

Квантово-химическое изучение молекулярной структуры и колебательных спектров метилнитрита

© Шайхуллина Равия Масгутовна,¹⁺ Храпковский Григорий Михайлович,^{2*} Зверева Елена Евгеньевна³ и Мазилев Елисей Александрович⁴

¹ Кафедра физики. Камская государственная инженерно-экономическая академия. Пр. Мира, 68/19. г. Набережные Челны, 423810. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (855) 258-95-36. E-mail: raviya1@yandex.ru

² Кафедра катализа. Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-53.

³ Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. акад. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 275-18-92.

⁴ Отдел компьютерной химии. Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68, г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-53.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: метилнитрит, квантовая химия, молекулярная структура, конформации, колебательные спектры.

Аннотация

Представлены данные теоретического анализа колебательных спектров *цис*- и *транс*-конформаций метилнитрита современными неэмпирическими квантово-химическими методами, а также методами теории функционала плотности (*B3LYP*, *MP2*, *MP3*, *G2*) в базисах (6-31G(*d*) и 6-311++G(*df,p*)). Установлен наиболее подходящий метод расчета частот и форм нормальных колебаний на основе статистической обработки результатов эксперимента и расчета. Определены спектральные особенности конформационного состояния метилнитрита, эффекты образования внутримолекулярных водородных связей.