

Решение спектральной задачи для молекулы 4-нитробензофуроксана 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: 4-нитробензофуроксан, 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 молекулы 4-нитробензофуроксана в координатах X_8^0 . Найдены обобщенные силовые коэффициенты, вычислены частоты нормальных колебаний и проведено их отнесение к определенным видам колебаний.