

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ИК СПЕКТРОВ ГИДРАТИРОВАННЫХ КАТИОНОВ

Л.С. Нечаева, Е.В. Бутырская

С использованием программы Gaussian 03 исследовано влияние метода расчета и базиса на ИК спектры молекулы воды, димера воды и гидратированных одной и двумя молекулами воды катионов щелочных металлов (Li^+ , Na^+ , K^+).