.W. 3rd, Timofeeva T.V., Matzger A.J., Bredas J.L., Marder S.R., Barlow S. Dipolar second-order nonlinear optical Chromophores containing Ferrocene, Octamethylferrocene, and Ruthenocene donors and strong n-acceptors: crystal structures and comparison of n-donor strengths // *Organometallics*. – 2009. – Vol. 28. – P. 1350–1357. – doi.org/10.1021/om800986s.
- 24 Meyers F., Marder S.R., Pierce B.M., Bredas J.L. Electric field modulated nonlinear optical properties of donor-acceptor polyenes: sum-over-states investigation of the relationship between molecular polarizabilities (α , β , and γ) and bond length alternation // *J Am Chem Soc.* – 1994. – Vol. 116. – P. 10703–10714. – doi.org/10.1021/ja00102a040
- 25 Mao S.S., Ra Y., Guo L. et al. Progress toward device-quality second-order nonlinear optical materials. 1. Influence of composition and processing conditions on nonlinearity, temporal stability, and optical loss // *Chem Mater.* – 1998. – Vol. 10. – P. 146–155. – doi.org/10.1021/cm9702833.
- 26 Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian 09, Revision C.01. - Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.
- 27 McLean A.D., Chandler G.S., Contracted Gaussian-basis sets for molecular calculations. 1. 2nd row atoms, Z=11-18. // *J. Chem. Phys.* – 1980. – Vol. 72. – P. 5639-48.
- 28 Raghavachari K., Binkley J.S., Seeger R., Pople J.A. Self-Consistent Molecular Orbital Methods. 20. Basis set for correlated wave-functions // *J. Chem. Phys.* – 1980. – Vol. 72. – P. 650-54.
- 29 Blaudeau J.P., McGrath M.P., Curtiss L.A., Radom L. Extension of Gaussian-2 (G2) theory to molecules containing third-row atoms K and Ca // *J. Chem. Phys.* – 1997. – Vol. 107. – P. 5016-21.
- 30 Wachters A.J. Gaussian basis set for molecular wavefunctions containing third-row atoms // *J. Chem. Phys.* – 1970. – Vol. 52. – P. 1033.
- 31 Hay P.J. Gaussian basis sets for molecular calculations - representation of 3D orbitals in transition-metal atoms // *J. Chem. Phys.* – 1977. – Vol. 66. – P. 4377-84.
- 32 Raghavachari K., Trucks G.W. Highly correlated systems: Excitation energies of first row transition metals Sc-Cu // *J. Chem. Phys.* – 1989. – Vol. 91. – P. 1062-65.
- 33 Binning R.C. Jr., Curtiss L.A. Compact contracted basis-sets for 3rd-row atoms - GA-KR // *J. Comp. Chem.* – 1990. – Vol. 11. – P. 1206-16.
- 34 McGrath M.P., Radom L. Extension of Gaussian-1 (G1) theory to bromine-containing molecules // *J. Chem. Phys.* – 1991. – Vol. 94. – P. 511-16.
- 35 Curtiss L.A., McGrath M.P., Blaudeau J.P., Davis N.E., Binning R.C. Jr., Radom L. Extension of Gaussian-2 theory to molecules containing third-row atoms Ga-Kr // *J. Chem. Phys.* – 1995. – Vol. 103. – P. 6104-13.
- 36 Dunning T.H. Jr. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen // *J. Chem. Phys.* – 1989. – Vol. 90. – P. 1007-23.
- 37 Kendall R.A., Dunning T.H. Jr., Harrison R.J. Electron affinities of the first-row atoms revisited. Systematic basis sets and wave functions // *J. Chem. Phys.* – 1992. – Vol. 96. – P. 6796-806.
- 38 Woon D.E., Dunning T.H. Jr. Gaussian-basis sets for use in correlated molecular calculations. 3. The atoms aluminum through argon // *J. Chem. Phys.* – 1993. – Vol. 98. – P. 1358-71.
- 39 Peterson K.A., Woon D.E., Dunning T.H. Jr. Benchmark calculations with correlated molecular wave functions. IV. The classical barrier height of the $H+H_2 \rightleftharpoons H_2+H$ reaction // *J. Chem. Phys.* – 1994. – Vol. 100. – P. 7410-15.
- 40 Wilson A.K., Mourik van T., Dunning T.H. Jr. Gaussian Basis Sets for use in Correlated Molecular Calculations. VI. Sextuple zeta correlation consistent basis sets for boron through neon // *J. Mol. Struct. (Theochem)*. – 1996. – Vol. 388. – P. 339-49.
- 41 Davidson E.R. Comment on "Comment on Dunning's correlation-consistent basis sets" // *Chem. Phys. Lett.* – 1996. – Vol. 260. – P. 514-18.

