

ПОРІВНЯННЯ РОЗРАХУНКОВОГО ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ІЧ СПЕКТРІВ КООРДИНАЦІЙНОЇ СПОЛУКИ ЦИННАМАТУ НІКЕЛЮ З ТІОСЕМІКАРБАЗИДОМ

Ковальов А. Ю., Кокишарова Т. В.

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна

e-mail: a.kovalyov@stud.onu.edu.ua

У представлений роботі за допомогою пакетів Orca та Multiwfn проведено DFT розрахунки для найвірогіднішої конформації $\text{NiL}_2(\text{Cinn})_2$ (L – тіосемікарбазид, HCinn – корична кислота), а також розраховано ІЧ спектр цієї конформації та проведено його порівняння з експериментальним спектром.

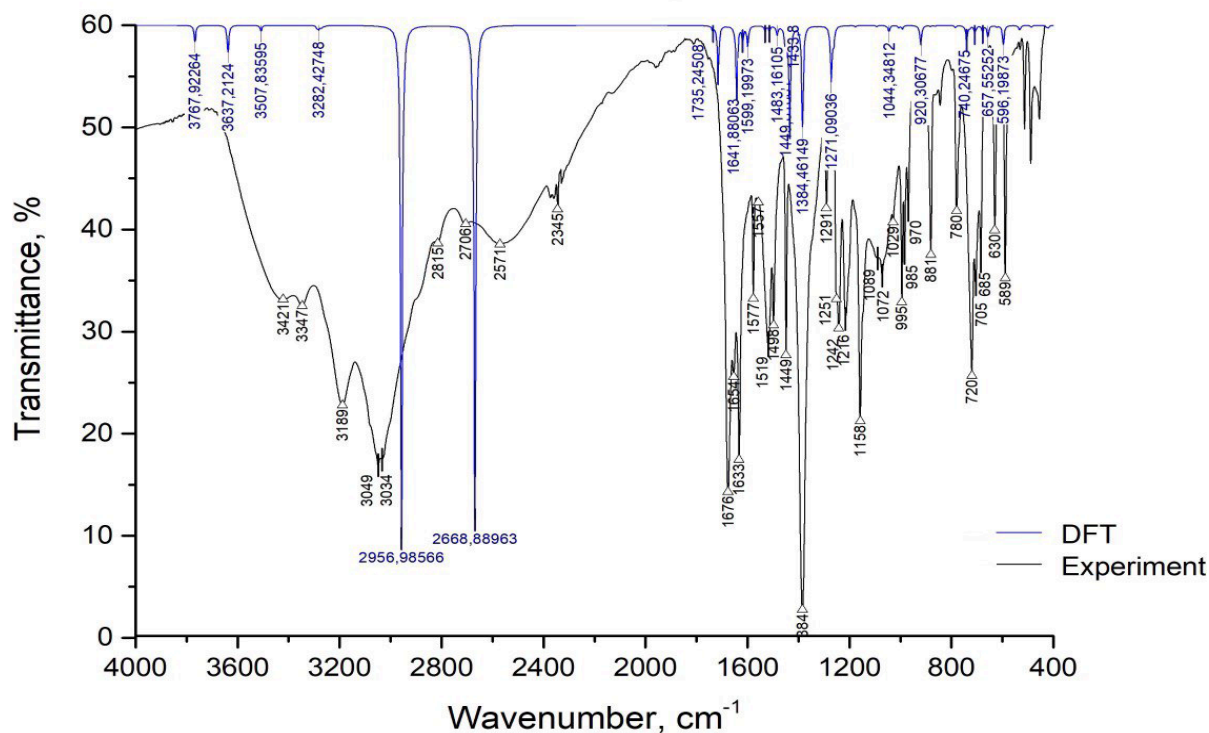


Рис. 1. Порівняння розрахункового (DFT) та експериментального (Experiment) ІЧ спектрів $\text{NiL}_2(\text{Cinn})_2$

Таблиця 1. Віднесення смуг (cm^{-1}) та порівняння розрахункового та експериментального ІЧ спектрів $\text{NiL}_2(\text{Cinn})_2$

Коливання	ν (NH)	Тіоамідні смуги			
		I	II	III	IV
Розрахункові частоти	2957 с.	1599 сер.	1384 с.	1000 плече	740 сер.
Експериментальні частоти	3347 сл., 3189 сер., 3049 сер., 3034 сер.	1577 сер.	1384* дуже с.	1000 плече	780 сер.

З табл. 1 видно, що експериментальні та розрахункові тіоамідні смуги відрізняються за частотами не більш ніж на 40 cm^{-1} , що можна вважати гарним результатом. Для NH-коливань різниця є більшою, адже в експериментальному спектрі в цьому регіоні окрім коливань NH великий внесок мають коливання інших груп, наприклад C-H.