Analysis of infrared spectra of neat liquid N-methylpyrrole.

Autorzy

Krzysztof B. Beć

Robert Wieczorek

Barbara Łydżba-Kopczyńska

Jerzy P. Hawranek

Rok wydania

2013

Czasopismo

Acta Physica Polonica A

Numer woluminu

124

Strony

115-121

DOI

10.12693/APhysPolA.124.115

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Thevibrationalprop ertiesofneatliquidN-methylpyrrolewereinvestigated.Quantitativenear-infraredandmid-infraredsp ectrarecordingsincludingthinlmMIRtransmissionstudieswerep erformed.Basingonthesedatatheopticalconstantsof N-methylpyrroleinthe12500560cm−1regionweredetermined.Theexp erimentwassupp ortedbyananharmonicanalysisbasedonMöllerPlessetp erturbationtheoryanddensityfunctionaltheorylevelof theory,includingthehybridB2PLYPfunctional.Assignm osedbasingonp otentialenergydistributioncalculationsandacomparisonofexp erimentalandsimulatedsp ectrawaspresented.Theinaccuracyofstaticcalculationsintherepro ductionofexp erimentalsp ectrumintheCHstretchingregionhasb eenobservedandexplainedbytherotationofmethylgroup.Avibrationalsp ectrumwasthereforecalculatedbytheuseofCarParinellomoleculardynamicsmetho dforab ettersimulationofexp erimentalsp ectrum.

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.12693/APhysPolA.124.115

Strona internetowa wydawcy

http://www.ifpan.edu.pl