А.Н. Бимуханов, А.А. Алдонгаров

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

Тестирование комбинаций функционалов и базисных наборов теории функционала плотности для предсказания правильных геометрических параметров нейтрального гексакоординационного комплекса Si(bzimpy)₂

Аннотация. Представлены результаты исследования геометрических параметров оптимизированной кластерной структуры гексакоординационного комплекса Si(bzimpy)₂, содержащего 2,6-бис(бензимидазол-2'-ил) пиридин лиганда. Целью данной работы является тестирование различных базисных наборов и функционалов для изучения Si(bzimpy)₂. Вычислительные исследования были выполнены с использованием функционалов B3LYP, BHandHLYP и CAM-B3LYP и базисных наборов 6-311++g(d,p), cc-pVDZ и cc-pVTZ. Полученные теоретические данные геометрических параметров сравнивали с экспериментальными значениями. На основании сопоставления теоретических и экспериментальных структурных данных было показано, что использованный теоретический метод достаточно хорошо описывает кремниевый комплекс Si(bzimpy)₂.

Ключевые слова: метод DFT, гексакоординационный кремний, функционал, базисный набор.

А.Н. Бимуханов, А.А. Алдонгаров

Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нур-Сұлтан, Қазақстан

Si(bzimpy)₂ бейтарап гексакоординация кешенінің дұрыс геометриялық параметрлерін болжау үшін функционалдық үйлесімділік пен тығыздықтың функционалды теориясының негіз жиынтықтарын сынау

Аннотация. Мақалада құрамында 2,6-бис(бензимидазол-2'-ил) пиридин лиганд бар Si(bzimpy)₂ гексакоординациялық кешенінің оңтайландырылған кластерлік құрылымының геометриялық параметрлерін зерттеу нәтижелері келтірілген. Бұл жұмыстың мақсаты - Si(bzimpy)₂ зерттеуге арналған әртүрлі базалық жиынтықтар мен функционалдық мүмкіндіктерді тексеру. Есептеу жұмыстары B3LYP, BHandHLYP және CAM-B3LYP функционалдары және 6-311++g(d,p), cc-pVDZ және cc-pVTZ негізгі жиынтықтарының көмегімен жүргізілді. Алынған геометриялық параметрлердің теориялық деректері тәжірибелік мәндермен салыстырылды. Теориялық және эксперименттік құрылымдық деректерді салыстыру негізінде қолданылған теориялық әдіс кремний Si(bzimpy)₂ кешенін жақсы сипаттайтындығы көрсетілген.

Түйін сөздер: DFT әдісі, гексакоординациялық кремний, функционалды, негіздер жиынтығы.

