

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химическое исследование.
Идентификатор ссылки на объект – ROI-jbc-01/20-62-5-102 Подраздел: Физическая органическая химия.
Цифровой идентификатор объекта – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/20-62-5-102
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.162.7. Поступила в редакцию 15 мая 2020 г.

Теоретическое исследование силового поля дифтораминаотринитрометана в координатах X_{δ}^0

© Аверьянова Ольга Сергеевна и Белик Александр Васильевич

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 направления; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: молекула $F_2NC(NO_2)_3$, дифтораминаотринитрометан, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_{δ}^0 , расчеты DFT, частоты нормальных колебаний.

Аннотация

Актуальной задачей современных химиков-исследователей является изучение свойств молекул органических соединений. Новейшие достижения в области вычислительной техники и квантовой химии позволяют рассматривать различные физико-химические параметры изучаемых соединений с помощью теоретических выкладок. Расчетные методы могут серьезно упростить задачу, так как являются более безопасными и экономичными по сравнению с экспериментом. Отмечается, что производные метана в настоящий момент также представляют интерес для подобных исследований ввиду своего широкого применения. Данная статья посвящена изучению силового поля молекулы дифтораминаотринитрометана с помощью квантово-химических расчетов.

В роли основного приближения для проведенной работы был выбран метод теории функционала плотности (DFT) Бекке-Ли-Янга-Парра B3LYP с гибридным потенциалом 6-311++G(3df,3pd), так как при его использовании отмечается наилучшее качество получаемого результата. Также в настоящей работе в качестве альтернативы химическим (естественным) координатам были выбраны координаты X_{δ}^0 , что позволяет корректно рассматривать крутильные колебания. Вычисления, представленные в настоящей работе, были осуществлены благодаря применению программ Gaussian и GaussView, предназначенных для расчета большого количества свойств молекул и характеристик химических реакций.

С помощью предложенного подхода в настоящей статье проведена оптимизация геометрии молекулы дифтораминаотринитрометана, рассмотрены геометрические параметры данного соединения, в частности вычислены значения валентных углов, двугранных углов и длин связей, соответствующие минимальной энергии этой молекулы. Впервые рассчитаны обобщенные силовые коэффициенты для $F_2NC(NO_2)_3$, а также проведена оценка «жесткости» химических связей исследуемой молекулы. Вычислены и проанализированы частоты нормальных колебаний (волновые числа) для изучаемого соединения в гармоническом приближении. Приведено сравнение полученных волновых чисел с экспериментальными данными. Полученные результаты указывают на удовлетворительное согласие теории и эксперимента. Представлен общий вид колебательного спектра дифтораминаотринитрометана, полученный в результате квантово-химических расчетов. Сделан вывод о возможности применения подхода B3LYP 311++G(3df,3pd) для вычисления частот нормальных колебаний и силовых коэффициентов подобных молекул.