Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/17-51-8-120 *Подраздел:* Физическая органическая химия.
Цифровой идентификатор объекта – https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/17-51-8-120
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.162.7. Поступила в редакцию 24 августа 2017 г.

Решение спектральной задачи для молекулы 7-метокси-4-нитробензофуроксана в координатах X_{δ}^{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: 7-метокси-4-нитробензофуроксан, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_{δ}^{0}, расчеты DFT, частоты нормальных колебаний (волновые числа).

Аннотация

В рамках метода функционала плотности B3LYP 6-311++G(3df,3pd) впервые получено силовое поле молекулы 7-метокси-4-нитробензофуроксана в координатах X_{δ}^{0}. Найдены обобщенные силовые коэффициенты, вычислены частоты (волновые числа) нормальных колебаний и проведено их отнесение к определенным видам колебаний. Наиболее интенсивная полоса в расчетном спектре 7-метокси-4-нитробензофуроксана имеет значение 1344 $см^{-1}$. Основной вклад в это колебание вносит нитрогруппа. Однако, там присутствуют как валентные колебания связей C=N фуроксанового кольца, так и валентные колебания связей C-C бензольного кольца и деформационные колебания, связанные с атомами водорода. Следующая по интенсивности полоса имеет значение 1667 $см^{-1}$. В этом колебании участвует внециклическая связь N→O фуроксанового кольца, валентные колебания связей C-N фуроксанового кольца, валентные колебания связей C-C бензольного кольца и атомы нитрогруппы.

Для обобщенных силовых коэффициентов (f) нитрогруппы получены следующие их значения: $f_{C\text{-}N}$ = 6.9219 mdyn/Å, $f_{O\text{-}N}$ = 12.5353 mdyn/Å. Наибольшее значение обобщенного силового коэффициента связи N-O в молекуле 7-метокси-4-нитробензофуроксана получено для фуроксанового кольца со стороны нитрогруппы, которое равно 24.2323 mdyn/Å.

Показано, что перегруппировка 5-метокси-4-нитробензофуроксана в 7-метокси-4-нитробензофуроксан (перегруппировка Боултона-Катрицкого) сопровождается увеличением «жесткости связи» C-NO_2 на 0.5622 mdyn/Å, связи N→O на 0.3240 mdyn/Å, связи C-N_3 на 0.3466 mdyn/Å, связи O_2-N_3 (со стороны нитрогруппы) на 0.3642 mdyn/Å.

По значениям возрастания «жесткости связи» C-N_3 построен следующий ряд соединений: бензофуроксан (25.8974 mdyn/Å), 5-метокси-4-нитробензофуроксан (25.9473 mdyn/Å), 5-метил-4-нитробензофуроксан (26.0784 mdyn/Å), 4-нитробензофуроксан (26.1515 mdyn/Å), 7-метил-4-нитробензофуроксан (26.1994 mdyn/Å), 5-фтор-4-нитробензофуроксан (26.2838 mdyn/Å), 7-метокси-4-нитробензофуроксан (26.2939 mdyn/Å).

Отмечено так же, что перегруппировка Боултона-Катрицкого происходит в направлении соединения в котором нитрогруппа лежит в плоскости всей молекулы. При этом происходит уменьшение расчетного структурно-чувствительного дескриптора $\nu_{ср.}'$ с 956.72 $см^{-1}$ до 894.65 $см^{-1}$.