

УДК 535.33

РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПАРАМЕТРОВ СОЕДИНЕНИЙ РЯДА АНИЛИНА

О.В. НОВОСЕЛОВА

(Кафедра физики)

На основании фрагментарного метода расчета с использованием экспериментальных данных о частотах и спектральных кривых поглощения в ИК области спектра был получен единый набор силовых постоянных и электрооптических параметров для соединений ряда анилина.

При решении ряда важных прикладных вопросов, например, при создании экспертной системы для диагностики и анализа паритетных загрязнителей, требуется способ быстрого прогнозирования спектральных кривых инфракрасного (ИК) поглощения. Такое прогнозирование можно выполнить расчетными методами теории колебательных спектров многоатомных молекул [2] с помощью комплекса программ «СПЕКТР-СТРУКТУРА» [4, 5] и банка данных молекулярных структур [11]. С целью пополнения этого банка данных и были определены наборы силовых постоянных и электрооптических параметров (ЭОП) для соединений, относящихся к ряду анилинов $C_6H_5NH_x$.

В ряде публикаций [8, 13—15, 19, 23—25], посвященных расчетам спектров анилина и его производных, рассматриваются 2 мо-

дели молекулы анилина: с плоской группой $—NH_2$ (симметрия C_{2v}) и пирамидальной группой $—NH_2$ (симметрия C_s). Потенциальный максимум соответствует плоской конфигурации молекулы анилина, а потенциальный минимум — конфигурации, где атомы водорода аминогруппы расположены с одной стороны плоскости кольца $—NC_6H_5$ [18]. На основании анализа частот и термодинамических функций [14] была выбрана модель молекулы с симметрией C_s , т.е. с пирамидальной конфигурацией группы $—NH_2$ [16, 24]. Колебания по типам симметрии разбиваются $\Gamma = 20A' + 16A''$.

Принята следующая геометрия молекулы анилина $C_6H_5NH_2$ [25]: $CH = 1,402 \text{ \AA}$; $\angle HCH = 113,6^\circ$; $NH = 1,001 \text{ \AA}$; $CH = 1,082 \text{ \AA}$. Угол между плоскостями аминогруппы и кольца был принят равным $37,5^\circ$ на основе точного микроскопи-

ческого изучения [1, 17], что также согласуется с теоретическими расчетами [20].

Модель молекулы анилина была получена методом фрагментарного расчета [4]. В качестве исходных фрагментов использовались молекула бензола [11] и фрагмент группы $-\text{NH}_2$. Исходные значения силовых постоянных и ЭОП приняты для молекулы бензола как в банке данных молекулярных структур, а для группы $-\text{NH}_2$ использованы значения из работ [2, 3, 6]. Дальнейшее уточнение молекулярных параметров для молекулы анилина производилось путем решения обратной механической и электрооптической задачи по методу наименьших квадратов [7].

Обратная механическая задача решалась для молекулы анилина $\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$, его дейтерозамещенных ($\text{C}_6\text{H}_5\text{ND}_2$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{NHD}$) [25] и метилзамещенных (2,3-, 2,4-, 3,4-диметилаанилина; 2,4,6-триметилаанилина) [13, 19]. Наибольшее расхождение значений экспериментальных и расчетных частот колебаний не превышает 18 см^{-1} и в основном составляет $5\text{--}10 \text{ см}^{-1}$, что можно считать вполне удовлетворительным.

Ниже приводятся значения силовых постоянных, полученных после решения обратной механической задачи: $K_{\text{CN}} = 9,2$; $K_{\text{NH}} = 11,16$; $K_{\text{HNC}} = 0,82$; $K_{\text{HNN}} = 0,68$; $K_{\text{C=C}} = 10,98$; $\text{H}_{\text{CN}}^{\text{NH}} = 0,05$; $\text{H}_{\text{CN}}^{\text{C=C}} = 0,25$; $\text{H}_{\text{C=C}}^{\text{C=C}} = 1,2$; $\text{A}_{\text{CN}}^{\text{HNC}} = 0,4$; $\text{A}_{\text{NH}}^{\text{HNN}} = 0,4$; $\text{A}_{\text{NH}}^{\text{HNC}} = 0,4$; $\text{I}_{\text{CNH}}^{\text{HNN}} = -0,06$; $\text{I}_{\text{HNC}}^{\text{HNC}} = -0,15$; $\rho_{\text{CN}}^{\text{CCC}} = 0,7$; $\chi_{\text{C=C=C}}^{\text{C=C=C}} =$

