

**ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО ВЫЧИСЛЕНИЯ
ИНТЕНСИВНОСТЕЙ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ
МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ**

Е.В.Васильев, А.И. Павлючко

Московский государственный строительный университет

Нами были произведено квантово-химическое вычисление интенсивностей фундаментальных полос поглощения для 35-ти гетероатомных (H, C, O, N, O, F, Cl, Br, S) органических соединений для которых имелись высококачественные экспериментальные ИК спектры для газовой фазы. Численное интегрирование вычисленной и экспериментальной зависимости оптической плотности от волнового числа позволило сопоставить вычисленные и абсолютные интенсивности, как отдельных полос поглощения, так и групп полос для различных интервалов волновых чисел. Использовался 6-311G(3df,3pd) базис с применением MP2 метода учета электронных корреляций.

Сравнение вычисленных и экспериментальных интенсивностей на интервале $575 — 4000 \text{ см}^{-1}$ показало, что в интенсивность вычисленных полос поглощения в среднем на 25% выше экспериментальной интенсивности при среднеквадратичном отклонении 8%. Хорошо воспроизводятся интенсивности характеристичных валентных колебания концевых связей (например, C-H и C=O) с большими амплитудами. Среднее завышение рассчитанной интенсивности таких полос поглощения составило 5% при среднеквадратичном отклонении 2%.

Детальное сравнение вычисленных и экспериментальных интенсивностей для отдельных полос поглощения показало, что величина их отклонения хорошо переносится в ряду полос со сходными формами колебаний (например, для изменения H-C-H и C-C-H углов).

При неучете в квантово-химическом расчете электронных корреляций величина завышения вычисленных интенсивностей колебательных полос поглощения существенно (в среднем в три раза) возрастает.

Работа поддержана грантом РФФИ N 08-03-00630.