

Решение колебательной задачи для молекул фуроксана и диметилфуроксана в координатах X_8^0 с оценкой силового поля в рамках DFT

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

Аннотация

В рамках метода функционала плотности B3LYP 6-311++G(3df,3pd) впервые получено силовое поле молекулы фуроксана и диметилфуроксана в координатах X_8^0 . Найдены обобщенные силовые коэффициенты связей, вычислены частоты нормальных колебаний и проведено их отнесение к определенным видам колебаний.