

Решение спектральной задачи для молекулы 7-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: 7-метокси-4-нитробензофураксан, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_8^0 , 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-нитробензофураксана в координатах X_8^0 . 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-нитробензофураксана имеет значение 1344 см^{-1} . Основной вклад в это колебание вносит нитрогруппа. Однако, там присутствуют как валентные колебания связей C=N фураксанового 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 фураксанового кольца, валентные колебания связей C-N фураксанового кольца, валентные колебания связей C-C бензольного кольца и атомы нитрогруппы.

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

Показано, что перегруппировка 5-метокси-4-нитробензофураксана в 7-метокси-4-нитробензофураксан (перегруппировка Боултона-Катрицкого) сопровождается увеличением «жесткости связи» C-NO₂ на 0.5622 mdyn/\AA , связи N→O на 0.3240 mdyn/\AA , связи C-N₃ на 0.3466 mdyn/\AA , связи O₂-N₃ (со стороны нитрогруппы) на 0.3642 mdyn/\AA .

По значениям возрастания «жесткости связи» C-N₃ построен следующий ряд соединений: бензофураксан (25.8974 mdyn/\AA), 5-метокси-4-нитробензофураксан (25.9473 mdyn/\AA), 5-метил-4-нитробензофураксан (26.0784 mdyn/\AA), 4-нитробензофураксан (26.1515 mdyn/\AA), 7-метил-4-нитробензофураксан (26.1994 mdyn/\AA), 5-фтор-4-нитробензофураксан (26.2838 mdyn/\AA), 7-метокси-4-нитробензофураксан (26.2939 mdyn/\AA).

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 ν_{cp} с 956.72 см^{-1} до 894.65 см^{-1} .