

Решение спектральной задачи для молекулы 5-метокси-4-нитробензофураксана в координатах X_8^0

© Белик Александр Васильевич

Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский государственный университет. Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия.

Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: belik@csu.ru

Ключевые слова: 5-метокси-4-нитробензофураксан, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_8^0 , расчеты DFT, частоты нормальных колебаний.

Аннотация

Представленная работа является продолжением цикла квантово-химических расчетов автора, посвященных памяти известного ученого в области химии фураксанов и фуразанов Ленора Ивановича Хмельницкого (1927-1995). 1,2,5-оксадиазол-2-оксиды обладают уникальными свойствами, которые обусловлены их внутренним строением. Исследование строения таких соединений и их физико-химических характеристик является актуальной задачей. В работе рассмотрена молекула 5-метокси-4-нитробензофураксана. Вещество, образованное этими молекулами, интересно тем, что оно легко подвергается перегруппировке Боултона-Катрицкого. Известно, что без 5-заместителя перегруппировка не наблюдается, а с 5-метоксигруппой перегруппировка протекает легко уже при 33 °С. Автором сделано предположение, что такое поведение вещества связано с особенностями колебательного движения атомов в молекуле и, соответственно, с особенностями силового поля соединения. Поэтому, работа посвящена расчету частот и форм нормальных колебаний атомов в молекуле 5-метокси-4-нитробензофураксана. В качестве метода исследования в рамках DFT выбрано приближение B3LYP 6-311++G(3df,3pd). Силовое поле соединения рассчитано в координатах X_8^0 , как наиболее универсальных, позволяющих корректно решить спектральную задачу.

В результате, рамках метода функционала плотности B3LYP 6-311++G(3df,3pd) впервые получено силовое поле молекулы 5-метокси-4-нитробензофураксана в координатах X_8^0 . Найдены обобщенные силовые коэффициенты, вычислены частоты нормальных колебаний и проведено их отнесение к определенным видам колебаний.

Получено, что наибольшее значение обобщенного силового коэффициента среди связей N-O в молекуле 5-метокси-4-нитробензофураксана принадлежит связи N-O фураксанового кольца со стороны нитрогруппы и равно 23.8681 mdyн/Å. Максимальное значение обобщенного силового коэффициента принадлежит связи C=N фураксанового кольца со стороны нитрогруппы и имеет значение 25.9473 mdyн/Å. Обобщенные силовые коэффициенты связей C-N и N-O нитрогруппы в молекуле 5-метокси-4-нитробензофураксана равны, соответственно, 6.3597 и 12.7159 (средняя) mdyн/Å, полученные с использованием подхода B3LYP/6-311++G(3df,3pd) в координатах X_8^0 . Наиболее интенсивная полоса в расчетном спектре молекулы 5-метокси-4-нитрофураксана имеет частоту 1661 см⁻¹.