$= 0,31$; $\chi_{\text{CCC}}^{\text{HNN}} = 0,31$; $\rho_{\text{CH}}^{\text{CCC}} = 0,62$. Обозначения силовых постоянных те же, что в [1], их значения — в единицах $\cdot 10 \text{ см}^{-1}$. Корректировка силового поля в молекуле анилина производилась только для группы $-\text{NH}_2$ и в месте стыковки исходных фрагментов.

В табл. 1 приводятся расчетные и экспериментальные значения частот, формы колебаний, распределение потенциальной энергии по колебательным координатам для молекулы анилина.

На основании распределения потенциальной энергии по группам физически эквивалентных координат можно судить о деформации отдельного элемента молекулы при данном нормальном колебании. Колебания элементов молекулы, требующие максимальных затрат энергии, и будут обладать характеристичностью по частоте. Были выделены следующие характеристические по частоте области колебаний соединений ряда анилина: 3500 см^{-1} , 3418 см^{-1} (NH, 99%), $3065\text{--}3055 \text{ см}^{-1}$ (CH, 85—99%), $1640\text{--}1600 \text{ см}^{-1}$ (C=C, 65—80%), $1510\text{--}1460 \text{ см}^{-1}$ (CCC, 55%; C=C, 35%), $1325\text{--}1305 \text{ см}^{-1}$ (CCH, 80—85%), $1270\text{--}1285 \text{ см}^{-1}$ (CN, 50—55%), $1160\text{--}1170 \text{ см}^{-1}$ (CCH, 95—98%), $1020\text{--}1025 \text{ см}^{-1}$ (C=C, 75—80%), $970\text{--}690 \text{ см}^{-1}$ (ρ , 85—100%), $550\text{--}420 \text{ см}^{-1}$ (χ , 55—60%; ρ , 20—25%).

Полагалось, что в модели электрооптического поля молекулы анилина перекрывание электронных облаков групп $-\text{C}_6\text{H}_5$ и $-\text{NH}_2$ мало. Для молекул ряда анилина (ее дейтеро- и метилзамещенных), как и вообще для сложных соединений, известны лишь

Экспериментальные (ν) и теоретические (ν_t) значения частот [25]
 для молекулы анилина $C_6H_5NH_2$ и ее дейтерозамещенных $C_6H_5ND_2$,
 C_6H_5NHD

