

**Полная исследовательская публикация** Тематический раздел: Квантово-химические исследования.  
Регистрационный код публикации: 13-34-4-90 Подраздел: Неорганическая 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 8 апреля 2013 г.

## Теоретическая оценка силового поля перфторгидразина

© 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:** перфторгидразин, силовые коэффициенты, координаты  $X_\delta^0$ , квантово-химические расчеты (DFT), геометрия молекул, частоты нормальных колебаний.

### Аннотация

Впервые получено силовое поле молекулы тетрафторгидразина в координатах  $X_\delta^0$ . Для этого проведены квантово-химические расчеты B3LYP 6-311 G++(3df,3pd) и полученная матрица силовых коэффициентов переведена из декартовых координат во внутренние координаты. В результате появилась возможность анализа силовых коэффициентов связей. Вычислены частоты нормальных колебаний и проведено их отнесение.