

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

© Белик\*<sup>+</sup> 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](mailto:belik@csu.ru)

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>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<sup>-1</sup>. 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<sup>-1</sup>. 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<sup>-1</sup> (деформационное асимметричное колебание двух валентных углов  $\angle C-C-NO_2$ ), 293 см<sup>-1</sup> (деформационное симметричное колебание двух  $\angle C-C-NO_2$ ), 349 см<sup>-1</sup> (валентное колебание связи C-N нитрогруппы, находящейся в *para*-положении к -CH<sub>3</sub>), 358 см<sup>-1</sup> (валентное колебание связи C-N нитрогруппы, находящейся в *ortho*-положении к -CH<sub>3</sub>), 515 см<sup>-1</sup> (деформационное асимметричное колебание двух  $\angle C-N-O$ ), 654 см<sup>-1</sup> (деформационное колебание  $\angle ONO$  нитрогруппы, находящейся в *para*-положении), 714 см<sup>-1</sup> (деформационные асимметричные колебания двух  $\angle ONO$ ), 758 см<sup>-1</sup> (выход из плоскости атома азота нитрогруппы в *para*-положении), 797 см<sup>-1</sup> (выход из плоскости атома азота нитрогруппы в *ortho*-положении), 858 см<sup>-1</sup> (деформационное симметричное колебание двух  $\angle ONO$ ), 932 см<sup>-1</sup> (асимметричное валентное колебание для двух C-N), 1078 см<sup>-1</sup> (валентное C-N нитрогруппы в *ortho*-положении), 1146 см<sup>-1</sup> (валентное асимметричное колебание двух связей C-N), 1381 см<sup>-1</sup> (валентное асимметричное колебание двух связей C-N и симметричные синхронные колебания связей N-O), 1591 см<sup>-1</sup> (асимметричные колебания связей N-O синфазные для двух нитрогрупп), 1641 см<sup>-1</sup> (асимметричные колебания связей N-O антифазные для двух нитрогрупп), 1648 см<sup>-1</sup> (асимметричные колебания связей N-O нитрогруппы в *ortho*-положении).