

Решение спектральной задачи для молекул фуразана и нитрофуразана в координатах X_{δ}^0

© Белик*⁺ Александр Васильевич и Соболев Екатерина Валерьевна

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: фуразан, нитрофуразан, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_{δ}^0 , расчеты DFT, колебательный спектр.

Аннотация

Для молекул фуразана и нитрофуразана впервые определены силовые коэффициенты в координатах X_{δ}^0 в рамках метода функционала плотности (DFT) в валентно-расщепленном базисе с корреляционным функционалом Ли, Янга и Парра, представленного известным акронимом B3LYP/6-311++G(3df,3pd). Полученные данные позволили оценить значения обобщенных силовых коэффициентов связей, вычислить волновые числа (или частоты нормальных колебаний атомов в молекулах) и провести их отнесение к определенным видам колебаний.

Так для молекулы фуразана получено, что обобщенные силовые коэффициенты связей C-N, N-O и C-H в молекуле равны, соответственно, 18.6189 mdyн/Å, 15.7142 mdyн/Å и 7.0115 mdyн/Å, полученные с использованием подхода B3LYP/6-311++G(3df,3pd) в координатах X_{δ}^0 . Координаты X_{δ}^0 предложены (впервые) Л.С. Маянцем и Г.Б. Шалтупером. Они позволили осуществить корректное решение спектральной задачи для объектов с любой комбинацией атомов (это молекулы с ковалентными связями, различные комплексы, сложные надмолекулярные образования и так далее), сохранив при этом «химическую наглядность» результатов. Появилась возможность оперировать старым понятием «силовой постоянной связи», которое в данном исследовании имеет смысл обобщенного силового коэффициента.

Для молекулы нитрофуразана получено, что обобщенные силовые коэффициенты связей C-H, C-N, и N-O с противоположной стороны от нитрогруппы равны, соответственно, 7.0442 mdyн/Å, 18.8364 mdyн/Å и 15.2080 mdyн/Å, полученные с использованием подхода B3LYP/6-311++G(3df,3pd) в координатах X_{δ}^0 . Обобщенные силовые коэффициенты связей C-N, и N-O со стороны нитрогруппы равны, соответственно, 18.7374 mdyн/Å, 16.3715 mdyн/Å. Силовой коэффициент связи C-NO₂ равен 6.5774 mdyн/Å. (По отношению к нитрометану «жесткость связи» C-N увеличена на 0.2917 mdyн/Å). Силовой коэффициент связи N-O нитрогруппы, расположенной в направлении связи C-H равен 12.6461 mdyн/Å. Силовой коэффициент связи N-O нитрогруппы, расположенной в другом направлении равен 13.1909 mdyн/Å. Среднее значение силового коэффициента N-O нитрогруппы близко к таковому в молекуле нитрометана.

Наиболее интенсивная полоса в спектре фуразана имеет значение 866 см⁻¹, которую можно отнести к вверному колебанию связей C-H по отношению к плоскости кольца.

Наиболее интенсивная полоса в спектре нитрофуразана имеет значение 1627 см⁻¹ которую можно отнести к асимметричным валентным колебаниям связей N-O нитрогруппы.