

Д.С. Савельев, М.К. Исляйкин, Г.В. Гиричев

Денис Сергеевич Савельев (✉), Георгий Васильевич Гиричев (✉)
Кафедра физики, Ивановский государственный химико-технологический университет,
просп. Шереметевский, 7, Иваново, Российская Федерация, 153000
E-mail: Iv_den_ru@mail.ru (✉), g.v.girichev@mail.ru (✉)

Михаил Константинович Исляйкин
Кафедра технологии тонкого органического синтеза, Ивановский государственный химико-
технологический университет, просп. Шереметевский, 7, Иваново, Российская Федерация, 153000
E-mail: islyaikin@isuct.ru

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ 3-АМИНОФТАЛОНИТРИЛА

Получены и интерпретированы с помощью квантово-химических расчетов, выполненных на разных теоретических уровнях, ИК спектры 3-аминофталонитрила (3-АФН) в твердой фазе. Сопоставление экспериментальных и рассчитанных ИК спектров показывает существенную неоднозначность квантово-химических методов в предсказании колебательного спектра в низкочастотной области и особенностей геометрического строения молекулы 3-АФН.

Ключевые слова: колебательные спектры, молекулярная структура, электронография, квантово-химические расчеты

D.S. Saveliev, M.K. Islyaikin, G.V. Girichev

Denis S. Saveliev (✉), Georgiy V. Girichev (✉)
Department of Physics, Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Sheremetiev ave., 7,
Ivanovo, Russia, 153000
E-mail: Iv_den_ru@mail.ru (✉), g.v.girichev@mail.ru (✉)

Mikhail K. Islyaikin
Department of Fine Organic Synthesis, Ivanovo State University of Chemistry and Technology,
Sheremetiev ave., 7, Ivanovo, Russia, 153000
E-mail: islyaikin@isuct.ru

VIBRATIONAL SPECTRA OF 3-AMINOPHTHALONITRILE

The IR spectra of 3-aminophthalonitrile (3-AFN) were obtained for solid phase. The experimental spectra were assigned using quantum chemical calculations of different level. Comparison of experimental and calculated spectra shows a significant ambiguity of different quantum chemical methods for predicting vibration spectrum in low-frequency range and peculiarities of 3-AFN molecule structure.

Key words: vibrational spectra, molecular structure, electron diffraction method, quantum chemical calculations

ВВЕДЕНИЕ

Аминофталонитрилы обладают в растворе уникальными флуоресцентными свойствами, среди которых одним из наиболее важных является так называемая двойная флуоресценция в полярных растворителях, активно изучаемая в последнее десятилетие [1]. Эти вещества представляются перспективным материалом при производстве тонкопленочных солнечных батарей [2], а также находят широкое применение в синтетической химии.

Настоящая работа посвящена ИК-спектроскопическому исследованию колебательного спектра и геометрического строения 3-аминофталонитрила и их теоретическому моделированию с помощью разных квантово-химических методов.

Геометрическое и электронное строение молекул в совокупности с их ядерной динамикой определяет весь комплекс физико-химических свойств веществ. Поэтому получение и интерпретация электронных и колебательных спектров веществ в разных агрегатных состояниях является важной научной задачей.

Как показал анализ литературы, экспериментально молекулярная структура и колебательные спектры 3-аминофталонитрила до настоящего времени остаются практически не изученными. Единственным экспериментальным исследованием колебательного спектра 3-АФН является работа [3], в которой зарегистрирована полоса в ИК спектрах таблетки, полученной растиранием и прессованием 3-АФН с бромидом калия, а также раствора 3-АФН в хлороформе, отвечающая валентным колебаниям связей $C\equiv N$. Также в качестве единственного известного нам квантово-химического исследования свободной молекулы 3-АФН можно назвать работу [2], в которой методом DFT/V3LYP с базисным набором 6-311++G(d,p) рассчитаны ее структура и колебательный спектр.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Препарат 3-аминофталонитрил (3-АФН) синтезирован посредством восстановления 3-нитрофталонитрила хлористым оловом в соляной кислоте и обработан метилатом натрия в соответствии с методикой [4].

ИК спектры твердого 3-АФН были получены с использованием Фурье-спектрометра Avatar 360-FT-IR ESP в диапазоне частот от 400 до 4000 cm^{-1} при комнатной температуре. Спектры регистриро-

вались для таблеток, полученных растиранием исследуемого вещества с KBr и последующим прессованием.

