

Обобщенные силовые коэффициенты молекул NF_3 и ONF_3 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: молекулы NF_3 , ONF_3 , 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 молекул NF_3 и ONF_3 в координатах X_8^0 . Вычислены частоты нормальных колебаний. Отмечены изменения обобщенных силовых коэффициентов связей в зависимости от природы молекул.