Частота (ν, ν_t), cm^{-1}			Форма колебания	Распределение потенциальной энергии по колебательным координатам молекулы анилина, %
$C_6H_5NH_2$	C_6H_5NHD	$C_6H_5ND_2$		
3418/3420	2558/2554	2495/2497	q_{NH}	CN(98)
3072/3065	3082/3065	3078/3065	q_{CH}	CH(83)
3053/3058	3052/3058	3050/3057	q_{CH}	CH(99)
3037/3055	3032/3055	3043/3055	q_{CH}	CH(89)
1618/1626	1440/1437	1156/1169	$\beta_k, \gamma_k, Q_{C=C}$	C=C(76)
1603/1603	1612/1626	1608/1625	$\alpha, \beta, Q_{C=C}$	C=C(63), CNH(32)
1503/1500	1509/1500	1501/1499	$\beta_k, Q_{C=C}$	CCH(55), C=C(34)
1276/1279	1273/1272	1308/1299	$Q_{C-N}, \beta_k, \gamma_k$	CN(55), C=C(20)
1173/1169	1176/1171	1175/1173	β_k	CCH(97)
1028/1026	1033/1026	1029/1026	$\beta_k, Q_{C=C}$	C=C(79), CCH(15)
990/987	998/987	998/987	γ_k, β_k	CCC(50), C=C(32)
968/974	968/973	973/973	ρ_{CH}, χ	$\rho(84)$
874/874	879/874	874/874	ρ_{CH}	$\rho(98)$
812/804	808/794	800/790	$\gamma_k, \beta_k, Q_{C-N}$	C=C(34), CN(26), CCC(29)
745/739	750/738	750/736	$\rho_{CN}, \chi, \rho_{CH}$	$\rho(39), \rho_{CN}(24), \chi(35)$
690/696	691/696	687/696	ρ_{CH}	$\rho(97)$
542/546	476/458	391/409	$\chi, \rho_{CH}, \beta, \alpha$	CNH(21), $\rho(30), \chi(33)$
526/524	525/532	518/526	$\chi, \rho_{CH}, \gamma_k$	CCC(34), $\rho(20)$
500/497	504/519	497/514	$\chi, \rho_{CH}, \alpha, \beta$	CNH(25), $\rho(22), \chi(58)$
233/210	219/205	228/198	χ	$\rho_{CH}(40), \chi(58)$
3500/3499	3461/3461	2610/2613	q_{NH}	NH(99)
3088/3060	3092/3060	3088/3059	q_{CH}	CH(99)
3025/3054	3012/3054	3015/3054	q_{CH}	CH(99)
1590/1603	1588/1602	1582/1597	$Q_{C=C}, \gamma_k, \beta_k$	C=C(79)
1468/1459	1479/1473	1460/1453	$\beta_k, Q_{C=C}$	CCH(55), C=C(35)
1324/1321	1322/1311	1322/1311	β_k, β	CCH(83)
1190/1198	1176/1173	1175/1189	$\beta, \beta_k, Q_{C=C}$	C=C(67), CCH(22)
1152/1154	1152/1154	1152/1154	β, β_k	CNH(38), CCH(57)
1090/1099	1089/1089	1081/1084	$Q_{C=C}, \beta_k$	C=C(70), CCH(22)
1050/1040	960/952	874/873	β, β_k	C=C(66), CCH(22)
957/954	954/954	951/954	ρ_{CH}	$\rho(94)$
825/823	819/823	825/823	ρ_{CH}	$\rho(100)$
619/616	620/616	618/615	γ_k, β_k	CCC(72), CCH(22)
415/429	417/429	415/429	χ, ρ	$\chi(73), \rho(27)$
390/374	368/357	359/344	γ	CCN(85)
210/-	199/-	171/-		

Примечание. Обозначения приняты, как в [2, с.98—101]: q_{CH} — валентные колебания связей C—H; q_{NH} — валентные колебания связей N—H; $Q_{\text{C=C}}$ — валентные колебания углеродного кольца; $Q_{\text{C-N}}$ — валентные колебания связей C—N; α — внутренние деформационные колебания групп —NH₂; β — внешние деформационные колебания групп —NH₂; γ — деформационные колебания углов C—C—N; β_k — деформационные колебания углов C—C—H; γ_k — деформационные колебания углеродного кольца (углов C—C—C); ρ_{CH} — неплоские колебания связей C—H (выход связи CH из плоскости); ρ_{CN} — неплоские колебания связей C—N (выход связи CN из плоскости); χ — неплоские колебания (кручение вокруг связей C=C в кольце).

спектральные кривые, а не значения абсолютных интенсивностей полос поглощения, поскольку эти значения для подобных молекул получить сложно из-за трудности разделения большого числа полос поглощения, активных в ИК области спектра. По этой причине при решении обратной электрооптической задачи использовался метод внутреннего стандарта [12], в соответствии с которым в качестве источника внутреннего стандарта для молекулы анилина использовались неплоские колебания связей CH ($\nu = 696 \text{ см}^{-1}$), обладающие значительной интенсивностью, характеристические по частоте и форме колебания.

Абсолютные интенсивности других полос поглощения определялись по относительным интенсивностям в спектре поглощения, которые, в свою очередь, сравни-

вались путем сопоставления экспериментальных и расчетных спектральных кривых, близость которых служила критерием правильности определения набора ЭОП для соединений рассматриваемого ряда. В реальных колебательных спектрах сложных соединений имеет место наложение полос поглощения. По этой причине видимый в экспериментальном спектре одиночный пик на самом деле является составным и его интенсивность определяется интенсивностью целого ряда налагающихся друг на друга полос поглощения.