Квантово-химические расчеты геометрического строения и частот колебаний молекулы 3-АФН были выполнены по программе Gaussian 09 [5] методом DFT с использованием функционалов V3LYP [6], CAM-B3LYP [7], 1c-wPBE [8], M06 [9], M06-2X [9], а также методом MP2 [10]. В расчетах использовались базисные наборы 6-31++G**[11], 6-311++G**[11], cc-pVTZ [12] и aug-cc-pVTZ [12], заимствованные из базы [13].

Визуализация геометрической структуры молекул и ИК спектров выполнялась с помощью программы ChemCraft [14].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Структура молекулы 3-АФН с нумерацией атомов представлена на рис. 1.

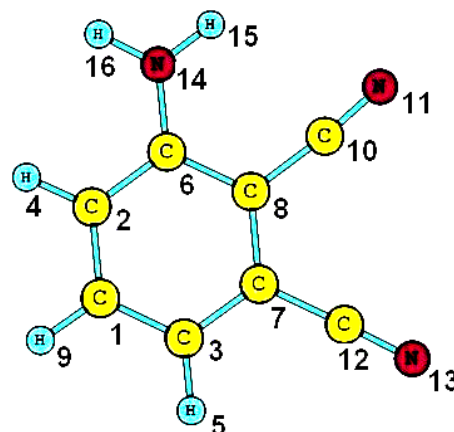


Рис. 1. Геометрическая модель молекулы 3-АФН с нумерацией атомов

Fig. 1. Molecular structure of 3-APN with atom numbering

На рис. 2 экспериментальный ИК спектр 3-АФН в таблетке KBr сопоставлен со спектрами индивидуальной молекулы 3-АФН, рассчитанными разными методами, а в табл. 1 и 2 приведены частоты с указанием распределения потенциальной энергии нормальных колебаний по внутренним координатам. При сопоставлении спектров следует учесть, что вследствие коллективных взаимодействий в кристалле экспериментальный спектр может несколько отличаться от спектра молекулы в газовой фазе, и это обстоятельство может внести дополнительный вклад в отличие расчетного положения пиков от экспериментального, вызванного неточностью соответствующего теоретического метода.

Сопоставляя рассчитанные спектры с экспериментальным, можно отметить, что в диапа-

зоне частот выше 700 см^{-1} , в целом, между ними наблюдается качественное согласие, за исключением интенсивностей полос симметричного и антисимметричного валентных колебаний связей $\text{C}\equiv\text{N}$, которые велики для всех методов расчета, кроме метода MP2 с обоими использованными базисными наборами. Анализ форм нормальных колебаний показывает, что обе частоты в районе 2200 см^{-1} , отвечающие этим полосам, имеют примерно те же значения, что и в случае других методов, и описываются в основном колебаниями связей $\text{C}\equiv\text{N}$. Однако по методу MP2 эти колебания сильно смешаны и могут быть охарактеризованы как псевдосимметричные и псевдоасимметричные. В то же время другие методы расчета показывают, что колебания связей $\text{C}\equiv\text{N}$ хорошо отделяются друг от друга. При этом ни один из использованных методов расчета не имеет преимущества перед другими в отношении точности

предсказания частот колебаний. Но следует отметить, что все величины рассчитанных частот колебаний в диапазоне выше 700 см^{-1} систематически выше экспериментальных.

Отметим, что использование единых для всего спектрального диапазона масштабирующих коэффициентов, рекомендуемых для соответствующих сочетаний метод/базис [15], в целом улучшает согласие предсказываемых частот с экспериментальными, но оставляет это различие на уровне, существенно превышающем погрешность спектроскопического эксперимента.

Анализируя рассчитанные спектры в области ниже 700 см^{-1} , можно отметить лишь их катастрофическое различие, но отдать предпочтение тому или иному варианту расчета на основе экспериментального спектра нельзя вследствие ограниченного спектрального диапазона, в котором он зарегистрирован.