References

- Kocherga M., Castaneda J., Walter M.G., Zhang Y., Saleh N.-A., Wang L., Jones D.S., Merkert J., Donovan-Merkert B., Li Y., Hofmann T., Schmedake T.A. Si(bzimpy)₂ – a hexacoordinate silicon pincer complex for electron transport and electroluminescence, Chem. Comm., 54, 14073-14076 (2018).
- Green M.A., Hishikawa Y., Warta W., Dunlop E.D., Levi D.H., Hohl-Ebinger J., Ho Baillie A.W.H. Solar cell efficiency tables (version 50), Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 25, 668-676 (2017).
- Zhao W., Li S., Yao H., Zhang S., Zhang Y., Yang B., Hou J. Molecular Optimization Enables over 13
- Kang H., Kim G., Kim J., Kwon S., Kim H., Lee K. Bulk-Heterojunction Organic Solar Cells: Five Core Technologies for Their Commercialization, Adv. Mater., 28, 7821-7861 (2016).
- Hedley G.J., Ruseckas A., Samuel I.D. Light Harvesting for Organic Photovoltaics, Chem. Rev., 117(2), 796-837 (2017).
- Tremblay J.-F. The rise of OLED displays, C&EN, 94(28), 30-34 (2016).
- Kim Y., Choi C., Chen E.-C., Daniel A.G.S., Masurkar A., Schwartz T.H., Ma H., Kymissis I. An ultra thin implantable system for cerebral blood volume monitoring using flexible OLED and OPD, Int. El. Devices Meet., 29.6.1-26.6.4 (2015).
- Man J.-X., He S.-J., Zhang T., Wang D.-K., Jiang N., Lu Z.-H. Black Phase-Changing Cathodes for High-Contrast Organic Light-Emitting Diodes, ACS Photonics, 4, 1316-1321 (2017).
- Levermore P., Schenk T., Tseng H.-R., Wang H.-J., Heil H., Jatsch A., Buchholz H., Bohm E. Ink-Jet-Printed OLEDs for Display Applications, SID Int. Symp. Dig. Tec., 47, 484-486 (2016).
- Chow P.C.Y., Matsuhisa N., Zalar P., Koizumi M., Yokota T., Someya T. Dual-gate organic phototransistor with high-gain and linear photoresponse, Nat. Commun., 9(1), 4546 (2018).
- Ren H., Cui N., Tang Q., Tong Y., Zhao X., Liu Y. High-Performance, Ultrathin, Ultraflexible Organic Thin-Film Transistor Array Via Solution Process, Small., 14, 1801020 (2018).
- Sekitani T., Yokota T., Kuribara K., Kaltenbrunner M., Fukushima T., Inoue Y., Sekino M., Isoyama T., Abe Y., Onodera H., Someya T. Ultraflexible organic amplifier with biocompatible gel electrodes, Nat. Commun., 7, 11425 (2016).
- Wang S., Xu J., Wang W., Wang G.-J.N., Rastak R., Molina-Lopez F., Chung J.W., Niu S., Feig V.R., Lopez J., Lei T., Kwon S.-K., Kim Y., Foudeh A.M., Ehrlich A., Gasperini A., Yun Y., Murmann B., Tok J.B.H., Bao Z. Skin electronics from scalable fabrication of an intrinsically stretchable transistor array, Nature, 555(7694), 83-88 (2018).