Именно такая картина наблюдается в молекулах ряда анилина для неплоских колебаний связей CH кольца в областях $500—550 \text{ см}^{-1}$, $700—750 \text{ см}^{-1}$, $800—850 \text{ см}^{-1}$ и валентных колебаний групп —CH ($3000—3500 \text{ см}^{-1}$), —NH, ($3400—3500 \text{ см}^{-1}$). Кроме того, большое число полос поглощения в спектре не проявляется из-за низкой интенсивности. Поэтому, отмечая хорошее согласие экспериментальной и теоретической кривых, будем иметь в виду, что различие экспериментальных и теоретических частот не превышает $10—20 \text{ см}^{-1}$, а относительных интенсивностей — $20—30\%$. Кроме того должно наблюдаться и визуальное согласие этих спектральных кривых.

Обратная электрооптическая задача решалась для молекулы анилина, его дейтерозамещенных ($\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{ND}_2$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{NHD}$), а также молекулы п-фенилендиамина [22]. Поскольку в сложных соединениях спектр ИК поглощения формируется из отдельных наибо-

лее интенсивных колебаний, то для точного определения значе- ний ЭОП важно оценить их вклад в интенсивность данного колеба- ния. В соответствии с основными представлениями валентно-оп- тической теории В.А. Дементь- евым был предложен метод интер- претации интенсивности колеба- ний молекулы по анализу вкладов групп физически эквивалентных связей в суммарную абсолютную интенсивность каждого нормаль- ного колебания молекулы [9, 10]. Интенсивность колебания таких групп вычислялась в предположе- нии, что ненулевыми ЭОП обла- дает только данная группа.

Следует обратить внимание на то, что сумма вклада интенсив- ностей по всем группам связей молекулы чаще всего должна быть больше полной интенсив- ности колебания, так как ско- рость изменения полного диполь- ного момента молекулы является векторной, а не алгебраической суммой изменения дипольных мо- ментов отдельных групп связей. Подобный анализ был выполнен для всех исследуемых соединений ряда анилина, что позволило с учетом характеристичности коле- баний групп связей, входящих в молекулу ($—C=C—$, $—NH_2$, $—CH$), выделить только те значения ЭОП, которые дают заметный вклад в интенсивность колебания. Так, в области $3400—3500\text{ см}^{-1}$ группы связей $—NH_2$ (более кон- кретно $—\partial\mu_{NH_2}/\partial q_{NH_2}$) вносят основной вклад в интенсивность полосы поглощения — до $80—100\%$ от полной интенсивно- сти полосы поглощения данной частоты; для области $3000—$

3100 см^{-1} — группы связей $—CH$ ($\partial\mu_{CH}/\partial q_{CH}$) — $90—100\%$. Интен- сивности полос поглощения для области $1600—1630\text{ см}^{-1}$ зависят только от групп связей $—CN—$ и $C=C$ с равным вкладом $60—80\%$, в области 1500 см^{-1} и 1275 см^{-1} — только от групп связей $—CH$ кольца — $80—100\%$. Интенсив- ность полос поглощения для не- плоских колебаний в области $500—550\text{ см}^{-1}$ определяется груп- пами связей $—CN—$ (μ_{CN}) и $—NH_2$ (μ_{NH_2}) с соответствующим вкла- дом 40 и 80% ; в области $700—850\text{ см}^{-1}$ — только группой $—CH$ (μ_{CH}) кольца с вкладом $90—100\%$. Проведенный анализ дает основа- ние считать, что для областей частот $3500—3400\text{ см}^{-1}$, $3100—3000\text{ см}^{-1}$, 1600 см^{-1} , 1500 см^{-1} , 1280 см^{-1} , $850—700\text{ см}^{-1}$ характе- ристичность по частоте и форме колебаний для молекулы анилина совпадает с характеристичностью по интенсивности.