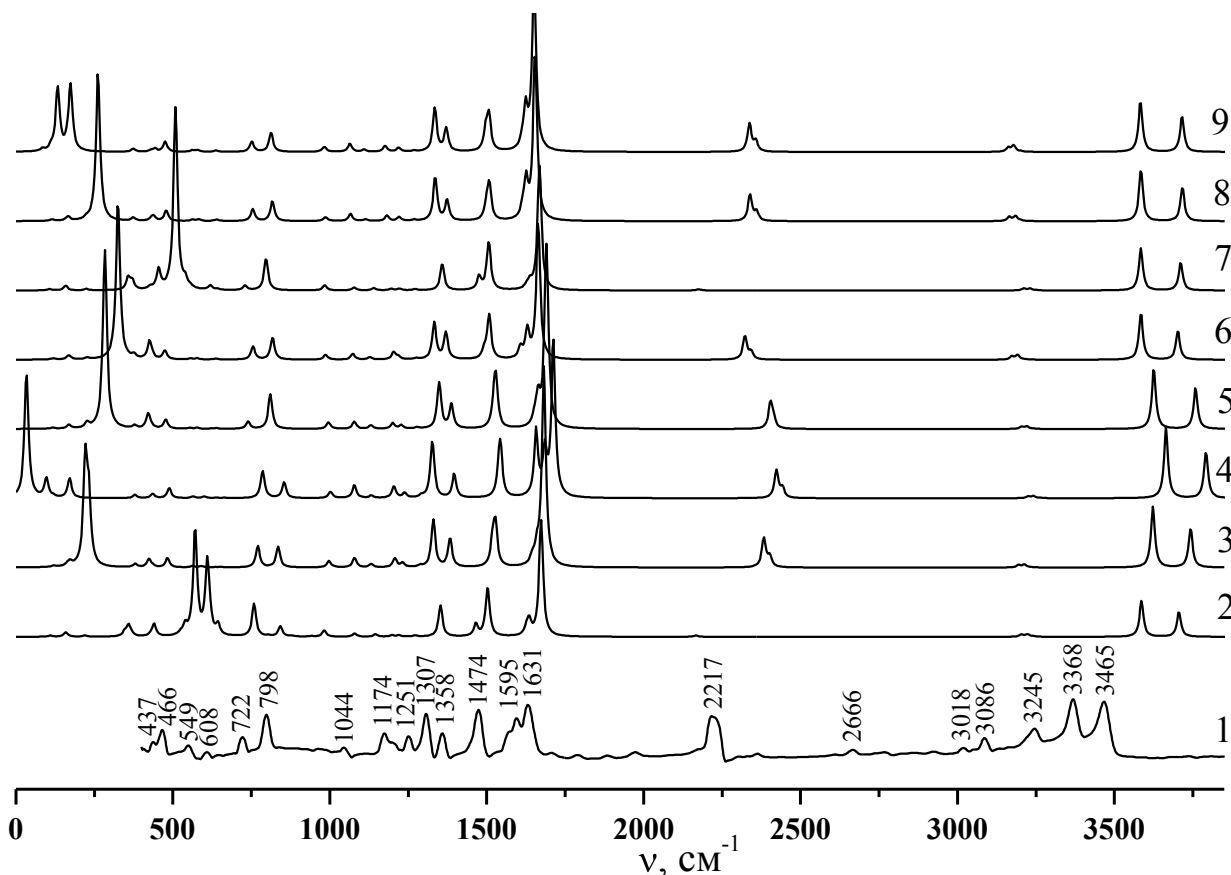


Рис. 2. Экспериментальный ИК спектр 3-АФН (1) и спектр свободной молекулы 3-АФН, рассчитанный различными методами: 2 – MP2/6-311++G**; 3 – CAM-B3LYP/6-311++G**; 4 – LC-wPBE/6-311++g**; 5 – M06-2X/6-311++G**; 6 – B3LYP/cc-pVTZ; 7 – MP2/cc-pVTZ; 8 – M06/cc-pVTZ; 9 – M06/aug-cc-pVTZ

Fig. 2. Experimental IR spectrum of 3-APN (1) and spectrum of 3-APN isolated molecule calculated by different methods: 2 – MP2/6-311++G**; 3 – CAM-B3LYP/6-311++G**; 4 – LC-wPBE/6-311++g**; 5 – M06-2X/6-311++G**; 6 – B3LYP/cc-pVTZ; 7 – MP2/cc-pVTZ; 8 – M06/cc-pVTZ; 9 – M06/aug-cc-pVTZ

