

## Молекулярная структура и ИК-спектры бутилнитратов

© Егоров<sup>+</sup> Даниил Леонидович и Храпковский\* Григорий Михайлович

*Кафедра интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами.*

*Казанский национальный исследовательский технологический университет.*

*ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.*

*Тел.: (843) 231-42-53. E-mail: egorovdl2015@yandex.ru*

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** квантово-химический расчет, молекулярная структура, частоты колебаний, бутилнитраты, Gaussian.

### Аннотация

С использованием двух методов функционала плотности B3LYP/6-31+G(2df,p) и wB97X/Def2TZVPP определены геометрические параметры и частоты колебаний CONO<sub>2</sub>-группы, а также энтальпии образования и энергии диссоциации связи O-NO<sub>2</sub> в молекулах изомерных бутилнитратов (бутилнитрата, 2-бутилнитрата, изобутилнитрата, *трет*-бутилнитрата). Показано, что наблюдаемые изменения геометрических параметров CONO<sub>2</sub>-группы в ряду изученных соединений незначительны. По данным метода B3LYP они составляют для связи C-O 4.1 пм, для связи O-NO<sub>2</sub> – 0.7 пм, для угла ONO около 1 градуса. Близкие значения изменений в ряду предсказывает и другой используемый в работе метод (wB97X). Вместе с тем, результаты расчета позволяют достаточно надежно различить по значению геометрических параметров нитратные группы, присоединенные соответственно к первичным вторичным и третичным атомам углерода. Отмечено, что наибольшие значения энтальпий образования и энергий (энтальпий) диссоциации наблюдаются для соединений, в которых нитратные группы присоединены к первичному атому углерода. Выявлены корреляционные зависимости в изменении энтальпий образования соединений и радикалов, которые образуются при гомолитическом разрыве связи O-NO<sub>2</sub>. Тенденции изменения в ряду передают оба использованных в работе метода одинаково. Однако сравнение результатов с имеющимися экспериментальными данными по кинетике термического разложения изученных алифатических нитратов показывают, что наиболее надежными являются оценки метода wB97X/Def2TZVPP. Расчетные значения, полученные на основе другого использованного в работе метода B3LYP, являются заниженными, примерно на 3-4 ккал/моль. Установлено, что из валентных колебаний CONO<sub>2</sub>-группы характеристическими являются только асимметричные колебания N-O.