В качестве иллюстрации в табл. 2 приводятся значения абсолютных интенсивностей, которые дают вклад в суммарную интенсив- ность полосы для молекулы ани- лина и зависят от ЭОП групп свя- зей. Приводятся только те значе- ния интенсивностей групп связей, которые дают вклад, превышаю- щий 20% суммарной интенсив- ности полосы поглощения. В ре- зультате такого отбора был полу- чен упрощенный набор исход- ных значений ЭОП. Ниже приво- дятся значения ЭОП, получен- ные в результате решения обрат- ной электрооптической задачи: $\mu_{CH} = 0,45\text{ D}$; $\partial\mu_{CH}/\partial q_{NH_2} = 0,20\text{ D/\AA}$; $\partial\mu_{CH}/\gamma_{CCC} = -0,40\text{ D/\AA}$; $\partial\mu_{CH}/\beta_{CCH} = 0,10\text{ D/\AA}$; $\mu_{CN} = 0,70\text{ D}$;

$$\begin{aligned} \partial\mu_{\text{CN}}/Q_{\text{CN}} &= 0,30 \text{ D/\AA}; \quad \partial\mu_{\text{CN}}/q_{\text{NH}} = = -0,10 \text{ D/\AA}; \quad \mu_{\text{NH}} = 0,20 \text{ D/\AA}; \\ &= 0,20 \text{ D/\AA}; \quad \partial\mu_{\text{CN}}/\gamma_{\text{CCN}} = -0,10 \text{ D/\AA}; \quad \partial\mu_{\text{NH}}/q_{\text{NH}} = 0,28 \text{ D/\AA}; \quad \partial\mu_{\text{NH}}/Q_{\text{CN}} = \\ \partial\mu_{\text{CN}}/\gamma_{\text{CCN}} &= 0,15 \text{ D/\AA}; \quad \partial\mu_{\text{CN}}/\beta_{\text{CCH}} = = 0,20 \text{ D/\AA}. \end{aligned}$$

Таблица 2

Вычисленные значения абсолютных интенсивностей (A_i) и вклады групп связей в интенсивность колебания для молекулы анилина

Эксперим. частота ν_i , см ⁻¹	Расчет								
	ν_i , см ⁻¹	A_i , (D/\AA) ²	вклады групп связей в интенсивность колебаний						
			C—N		N—H		C—H		
			Σ вклад	μ_{CN}	Σ вклад	μ_{NH}	Σ вклад	μ_{CH}	
3418 ср.	3420	4,552	1,654		0,942				
3072 ср.	3065	0,235					0,230		
3053 ср.	3058	1,088					1,121		
3037 с.	3055	0,049					0,050		
1618 о.с.	1626	0,011							
1603 о.с.	1603	8,419	3,521				1,085	3,020	
1503 с.	1500	5,243	0,104				4,456	2,326	
1276 о.с.	1279	4,229	0,171		0,131			1,792	1,343
1173 с.	1169	0,849	0,180				0,239		
1028 ср.	1026	0,629					0,480	0,693	
990 ср.	987	0,144	0,140	0,374				0,088	0,298
968 сл.	974	0,028	0,089	0,116					
874 с.	874	0,343					0,297	0,294	
812 о.сл.	804	0,092	0,047	0,200			0,022		
745 с.	739	0,521	0,446	0,425	0,101				
690 с.	696	17,255					17,572	17,572	
542	546	1,201	0,454	0,191	0,927		0,921	0,509	0,500
526 сл.	524	0,256	0,150				0,302	0,300	
500 ср.	497	2,481	0,564			0,778	0,770	0,195	0,192
233	210	0,171	0,764			0,248	0,248		
3500 ср.	3499	1,967				2,516			
3088 ср.	3060	1,994						2,021	
3025 ср.	3054								
1590 сл.	1603	0,024	0,172					0,209	0,123
1468 ср.	1459	3,872	0,089	0,263			3,160	1,322	
1324 сл.	1321								
1190 ср.	1198	0,503	0,188			0,167	0,151	0,280	0,182
1152 ср.	1154	0,401				0,144		0,165	
1090 ср.	1099	0,069						0,031	
1050 ср.	1040	0,088	0,072			0,295	0,275	0,212	0,261
957 сл.	954								
825 о.сл.	823								
619 о.сл.	616								
415 ср.	429								
390 ср.	374	0,574	0,355						
210	—								

