

Квантово-химическое исследование геометрии и колебательных спектров водородосвязанных ассоциатов ароматических уретанов

© Сучкова Галина Григорьевна⁺ и Маклаков Лев Иванович*

Кафедра физики. Казанский государственный архитектурно-строительный университет.

Ул. Зеленая, 1. г. Казань, 420043. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 510-47-38. E-mail: galinasd@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ароматические уретаны, квантово-химические расчеты, молекулярная структура, колебательные спектры.

Аннотация

Теория функционала плотности DFT (B3LYP) уровня с базисом 6-31G(d) применялась, как эффективный путь для расчета частот "амидных" полос нескольких простых ароматических уретанов. Были обнаружены полосы, относящиеся к *цис*- и *транс*-конформерам ароматических нафтилуретанов. Были рассчитаны структура, гармонические частоты и их интенсивности водородосвязанных димеров этих соединений. Рассчитанные спектры димеров находятся в хорошем соответствии с экспериментальными спектрами растворов.