Таблица 1

Рассчитанные значения частот (ω , cm^{-1}), интенсивностей (в скобках, km/mol) и приближенное описание колебаний в диапазоне $80\text{-}700\text{ cm}^{-1}$
 Table 1. Calculated frequencies (ω , cm^{-1}) and band intensities (in brackets, km/mol), and approximate description of vibrations in range of $80\text{-}700\text{ cm}^{-1}$

i	Экспер.	MP2/6-311++G**	SAM-B3LYP/ 6-311++G**	LC-wPBE/6- 311++G**	M062X/6-311++G**	B3LYP/cc-pVTZ	MP2/cc-pVTZ	M06/cc-pVTZ	M06/aug-cc-pVTZ	Приближенное описание РПЭ ^a	
1	466	88(1)	91(0)	97(28)	94(0)	89(0)	91(0)	90(0)	84(3)	twistL(C ₇ -C ₈)	
2		110(2)	120(2)	119(2)	117(1)	119(2)	108(2)	115(2)	113(5)	φ (C ₈ C ₇ N ₁₂), φ (C ₇ C ₈ N ₁₀)	
3		157(3)	164(3)	170(21)	166(1)	164(2)	160(2)	160(1)	174(93)	fold(C ₇ -C ₈)	
4		160(4)	173(6)	173(8)	169(5)	169(5)	157(4)	166(6)	164(9)	φ (C ₆ C ₈ C ₁₀), φ (C ₃ C ₇ C ₁₂), IPB(N ₁₁ , N ₁₃)	
5		219(2)	232(90)	229(0)	227(8)	226(2)	224(2)	225(3)	221(0)	fold(C ₂ -C ₈)	
6		571(155)	221(150)	34(182)	283(259)	325(230)	508(264)	261(215)	133(92)	inv(-NH ₂)	
7		367(4)	380(5)	378(5)	378(4)	376(5)	365(3)	374(5)	374(4)	φ (CCN ₁₄), IPB(C ₁₀ , C ₁₂)	
8		346(6)	387(0)	390(0)	384(0)	384(0)	357(17)	385(0)	430(2)	twistL(C ₇ -C ₁₂ , C ₈ -C ₁₀),	
9		358(15)	423(12)	435(3)	421(21)	425(25)	371(108)	438(7)	381(0)	tors(C ₆ -N ₁₄)	
10		429(1)	436(2)	435(3)	432(3)	433(4)	428(3)	430(2)	443(4)	φ (C ₃ C ₇ C ₈), φ (CCN ₁₄)	
11		440(18)	483(13)	488(14)	477(13)	474(12)	455(29)	479(15)	475(15)	fold(C ₁₀ -C ₁₂), fold(C ₃ -C ₆)	
12		466(0)	488(1)	487(1)	483(1)	481(1)	464(0)	483(1)	481(0)	IPB(C ₁₂ , C ₁₀), φ (C ₁ C ₃ C ₇), φ (C ₂ C ₆ C ₈)	
13		549	539(14)	563(2)	565(2)	554(1)	556(1)	540(12)	563(2)	561(2)	IPB(C ₁₂ , C ₁₀), φ (C ₂ C ₆ C ₈), φ (C ₁ C ₃ C ₇),
14		524(3)	590(2)	599(2)	577(1)	577(2)	557(2)	582(3)	578(2)	OPB(C ₁₀), bend(Bz)	
15		608	614(31)	634(0)	638(1)	625(1)	626(0)	612(0)	633(1)	633(1)	IPB(C ₁₀ , C ₁₂), φ (CCN ₁₄),
16		609(88)	652(1)	665(0)	638(1)	637(1)	620(6)	641(2)	639(1)	OPB(C ₆ , C ₇ , C ₁₂ , H ₄ , H ₅)	
17		643(15)	660(0)	664(1)	655(0)	652(0)	643(1)	658(0)	657(0)	def(Bz), IPB(C ₁₂)	

Примечание: ^a приближенное описание колебательной моды составлено по данным расчета РПЭ. Первой указана координата с наибольшим вкладом в РПЭ; координаты с вкладом, меньшим ~7%, опущены. Обозначения координат: r, φ – изменения указанных в скобках длин связей или валентных углов, соответственно; def(Bz) – плоская деформация бензольного цикла; bend(Bz) – деформация бензольного цикла с выходом атомов из плоскости; OPB – выход атома или связи, указанных в скобках, из плоскости молекулы; twistL – скручивание вокруг оси, указанной в скобках; fold – складывание молекулы по связи, указанной в скобках; tors – поворот группы вокруг связи в скобках; inv(NH₂) – пирамидальная инверсия аминогруппы