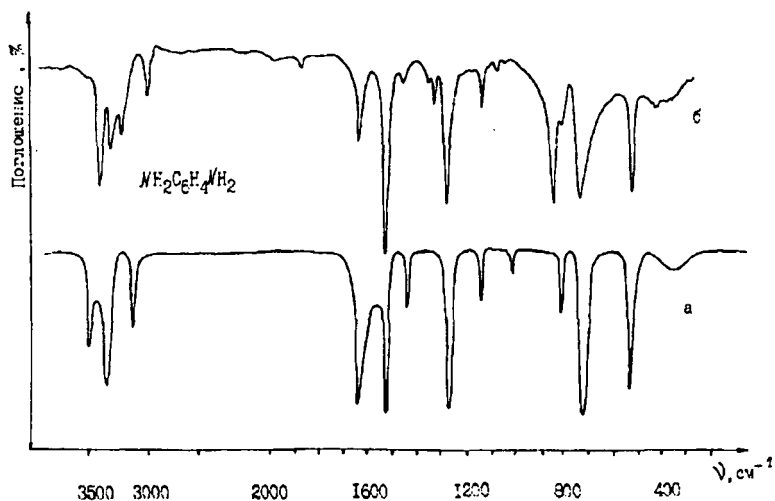


Рис. 1. Теоретические (а) и экспериментальные (б) ИК спектры поглощения молекулы анилина $C_6H_5NH_2$.

Теоретическая спектральная кривая строилась как огибающая суммарных гауссовых кривых, моделирующих индивидуальные полосы поглощения, соответствующие нормальным колебаниям. Значения полуширин полос поглощения вводятся как эмпирические параметры из-за отсутствия теории, обосновывающей их выбор, но на основе большого опыта их подбора, накопленного при составлении банка данных молекулярных структур [11], и свойства переносимости в ряду родственных соединений. Таким образом, значения полуширин полос поглощения для молекул ряда анилина выбирались согласно соответствующим значениям для аналогичных фрагментов [11].

Теоретические и экспериментальные ИК спектры поглощения для молекулы анилина

$C_6H_5NH_2$, [25] п-фенилендиамин $H_2C_6H_4NH_2$ [22] представлены на рис. 1 и 2. Хорошее согласие этих спектральных кривых доказывает правильность определения молекулярных параметров для соединений рассматриваемого ряда.

Следует отметить, что в литературе встречаются сообщения о том, что пирамидальная группа $-NH_2$ становится плоской и угол NNH раскрывается на 120° в зависимости от близости к ней замещенного в молекуле анилина атома водорода на группу CH_2 , и таким образом симметрия соединений изменяется на C_{2v} или C_s . Подобное предположение требует исследований, поэтому в соединениях, рассматриваемых в этой статье, использовалась группировка $-NH_2$ с пирамидальной конфигурацией.

