

Tokar A., Chihvintseva O., Milosavljević M. (2023). The Quantum-Chemical Prediction for Some NMR Spectral Parameters in Systems Based on Aromatic Polyamides. In: Karabegovic I., Kovačević A., Mandzuka S. (eds). New Technologies, Development and Application VI. NT 2023. Lecture Notes in Networks and Systems, vol. 707. Springer, Cham. pp. 236-241. – Режим доступу :

Квантово-хімічний прогноз деяких спектральних параметрів ЯМР в системах на основі ароматичних поліамідів

Andrey Tokar, Olga Chihvintseva Milan Milosavljević

Токар Андрій Володимирович

Чигвінцева Ольга Павлівна

Мілан Мілосавлевич

¹H NMR-spectrum; ab initio calculations; Onsager solvation model; polarizable continuum method; solvation energy

¹H ЯМР-спектр; розрахунки ab initio; Модель сольватації Онзагера; метод поляризаційного континууму; енергія розчинення

Using the ab initio methods of quantum chemistry a detailed theoretical study of the basic parameters for nuclear magnetic resonance spectra has been carried out using the example of N-phenylbenzamide, which plays the role of a prototype for a monomeric chain of aromatic polyamides, in particular phenylons. The calculation results are quite consistent with the data of this type, as obtained earlier, and indicate a valid reproduction of the spectral characteristics for the model system within the selected theoretical approximation, both in vacuo as well as in the medium of dipolar aprotic solvents, namely dimethylacetamide and dimethyl sulfoxide

За допомогою методів квантової хімії ab initio проведено детальне теоретичне дослідження основних параметрів спектрів ядерного магнітного резонансу на прикладі N-фенілбензаміду, який є прототипом мономерного ланцюга ароматичних поліамідів, зокрема фенілоні. Результати розрахунків цілком узгоджуються з даними такого типу, отриманими раніше, і вказують на достовірне відтворення спектральних характеристик модельної системи в межах обраного теоретичного наближення як у вакуумі, так і в середовищі дипольярних апротонних розчинників, а саме диметилацетамід і диметилсульфоксид.