

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/17-52-11-42 Подраздел: Физическая органическая химия.
Цифровой идентификатор объекта – <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/17-52-11-42>
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.162.7. Поступила в редакцию 18 ноября 2017 г.

Решение колебательной задачи для молекул *p*-нитротолуола и тринитротолуола в координатах X_8^0

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

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: *para*-нитротолуол, 2,4,6-тринитротолуол, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_8^0 , расчеты DFT, частоты нормальных колебаний (волновые числа).

Аннотация

В квантово-химическом приближении B3LYP 6-311++G(3df,3pd) впервые получено силовое поле для молекул *para*-нитротолуола и 2,4,6-тринитротолуола в координатах X_8^0 . Определены обобщенные силовые коэффициенты связей в этих координатах (X_8^0), вычислены волновые числа нормальных колебаний атомов в молекулах и проведено их отнесение к определенным типам колебаний.

Получено, что для *para*-нитротолуола наиболее интенсивная полоса в колебательном спектре имеет значение 1374 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 1577 см⁻¹. В этом колебании участвуют атомы N и O. Это асимметричные колебания двух связей N-O.

В молекуле 2,4,6-тринитротолуола так же присутствуют характерные интенсивные полосы с участием нитрогрупп. Самая интенсивная полоса имеет значение 1375 см⁻¹. Ее можно так же отнести к валентным колебаниям в нитрогруппе. Это преимущественно колебание связи C-N в положении 4 и, в противофазе к этому колебанию, симметричные колебания двух связей N-O. Вторая по интенсивности полоса со значением 1604 см⁻¹ соответствует (преимущественным образом) нитрогруппам в положениях 2 и 6. Это асимметричные колебания N-O в каждой из нитрогрупп, которые имеют согласованное движение друг относительно друга. Волновое число 1385 см⁻¹ соответствует следующей по интенсивности полосе и интерпретируется, как асимметричные колебания для нитрогрупп, в положениях 2 и 6 кольца. Это значит, что связи C-N изменяются в противофазе друг по отношению к другу. Внутри каждой из нитрогрупп связи N-O изменяются симметрично.

В работе впервые получены обобщенные силовые коэффициенты связей в молекулах *para*-нитротолуола и 2,4,6-тринитротолуола в координатах X_8^0 . Так обобщенные силовые коэффициенты связей C-N и N-O нитрогруппы в молекуле *para*-нитротолуола получены равными 6.6509 mdyн/Å и 12.7008 mdyн/Å (средняя) в координатах X_8^0 , соответственно. Обобщенные силовые коэффициенты связей C-N и N-O нитрогруппы в молекуле 2,4,6-тринитротолуола равны, соответственно, 6.4682 mdyн/Å и 12.8707 mdyн/Å (средняя).