



Изучение молекулярной структуры 4-пиперидинметанола в твёрдом состоянии и в растворе тетрахлорметана

А.Я. Корнейчук, В.М. Сенявин, Г.М. Курамшина
Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,
Химический факультет



Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 18-03-00412

Уровни расчётов

B3LYP; M062X; BVP86

Набор базисов

6-31G*, 6-31G**, 6-31+G**, PVTZ,
aug-cc-pVDZ, aug-cc-pVTZ

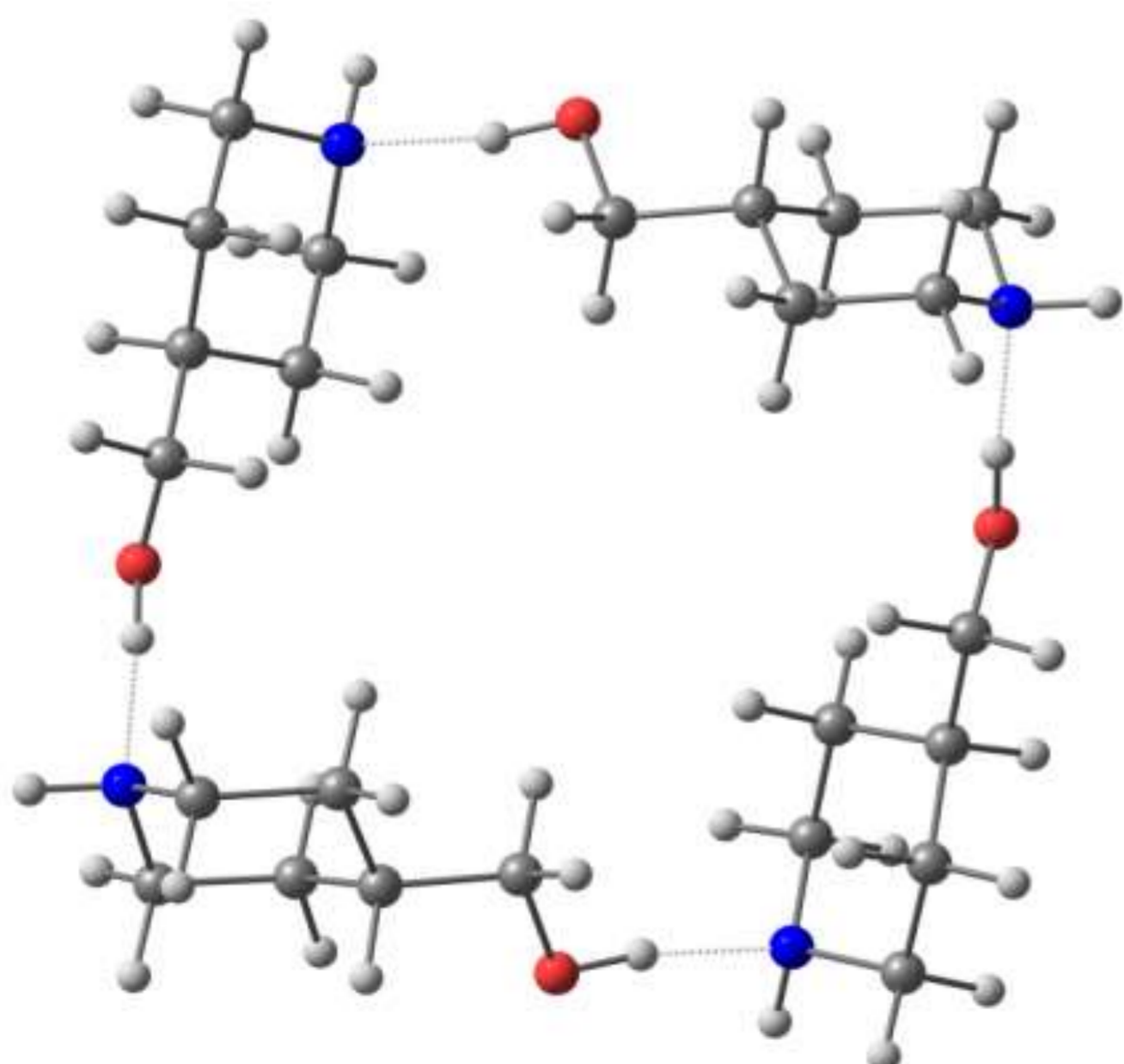
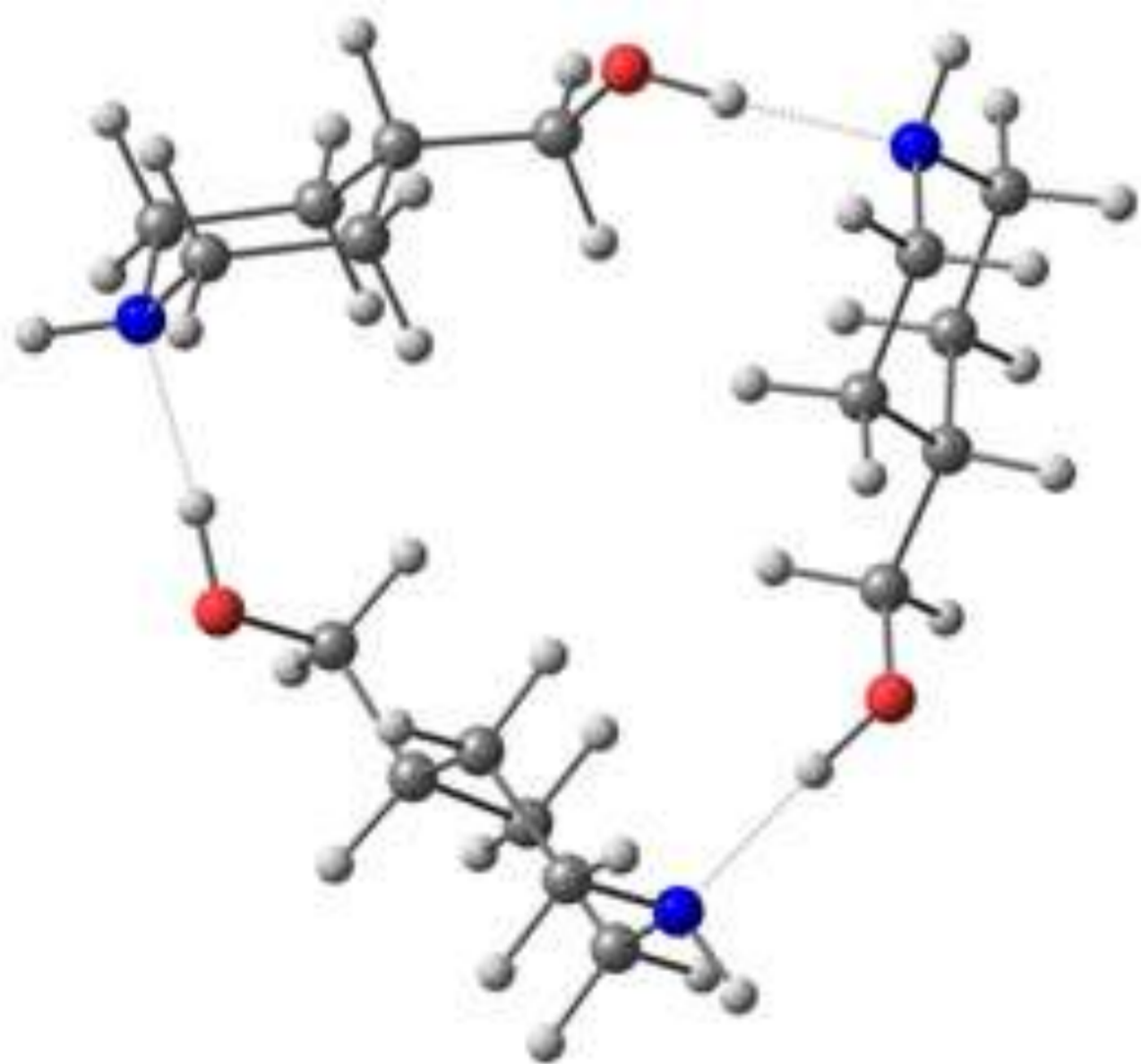
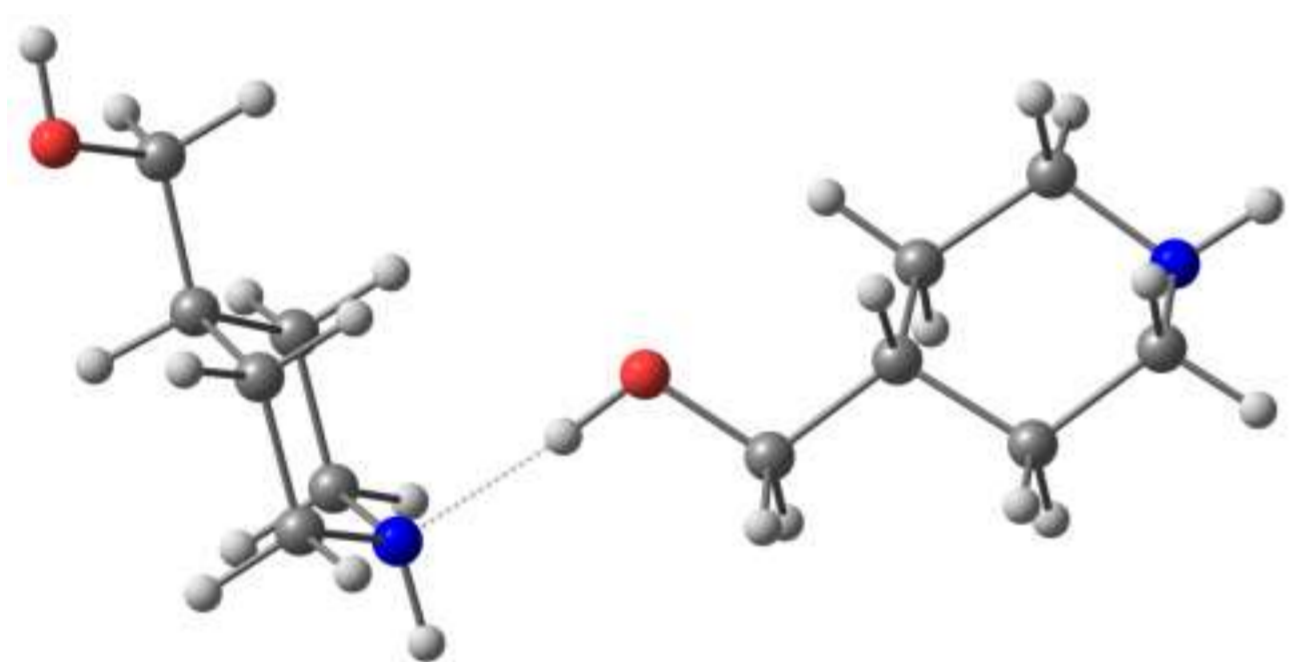
Программный пакет

