

Квантово-химическое исследование силового поля нитрометана в координатах X_{δ}^0

© **Белик Александр Васильевич*** и **Федотова Екатерина Игоревна⁺**

Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский государственный университет. Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 45001. Россия.

Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: belik@csu.ru, fdot@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *силовое поле, нитрометан, координаты X_{δ}^0 , квантово-химические расчеты.*

Аннотация

В рамках метода DFT впервые вычислена матрица силовых коэффициентов нитрометана в координатах X_{δ}^0 . Показаны особенности данного подхода по отношению к традиционным.