

Нитросоединения: строение, силовые коэффициенты в координатах X_δ^0 и частоты нормальных колебаний NO_2 -группы

© Федотова⁺ Екатерина Игоревна и Белик* Александр Васильевич

Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский государственный университет. Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия.

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

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нитросоединения, силовые коэффициенты, координаты X_δ^0 , квантово-химические расчеты (DFT), геометрия молекул, частоты нормальных колебаний.

Аннотация

Рассмотрено геометрическое строение ряда C- и N-нитросоединений. Вычислены матрицы силовых коэффициентов в декартовой системе координат и в координатах X_δ^0 с использованием подхода DFT (B3LYP/6-31(d,p)). Представлены обобщенные силовые коэффициенты «векторов связей», (координаты X_δ^0). Определены частоты нормальных колебаний, характерных для фрагмента X-NO₂, где X = C,N.