

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 14-40-11-84 Подраздел: Физическая химия.
Статья публикуется по материалам доклада на “Международном научном форуме
Бутлеровское наследие – 2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 544.162.7. Поступила в редакцию 29 декабря 2014 г.

Решение спектральной задачи для молекул NH_2NO_2 , CH_3NO_2 и N_2O_4 в координатах X_8^0

© 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

Ключевые слова: молекулы NH_2NO_2 , CH_3NO_2 , N_2O_4 , обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_8^0 , расчеты DFT, частоты нормальных колебаний.

Аннотация

В рамках метода функционала плотности с гибридным потенциалом B3LYP 6-311++G(3df,3pd) впервые получено силовое поле молекул NH_2NO_2 , CH_3NO_2 и N_2O_4 в координатах X_8^0 . Вычислены частоты нормальных колебаний. Отмечены изменения обобщенных силовых коэффициентов связей в зависимости от природы молекул.