

Обобщенные силовые коэффициенты молекулы гидразина

© **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: гидразин, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_8^0 , расчеты DFT, частоты нормальных колебаний.

Аннотация

В рамках подхода B3LYP 6-311++G(3df,3pd) впервые получено силовое поле молекулы гидразина в координатах X_8^0 . Вычислены частоты нормальных колебаний. Проведено сравнение полученных обобщенных силовых коэффициентов с таковыми молекулы тетрафторгидразина.

Введение

Гидразин (N_2H_4) или диамид [1], можно считать простейшим представителем большого класса органических и неорганических соединений, имеющих в своей структуре связь N-N. В связи с этим, важное значение имеет определение ряда физических параметров (констант) этого соединения, например, таких как силовые коэффициенты. Поскольку естественные координаты [2-5] не являются универсальными, как это отмечают авторы работ [6, 7], то можно обратиться к координатам X_8^0 [6-13]. Настоящая работа посвящена расчету силовых коэффициентов гидразина в рамках подхода DFT [14, 15] B3LYP/6-311++G(3df,3pd). Как показали предыдущие расчеты [16], использованный базис позволяет получить достоверную оценку рассматриваемым параметрам.