

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROl: jbc-01/16-45-2-148 Подраздел: Физическая органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.162.7. Поступила в редакцию 01 марта 2016 г.

Решение колебательной задачи для молекул бензола и бензофуроксана 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: бензол, бензофуроксан, 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 бензола и бензофуроксана в координатах X_8^0 . Вычислены обобщенные силовые коэффициенты связей в этих молекулах, частоты нормальных колебаний и проведено их отнесение к определенным видам колебаний. Найдено, что обобщенные силовые коэффициенты связей являются более эффективной характеристикой изменений в параметрах молекул в зависимости от природы соединений по отношению к их геометрической структуре. Наиболее интенсивная полоса в спектре бензофуроксана имеет значение 1663 см^{-1} , что соответствует асимметричным валентным колебаниям связей C-N, связи N→O и связей C-C бензольного ядра.