Note: ^a approximate description of vibrational modes by DPE calculation. As the first, the coordinate with maximal contribution in DPE is given; coordinates with contribution of less than 7% is not shown. Description of coordinates: r, φ – change indicated in brackets in bond length and in bond angle, respectively; def(Bz) – planar deformation benzene cycle; bend(Bz) – out-of-plane deformation benzene cycle; OPB – output atom or bond, showed in brackets, from plane of molecule; twistL – twisting around of the axes given in brackets; fold – folding along the bond given in brackets; tors – torsion of group around the bond given in brackets; inv(NH₂) – pyramidal inversion of amino group

Таблица 2

Рассчитанные значения частот (ω_i , cm^{-1}), интенсивностей полос (в скобках, km/mol) и приближенное описание колебаний в диапазоне $700\text{-}3900\text{ cm}^{-1}$
 Table 2. Calculated frequencies (ω_i , cm^{-1}) and band intensities (in brackets, km/mol), and approximate description of vibrations in range of $700\text{-}3900\text{ cm}^{-1}$

i	Экспер.	MP2/ 6-311++G**	CAM- B3LYP/ 6-311++G**	LC-wPBE/ 6-311++G**	M062X/ 6-31++G**	B3LYP/ cc-pVTZ	MP2/ cc-pVTZ	M06/ cc-pVTZ	M06/ aug-cc-pVTZ	Приближенное описание РПЭ ^a
18	722	759(47)	771(31)	786(39)	739(10)	755(19)	730(7)	754(17)	751(15)	bend(Bz), OPB(H ₄ , H ₅ , H ₉)
19		804(1)	815(0)	811(0)	804(0)	810(0)	797(46)	804(0)	802(0)	$\varphi(\text{C}_2\text{C}_1\text{C}_3)$, $r(\text{C}_8\text{-C}_{10})$
20	798	842(15)	835(29)	854(23)	810(50)	817(32)	804(1)	817(29)	813(28)	bend(Bz)
21		878(1)	919(0)	932(0)	911(0)	904(0)	901(0)	903(0)	906(0)	OPB(C ₂ -H ₄ , C ₃ -H ₅)
22		982(9)	997(9)	1002(9)	996(9)	986(7)	984(7)	986(6)	983(6)	$r(\text{C}_2\text{-C}_6)$, $r(\text{C}_7\text{-C}_{12})$, $\varphi(\text{C}_6\text{N}_{14}\text{H}_{15})$
23		941(1)	1016(0)	1032(0)	1006(0)	998(0)	964(0)	1000(1)	976(1)	OPB(C ₁ -H ₉ , C ₂ -H ₄ , C ₃ -H ₅)
24	1044	1079(5)	1079(14)	1078(19)	1078(10)	1073(8)	1078(4)	1066(10)	1064(12)	$\varphi(\text{CN}_{14}\text{H})$, $\varphi(\text{C}_1\text{C}_3\text{H}_5)$
25		1145(3)	1132(4)	1132(4)	1131(5)	1128(3)	1140(3)	1114(3)	1109(3)	$\varphi(\text{CN}_{14}\text{H})$, $\varphi(\text{CCH}_4)$, def(Bz)