Chemcraft

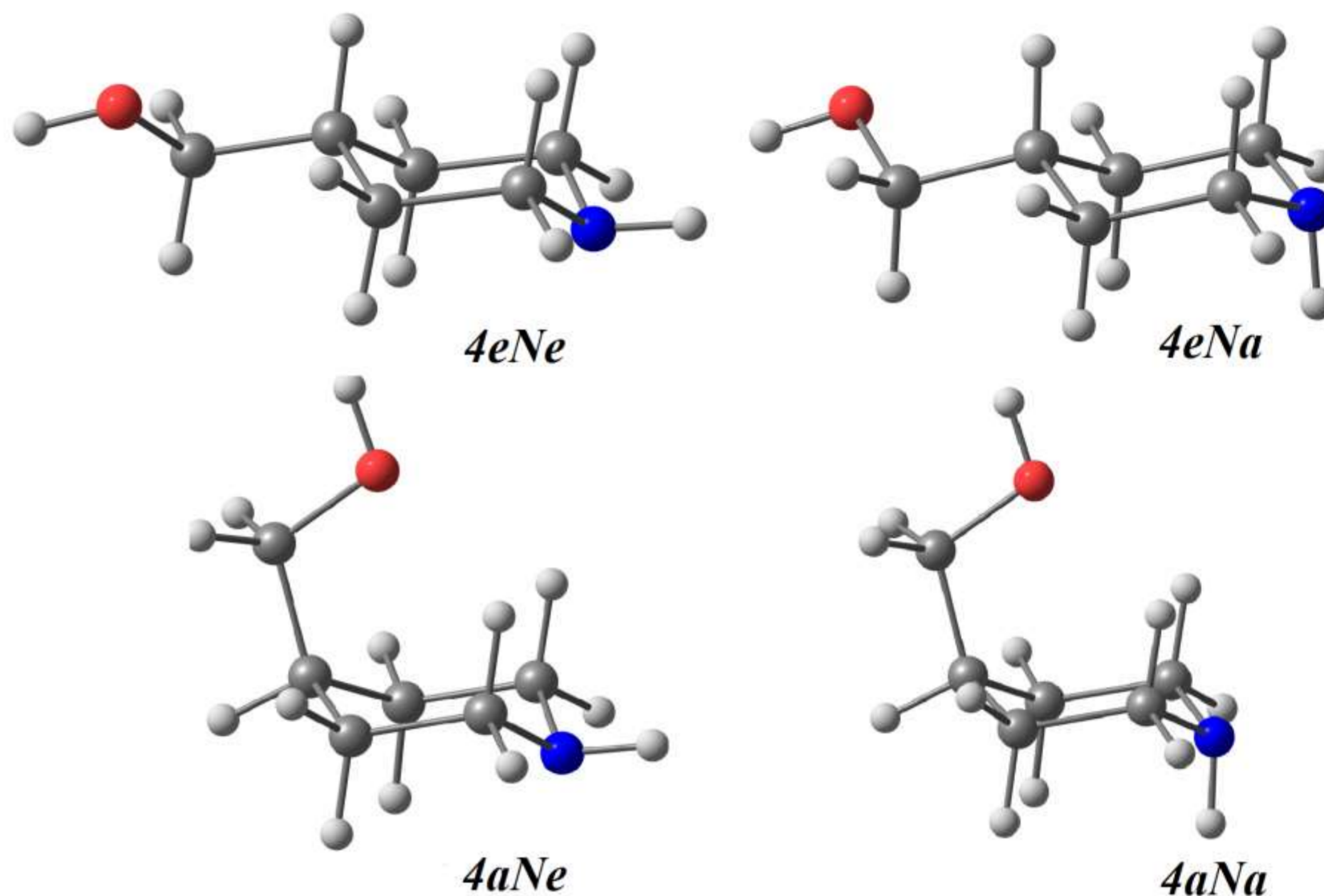
Gaussian 03W (Version 6.0)

Gaussian 09 (Version C. 01)

Структурные формулы наиболее устойчивых димера, тримера и тетрамера 4-пиперидинметанола



Оптимизированные структуры конформеров 4-пиперидинметанола (BVP86/TZVP)



Относительные энергии 4 конформеров 4-пиперидинметанола, ккал/моль

		4eNe	4eNa	4aNe	4aNa
B3LYP	6-31G*	0,0	0,27	1,86	2,19
	aug-cc-pVTZ	0,0	0,72	2,58	3,33
	aug-cc-pVDZ	0,0	0,83	2,61	3,47
M062X	6-31+G**	0,0	0,55	2,00	2,65
BVP86	TZVP	0,0	0,44	3,78	3,91

ИК-спектр 4-пиперидинметанола: а – раствор в CCl₄, 0,152M; б – твёрдое состояние.

