

Решение колебательной задачи для молекул *o*-нитротолуола и *m*-нитротолуола в координатах X_{δ}^0

© Белик*⁺ Александр Васильевич, Павличев Максим Юрьевич
и Мищинский Эрик Григорьевич

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

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *o*-нитротолуол, *m*-нитротолуол, 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 для *o*- и *m*-нитротолуола в координатах X_{δ}^0 . Определены обобщенные силовые коэффициенты связей в координатах X_{δ}^0 , вычислены частоты (волновые числа) нормальных колебаний и проведено их отнесение к определенным видам колебаний.

Получено, что для *o*-нитротолуола наиболее интенсивная полоса в колебательном спектре имеет значение 1376 см⁻¹. Преимущественно в данном колебании участвуют атомы нитрогруппы. Это валентное колебание связи C-N и симметричные колебания двух связей N-O, которые находятся в противофазе к C-N. Следующая по интенсивности полоса преимущественно «принадлежит» так же нитрогруппе. Она имеет значение 1579 см⁻¹. В этом колебании участвуют атомы N и O. Это асимметричные колебания двух связей N-O.

В молекуле *m*-нитротолуола так же присутствуют две характерные интенсивные полосы. Самая интенсивная полоса имеет значение 1375 см⁻¹. Ее можно так же отнести к валентным колебаниям в нитрогруппе. Это колебание связи C-N и, в противофазе к этому колебанию, симметричные колебания двух связей N-O. Вторая по интенсивности полоса со значением 1586 см⁻¹ соответствует (преимущественным образом) асимметричному колебанию (по отношению друг к другу) связей N-O.

Расчетные колебательные спектры двух молекул практически совпадают по значениям волновых чисел. Основные изменения в спектрах коснулись интенсивностей полос.

Отмечено, что в спектре *o*-нитротолуола по отношению к *m*-нитротолуолу выделяются две «новые» полосы: 1650 см⁻¹ и 875 см⁻¹. Первая из них состоит из асимметричного колебания двух связей N-O, колебания связи C-CH₃ и деформации углеродного скелета бензольного ядра. Полоса в 875 см⁻¹ так же «принадлежит» нитрогруппе. Это валентное колебание связи C-N, колебание валентного угла ∠ONO, угла ∠ССС бензольного кольца, расположенного на противоположной стороне молекулы от нитрогруппы.

В работе впервые найдены обобщенные силовые коэффициенты связей в молекулах. Так обобщенные силовые коэффициенты связей C-N и N-O нитрогруппы в молекуле *o*-нитротолуола получены равными 6.6098 mdyn/Å и 12.6860 mdyn/Å (средняя) в координатах X_{δ}^0 , соответственно. Обобщенные силовые коэффициенты связей C-N и N-O нитрогруппы в молекуле *m*-нитротолуола равны, соответственно, 6.5637 mdyn/Å и 12.7450 mdyn/Å (средняя).