

Краткое сообщение

Регистрационный код публикации: 12-29-1-44

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.162.7. Поступила в редакцию 27 декабря 2011 г.

Тематический раздел: Квантовая химия.

Подраздел: Органическая химия.

Галогенпроизводные нитрометана: строение, силовые поля с использованием координат X_{δ}^0

© Федотова Екатерина Игоревна⁺ и Белик Александр Васильевич*

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, координаты X_{δ}^0 , квантово-химические расчеты (DFT), геометрия молекулы, жесткость связи.

Аннотация

Рассмотрено электронное строение соединений, являющихся галогенпроизводными нитрометана. Вычислены матрицы силовых коэффициентов в декартовой системе координат и в координатах X_{δ}^0 с использованием подхода DFT. Представлены обобщенные силовые постоянные «векторов связей», полученные в координатах X_{δ}^0 , когда выбранная система «векторов связей» совпадает с традиционными химическими связями в соединениях.