26	1174	1198(2)	1207(13)	1204(17)	1201(8)	1203(11)	1196(3)	1182(8)	1176(9)	$\varphi(\text{CCH}_9)$, $\varphi(\text{CCH}_4)$
27		1221(2)	1231(6)	1238(7)	1227(5)	1218(4)	1222(2)	1220(6)	1219(6)	$r(\text{C}_8\text{-C}_{10})$, $\varphi(\text{CCH}_5)$
28		1273(2)	1288(2)	1292(3)	1278(2)	1275(2)	1271(2)	1268(2)	1268(1)	$r(\text{C}_7\text{-C}_{12})$, $\varphi(\text{CCH}_5)$
29	1307	1353(45)	1330(68)	1326(83)	1348(67)	1333(54)	1358(38)	1336(63)	1334(63)	def(Bz), $\varphi(\text{CN}_{14}\text{H}_{15})$
30	1358	1465(18)	1383(42)	1396(35)	1387(36)	1370(39)	1476(19)	1373(30)	1371(33)	$r(\text{C}_6\text{-N}_{14})$, def(Bz), $\varphi(\text{CCH}_4)$
31		1498(5)	1518(32)	1540(50)	1521(22)	1492(12)	1499(4)	1498(18.)	1496(28)	def(Bz), $\varphi(\text{CCH})$, $\varphi(\text{CN}_{14}\text{H}_{16})$
32	1474	1503(68)	1527(61)	1545(42)	1529(74)	1508(63)	1507(68)	1508(52)	1507(50)	def(Bz), $\varphi(\text{CCH})$
33		1626(9)	1645(10)	1657(95)	1652(14)	1608(15)	1628(4)	1614(13)	1613(9)	$\varphi(\text{HN}_{14}\text{H})$, IPB(C ₁ , C ₈)
34	1595	1635(21)	1659(22)	1685(63)	1664(40)	1629(40)	1637(10)	1625(53)	1624(59)	$\varphi(\text{HN}_{14}\text{H})$, IPB(C ₂ , C ₃)
35	1631	1673(168)	1682(290)	1712(228)	1690(264)	1664(197)	1668(180)	1654(243)	1651(253)	$\varphi(\text{HN}_{14}\text{H})$, $r(\text{C}_6\text{-N}_{14})$
36		2160(0)	2383(42)	2423(40)	2404(37)	2323(34)	2170(1)	2339(38)	2337(41)	$r(\text{C}_{10}\text{=N}_{11})$, $r(\text{C}_8\text{-C}_{10})$
37	2217	2168(2)	2402(15)	2442(14)	2413(12)	2342(10)	2177(1)	2360(13)	2357(14)	$r(\text{C}_{12}\text{=N}_{13})$, $r(\text{C}_7\text{-C}_{12})$
38	3018	3204(3)	3195(4)	3225(3)	3204(3)	3173(5)	3211(3)	3165(6)	3162(6)	$r(\text{C}_2\text{-H}_4)$, $r(\text{C}_1\text{-H}_9)$
39	3086	3223(4)	3213(4)	3243(3)	3221(4)	3191(7)	3231(3)	3185(7)	3179(9)	$r(\text{C}_2\text{-H}_4)$, $r(\text{C}_1\text{-H}_9)$
40		3241(1)	3236(0)	3265(0)	3242(0)	3217(1)	3250(1)	3203(1)	3201(1)	$r(\text{C}_3\text{-H}_5)$
41	3368	3586(52)	3623(89)	3664(103)	3626(88)	3584(68)	3584(61)	3584(74)	3583(73)	$r(\text{N}_{14}\text{-H}_{15})$, $r(\text{N}_{14}\text{-H}_{16})$
42	3465	3705(37)	3743(56)	3792(67)	3759(59)	3702(42)	3711(41)	3717(49)	3715(52)	$r(\text{N}_{14}\text{-H}_{16})$, $r(\text{N}_{14}\text{-H}_{15})$

