

Теоретическое исследование силового поля тринитрохлорметана 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 $\text{ClC}(\text{NO}_2)_3$, тринитрохлорметан, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_δ^0 , расчеты DFT, частоты нормальных колебаний.

Аннотация

В настоящее время в промышленности и медицине широко применяются нитросоединения. Это обуславливает необходимость более тщательного изучения их конкретных свойств и построения теоретических моделей для их предсказания. Особая роль в этом процессе отводится ИК- и КР-спектроскопии. Однако для интерпретации колебательных спектров необходимы модельные расчеты. Данная работа посвящена квантово-химическим исследованиям силового поля молекулы $\text{ClC}(\text{NO}_2)_3$ и решению прямой спектральной задачи для выбранного объекта.

В качестве основного подхода для проведенного исследования использован метод теории функционала плотности (DFT) Бекке-Ли-Янга-Парра B3LYP с гибридным потенциалом 6-311++G(3df,3pd), как наиболее перспективный. Кроме того, в настоящей работе в качестве альтернативы химическим (естественным) координатам были выбраны новые координаты X_δ^0 , что позволяет говорить о корректности выполненных расчетов. Вычисления, представленные в данной статье, реализованы с помощью компьютерных программ Gaussian и GaussView, предназначенных для расчета целого ряда свойств молекул и характеристик химических реакций.

С помощью выбранного метода в настоящей работе проведена оптимизация геометрии молекулы тринитрохлорметана, рассмотрены геометрические параметры исследуемого соединения, в частности вычислены значения валентных углов, двугранных углов и длин связей, характерных для равновесной конфигурации исследуемого соединения. Впервые получены обобщенные силовые коэффициенты для молекулы $\text{ClC}(\text{NO}_2)_3$ в координатах X_δ^0 , которые были предложены Маянцем Л.С. и Шалтупером Г.Б. в качестве универсальных координат, в которых возможно корректно решить спектральную задачу. Проведена оценка «жесткости» химических связей исследуемого соединения. Вычислены и проанализированы волновые числа (частоты нормальных колебаний) для исследуемой молекулы в гармоническом приближении. Дается сравнение полученных волновых чисел с экспериментальными данными. Полученные результаты демонстрируют удовлетворительное согласие теории и эксперимента. Представлен общий вид колебательного спектра тринитрохлорметана, полученный расчетным путем. Сделан вывод о возможности применения подхода B3LYP 6-311++G(3df,3pd) для вычисления частот нормальных колебаний и силовых коэффициентов подобных соединений.