

Силовое поле 2,4-динитротолуола в координатах X_8^0 в седловой точке

© Белик*⁺ Александр Васильевич 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: 2,4-динитротолуол, обобщенные силовые коэффициенты в седловой точке, координаты X_8^0 , расчеты DFT, частоты нормальных колебаний (волновые числа).

Аннотация

В рамках метода функционала плотности V3LYP 6-311++G(3df,3pd) впервые получено силовое поле для 2,4-динитротолуола в координатах X_8^0 в седловой точке. Определены обобщенные силовые коэффициенты связей в координатах X_8^0 , вычислены частоты (волновые числа) нормальных колебаний и проведено их отнесение к определенным видам колебаний.

Получено, что наиболее интенсивная полоса в колебательном спектре соединения имеет значение 1367 см⁻¹. Преимущественно в данном колебании участвуют атомы имеющих двух нитрогрупп. Это валентные колебания связей C-N, которые двигаются в противофазе друг по отношению к другу. Для связей N-O в каждой из нитрогрупп в данном колебании присутствуют их симметричные колебания. Однако для двух нитрогрупп они находятся в противофазе. Следующая по интенсивности полоса преимущественно «принадлежит» так же нитрогруппе. Она имеет значение 1581 см⁻¹. В этом колебании также участвуют атомы N, O нитрогруппы и атомы C бензольного кольца. По отношению к нитрогруппам наблюдаются асимметричные колебания двух связей N-O. Нитрогруппа участвует также в колебаниях, представленных волновыми числами: 168 см⁻¹ (деформационное асимметричное колебание двух валентных углов $\angle C-C-NO_2$), 293 см⁻¹ (деформационное симметричное колебание двух $\angle C-C-NO_2$), 349 см⁻¹ (валентное колебание связи C-N нитрогруппы, находящейся в *para*-положении к -CH₃), 358 см⁻¹ (валентное колебание связи C-N нитрогруппы, находящейся в *ortho*-положении к -CH₃), 515 см⁻¹ (деформационное асимметричное колебание двух $\angle C-N-O$), 654 см⁻¹ (деформационное колебание $\angle ONO$ нитрогруппы, находящейся в *para*-положении), 714 см⁻¹ (деформационные асимметричные колебания двух $\angle ONO$), 758 см⁻¹ (выход из плоскости атома азота нитрогруппы в *para*-положении), 797 см⁻¹ (выход из плоскости атома азота нитрогруппы в *ortho*-положении), 858 см⁻¹ (деформационное симметричное колебание двух $\angle ONO$), 932 см⁻¹ (асимметричное валентное колебание для двух C-N), 1078 см⁻¹ (валентное C-N нитрогруппы в *ortho*-положении), 1146 см⁻¹ (валентное асимметричное колебание двух связей C-N), 1381 см⁻¹ (валентное асимметричное колебание двух связей C-N и симметричные синхронные колебания связей N-O), 1591 см⁻¹ (асимметричные колебания связей N-O синфазные для двух нитрогрупп), 1641 см⁻¹ (асимметричные колебания связей N-O антифазные для двух нитрогрупп), 1648 см⁻¹ (асимметричные колебания связей N-O нитрогруппы в *ortho*-положении).