

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROl: jbc-01/15-42-5-152 Подраздел: Органическая химия.
Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном
форуме “Бутлеровское наследие-2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 543.42;530.145. Поступила в редакцию 27 апреля 2015 г.

Квантово-химическое изучение молекулярной структуры и колебательных спектров метилнитрата и этилнитрата

© Шайхуллина¹⁺ Равия Масгутовна, Храпковский^{2*} Григорий Михайлович
и Зверева Елена Евгеньевна³

¹ Кафедра физики. Набережночелнинский институт (филиал) Казанского Приволжского
федерального университета. Пр. Мира, 68/19. г. Набережные Челны, 423810. Республика Татарстан.
Россия. Тел.: (855) 258-95-36. E-mail: raviya1@yandex.ru

² Кафедра катализа. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-53.

³ Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН.
Ул. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-18-92.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: метилнитрат, этилнитрат, квантовая химия, молекулярная
структура, конформации, колебательные спектры.

Аннотация

Представлены данные теоретического анализа колебательных спектров метилнитрата, *транс*- и *гош*-конформаций этилнитрата, полученные с использованием методов теории функционала плотности (B3LYP/6-31G(d)). Установлены энергетически наиболее выгодные структуры метилнитрата и этилнитрата, рассчитаны соответствующие этим структурам частоты и формы нормальных колебаний. Выявлены спектральные особенности конформационного состояния метил-, этилнитрата, а также эффекты образования внутримолекулярных водородных связей.