- 14 Loo Y.-L., McCulloch I. Progress and challenges in commercialization of organic electronics, *MRS Bull.*, 33(7), 653–662 (2008).
- 15 Loo Y.-L. Solution-processable organic semiconductors for thin-film transistors: Opportunities for chemical engineers, *AIChE J.*, 53, 1066–1074 (2007).
- 16 Lee K.S., Blanchet G.B., Gao F., Loo Y.-L. Direct patterning of conductive water-soluble polyaniline for thin-film organic electronics, *Appl. Phys. Lett.*, 86, 1–3 (2005).
- 17 Tarver J., Sezen-Edmonds M., Yoo J.E., Loo Y.-L. Organic Electronic Devices With Water-Dispersible Conducting Polymers, *Comprehensive Nanoscience and Nanotechnology*, 2nd edition, 5, 1-34 (2019).
- 18 Ala'aeddeen S., P. Blake J. St. Onge, Justin F. B.r, Riccardo S., Neil B., Charles L. B. M. 2,6-Bis(benzimidazol-2-yl)pyridine complexes of group 14 elements, *Dalton Transactions*, 48, 7835–7843 (2019).
- 19 Andrew Q., David J.W. The crystal structure of the complex salt: benzimidazolebenzimidazolium fluoroborate, *S. Can. J. Chem.*, 54, 2482 (1976).
- 20 Jen A. K., Rao V. P., Wong K. Y., Drost K. J. Functionalized Thiophenes: second-order nonlinear optical materials, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 90–92 (1993).
- 21 Janaki A., Balachandran V., Lakshmi A. First order molecular hyperpolarizabilities and intramolecular charge transfer from vibrational spectra of NLO material: 2,6-dichloro-4-nitroaniline, *Indian J. Pure Appl. Phys.*, 51, 601–614 (2013).
- 22 Garrett K, Sosa V. X., Egri S. B., Wilmer J., Johnson L. E., Robinson B. H., Isborn C. M. Optimum exchange for calculation of excitation energies and Hyperpolarizabilities of organic electro-optic Chromophores, *J. Chem. Theory Comput.*, 10, 3821–3831 (2014).
- 23 Kinnibrugh T. L., Salman S., Getmanenko Y. A., Coropceanu V., Porter W. W. 3rd, Timofeeva T. V., Matzger A. J., Bredas J. L., Marder S. R., Barlow S. Dipolar second-order nonlinear optical Chromophores containing Ferrocene, Octamethylferrocene, and Ruthenocene donors and strong n-acceptors: crystal structures and comparison of n-donor strengths, *Organometallics*, 28, 1350–1357 (2009).
- 24 Meyers F., Marder S. R., Pierce B. M., Bredas J. L. Electric field modulated nonlinear optical properties of donor-acceptor polyenes: sum-over-states investigation of the relationship between molecular polarizabilities (α , β , and γ) and bond length alternation, *J. Am. Chem. Soc.*, 116, 10703–10714 (1994).
- 25 Mao S. S. H., Ra Y., Guo L. et al. Progress toward device-quality second-order nonlinear optical materials. 1. Influence of composition and processing conditions on nonlinearity, temporal stability, and optical loss, *Chem. Mater.*, 10, 146–155 (1998).
- 26 Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. Gaussian 09, Revision C.01 Gaussian, Inc., Wallingford CT (2010).
- 27 McLean A. D., Chandler G. S., Contracted Gaussian-basis sets for molecular calculations. 1. 2nd row atoms, Z=11-18., *J. Chem. Phys.*, 72, 5639-48 (1980).
- 28 Raghavachari K., Binkley J. S., Seeger R., Pople J. A. Self-Consistent Molecular Orbital Methods. 20. Basis set for correlated wave-functions, *J. Chem. Phys.*, 72, 650-54 (1980).
- 29 Blaudeau J.-P., McGrath M. P., Curtiss L. A., Radom L. Extension of Gaussian-2 (G2) theory to molecules containing third-row atoms K and Ca, *J. Chem. Phys.*, 107, 5016-21 (1997).
- 30 Wachters A. J. H. Gaussian basis set for molecular wavefunctions containing third-row atoms, *J. Chem. Phys.*, 52, 1033 (1970).
- 31 Hay P. J. Gaussian basis sets for molecular calculations - representation of 3D orbitals in transition-metal atoms, *J. Chem. Phys.*, 66, 4377-84 (1977).
- 32 Raghavachari K., Trucks G. W. Highly correlated systems: Excitation energies of first row transition metals Sc-Cu, *J. Chem. Phys.*, 91, 1062-65 (1989).
- 33 Binning R. C. Jr., Curtiss L. A. Compact contracted basis-sets for 3rd-row atoms - GA-KR, *J. Comp. Chem.*, 11, 1206-16 (1990).
- 34 McGrath M. P., Radom L. Extension of Gaussian-1 (G1) theory to bromine-containing molecules, *J. Chem. Phys.*, 94, 511-16 (1991).
- 35 Curtiss L. A., McGrath M. P., Blaudeau J.-P., Davis N. E., Binning R. C. Jr., Radom L. Extension of Gaussian-2 theory to molecules containing third-row atoms Ga-Kr, *J. Chem. Phys.*, 103, 6104-13 (1995).
- 36 Dunning T. H. Jr. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen, *J. Chem. Phys.*, 90, 1007-23 (1989).
- 37 Kendall R. A., Dunning T. H. Jr., Harrison R. J. Electron affinities of the first-row atoms revisited. Systematic basis sets and wave functions, *J. Chem. Phys.*, 96, 6796-806 (1992).
- 38 Woon D. E., Dunning T. H. Jr. Gaussian-basis sets for use in correlated molecular calculations. 3. The atoms aluminum through argon, *J. Chem. Phys.*, 98, 1358-71 (1993).
- 39 Peterson K. A., Woon D. E., Dunning T. H. Jr. Benchmark calculations with correlated molecular wave functions. IV. The classical barrier height of the H+H2 @ H2+H reaction, *J. Chem. Phys.*, 100, 7410-15 (1994).
- 40 Wilson A. K., Mourik van T., Dunning T. H. Jr. Gaussian Basis Sets for use in Correlated Molecular Calculations. VI. Sextuple zeta correlation consistent basis sets for boron through neon, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 388, 339-49 (1996).
- 41 Davidson E.R. Comment on "Comment on Dunning's correlation-consistent basis sets", *Chem. Phys. Lett.*, 260, 514-18, (1996).

Information about authors:

Бимуханов А.Н.- негізгі автор, Физика-техникалық факультетінің докторанты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 22, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Алдонгаров А.А.- PhD, доцент, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 22, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Bimukhanov A.N. – main author, PhD student of the Faculty of Physics and Technology, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhymukan Munaitpasov st., 22, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Aldongarov A.A. - PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhymukan Munaitpasov st., 22, Nur-Sultan, Kazakhstan.