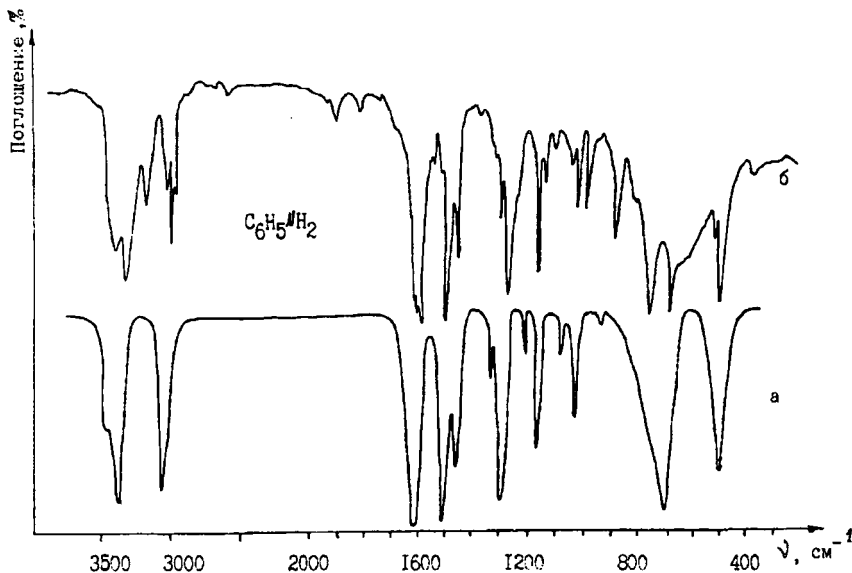


Рис. 2. Теоретические (а) и экспериментальные (б) ИК спектры поглощения молекулы *p*-фенилендиамина $\text{NH}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{NH}_2$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вилков Л.В., Мастрюков В.С. и др. Л.: Химия, 1978. — 2. Волькенштейн М.В., Грибов Л.А., Ельшиевич М.А., Степанов Б.Н. Колебания молекул. М.: Наука, 1972. — 3. Грибов Л.А. Введение в молекулярную спектроскопию. М.: Наука, 1976. — 4. Грибов Л.А., Дементьев В.А. Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул. М.: Наука, 1981. — 5. Грибов Л.А., Дементьев В.А. Моделирование колебательных спектров сложных соединений на ЭВМ. М.: Наука, 1989. — 6. Дементьев В.А., Носкова М.П., Грибов Л.А. Расчет интегральных интенсивностей полос

поглощения колебательного спектра молекулы диэтиламина. — *Опт. и спектр.*, 1972., т. 33, с. 1004—1006. — 7. Дементьев В.А., Смирнов В.И., Грибов Л.А. Вычисление электрооптических параметров многоатомных молекул по методу наименьших квадратов с помощью ЭВМ. — *ЖПС*, 1974, т. 20, с. 261—264. — 8. Корженевская Н.Г., Титов Е.В. О сопряжении моноалкил- и диалкиламиногрупп с фенильным кольцом. *Журн. орг. хим.*, 1987, т. 23, вып. 6, с. 1228—1230. — 9. Новоселова О.В., Дементьев В.А., Грибов Л.А. Расчет кривых спектрального распределения коэффициента поглощения в колебательных спектрах ряда диенов с изолированными

- двойными связями. — Изв. ТСХА, 1983, вып. 6, с. 171—175. — 10. Новоселова О.В. Определение систем полуэмпирических параметров для расчета спектральных кривых ИК поглощения некоторых гомологических рядов. — Автореф. канд. дис. М., 1984. — 11. Новоселова О.В., Грибов Л.А. Состав и опыт эксплуатации библиотеки молекулярных структур для обеспечения массовых расчетов ИК спектров органических соединений. — Журн. структ. химии, 1993, т. 31, с. 197—201. — 12. Тодоровский А.Т. Моделирование электрооптического поля при фрагментарном расчете ИК спектров простых эфиров. — ЖПС, 1983, т. 38, вып. 4, с. 632—638. — 13. Baruah G.D. — Indian J. Pure Appl. Phys., 1970, vol. 8, p. 677—678. — 14. Evans J.S. — Spectrochim. Acta, 1960A, vol. 16, p. 428—442. — 15. Higuchi S., Tsicyta H., Tanaka S., Kamada H. — Spectrochim. Acta, 1974, vol. 30A, p. 463—477. — 16. Krueger P.J. — Nature, 1962, vol. 194, p. 1077—1078. — 17. Lister D.G., Tyler J.K., Hog J.H., Larsen N.W. — J. mol. struct., 1974, vol. 23, N 2, p. 253—264. — 18. Larsen N.W., Hansen E.L., Nicolaissen F.M. — Chem. Phys. Letters, 1976, vol. 43, p. 584—586. — 19. Prasad M. — Indian J. Pure Appl. Phys., 1975, vol. 13, p. 345—348. — 20. Quack M., Strockburger M. — J. mol. spectroscopy, 1972, vol. 42, N 1, p. 87—116. — 21. The Sadtler standart spectra: Infrared grating spectra. Philadelphia, Sadtler res. lab., 1966, vol. 1, 392K. — 22. The Sadtler standart spectra: Infrared grating spectra. Philadelphia, Sadtler res. lab., 1970, vol. 9, 8322K. — 23. Singh S.K., Singh R.N. — Acta Phys. Polonica, 1986, A69, 4, p. 501—505. — 24. Tsuboi M. — Spectrochim. Acta, 1960, vol. 16, p. 505—512. — 25. Zefu Nie, Dunn K.M., Boggs J. — Molecular Phys., 1985, vol. 55, N 2, p. 421—432.

Статья поступила 10 апреля
1997 г.

SUMMARY

The uniform set of force constants and electrooptic parameters for aniline series molecules is obtained on the base of fragmentary calculation method with the use of experimental data on frequencies and spectral curves of absorption for IR range.