Примечание: ^a - приближенное описание колебательной моды составлено по данным расчета РПЭ. Первой указана координата с наибольшим вкладом в РПЭ; координаты с вкладом, не превышающим ~7%, опущены. Обозначения координат: r, φ – изменения указанных в скобках длин связей или валентных углов, соответственно; def(Bz) – плоская деформация бензольного цикла; bend(Bz) – деформация бензольного цикла с выходом атомов из плоскости; OPB – выход атома или связи, указанных в скобках, из плоскости молекулы; IPB – движение атома или связи, указанного в скобках, в плоскости молекулы

Note: ^a - approximate description of vibrational modes by DPE calculation. As the first, the coordinate with maximal contribution in DPE is given; coordinates with contribution of less than 7% is not shown. Description of coordinates: r, φ – change indicated in brackets in bond length and in bond angle, respectively; def(Bz) – planar deformation benzene cycle; bend(Bz) – out-of-plane deformation benzene cycle; OPB – output atom or bond, showed in brackets, from plane of molecule; IPB – moving of atom or bond, showed in brackets, from plane of molecule

Авторы благодарят РФФИ за финансовую поддержку расчетной части работы (грант № 13-03-00975а) и Российский Научный Фонд (грант №14-23-00204) за поддержку части работы, связанной с экспериментом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Oshima J., Yoshihara T., Tobita S. // Chem. Phys. Letters. 2006. V. 423. P.306-311.
2. Anbarasan P.M., Kumar P.S., Vasudevan K., Babu S.M., Aroulmoji V. // Acta Phys. Pol. A. 2011. V. 119. P. 395–404.
3. Родионова Г.Н., Боглаенкова Г.В., Михаленко С.А., Соловьева И.И., Лукьянец Е.А. // Журн. прикл. спектроскопии. 1976. Т. 27. № 1. С. 171-172.
4. Лукьянец Е.А., Важина В.А., Михаленко С.А., Соловьева Л.И. // Анилино-красочная пром-ть. 1976. Вып. 1. С. 1-4.
5. Gaussian 09, Revision A.01, M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G. E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.A. Montgomery, Jr., J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, Ö. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
6. Becke A.D. // J. Chem. Phys. 1993. V. 98 P. 5648-5652.
7. Yanai T., Tew D., Handy N. // Chem. Phys. Lett. 2004. V. 393. P. 51-57.
8. Vydrov O.A., Scuseria G.E., Perdew J.P. // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. P. 154109.
9. Zhao Y., Truhlar D.G. // Theor. Chem. Acc. 2008. V. 120. P. 215-241.
10. Head-Gordon M., Pople J.A., Frisch M.J. // Chem. Phys. Lett. 1988. V. 153. P. 503-506.
11. Clark T., Chandrasekhar J., Spitznagel G.W., Schleyer P.V. // J. Comp. Chem. 1983. V. 4. P. 294.
12. Dunning T.H. // J. Chem. Phys. 1989. V. 90. P. 1007.
13. Schuchardt K.L., Didier B.T., Elsethagen T., Sun L., Gurumoorthi V., Chase J., Li J., Windus T.L. // J. Chem. Inf. Model. 2007. V. 47. N 3. P. 1045-1052.
14. Zhurko G.A., Zhurko D.A. ChemCraft, 1.6 (build 332). <http://chemcraftprog.com/index.html>.
15. <http://cccbdb.nist.gov/vibscalejust.asp>.

REFERENCES

1. Oshima J., Yoshihara T., Tobita S. // Chem. Phys. Letters. 2006. V. 423. P.306-311.
2. Anbarasan P.M., Kumar P.S., Vasudevan K., Babu S.M., Aroulmoji V. // Acta Phys. Pol. A. 2011. V. 119. P. 395-404.
3. Rodionova G.N., Boglaenkova G.V., Mikhalenko S.A., Solov'eva I.I., Lukyanets E.A. // Zhurn. Prikl. Spectroskopii. 1976. V. 27. N 1. P. 171-172 (in Russian).
4. Lukyanets E.A., Vazhina V.A., Mikhalenko S.A., Solov'eva L.I. // Anilino-krasochnaya promyshl. 1976. N 1. P. 1-4 (in Russian).
5. Gaussian 09, Revision A.01, M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G. E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.A. Montgomery, Jr., J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, Ö. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
6. Becke A.D. // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 5648-5652.
7. Yanai T., Tew D., Handy N. // Chem. Phys. Lett. 2004. V. 393. P. 51-57.
8. Vydrov O.A., Scuseria G.E., Perdew J.P. // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. P. 154109.
9. Zhao Y., Truhlar D.G. // Theor. Chem. Acc. 2008. V. 120. P. 215-241.
10. Head-Gordon M., Pople J.A., Frisch M.J. // Chem. Phys. Lett. 1988. V. 153. P. 503-506.
11. Clark T., Chandrasekhar J., Spitznagel G.W., Schleyer P.V. // J. Comp. Chem. 1983. V. 4. P. 294.
12. Dunning T.H. // J. Chem. Phys. 1989. V. 90. P. 1007.
13. Schuchardt K.L., Didier B.T., Elsethagen T., Sun L., Gurumoorthi V., Chase J., Li J., Windus T.L. // J. Chem. Inf. Model. 2007. V. 47. N 3. P. 1045-1052.
14. Zhurko G.A., Zhurko D.A. ChemCraft, 1.6 (build 332). <http://chemcraftprog.com/index.html>.
15. <http://cccbdb.nist.gov/vibscalejust.asp>.

Поступила в редакцию 05.02.2016

Принята к печати 01.03.2016