

Расчет колебательного спектра молекул трифторнитрометана, дифтординитрометана и фтортринитрометана в координатах X_8^0

© Белик*⁺ Александр Васильевич и Гайфулина Альбина Раисовна

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: трифторнитрометан, дифтординитрометан, фтортринитрометан, обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_8^0 , расчеты DFT, колебательный спектр.

Аннотация

В рамках метода функционала плотности (DFT) B3LYP 6-311++G(3df,3pd) проведены расчеты молекул трифторнитрометана, дифтординитрометана, фтортринитрометана. Определено силовое поле соединений (в равновесной геометрии). Затем полученные силовые коэффициенты из декартовой системы координат были переведены в координаты X_8^0 . В этих координатах каждый из векторов связей молекулы представлен в своей собственной прямоугольной системе координат. Сумма диагональных элементов полученной матрицы образует, так называемый, обобщенный силовой коэффициент каждой связи. Это дает возможность сравнивать силовые коэффициенты разных молекул и оценивать влияние молекулярной структуры соединений на «жесткости связей». Такой подход был предложен Л.С. Маянцем и Г.Б. Шалтупером с целью корректного решения 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.

В результате расчетов для молекулы трифторнитрометана определено, что обобщенные силовые коэффициенты связей C-F, C-N, N-O в молекуле равны, соответственно, 9.1324 mdyн/Å, 5.4022 mdyн/Å и 13.3059 mdyн/Å (средние значения), полученные с использованием подхода B3LYP/6-311++G(3df,3pd) в координатах X_8^0 . Для молекулы дифтординитрометана получено, что обобщенные силовые коэффициенты связей C-F, C-N, N-O (средние значения) равны, соответственно, 9.3025 mdyн/Å, 5.3066 mdyн/Å и 13.3694 mdyн/Å. Для молекулы фтортринитрометана получено, что обобщенные силовые коэффициенты связей C-F, C-N, N-O (средние значения) равны, соответственно, 9.6010 mdyн/Å, 5.1676 mdyн/Å и 13.4389 mdyн/Å.

Полученное силовое поле молекул позволило решить, так называемую, прямую спектральную задачу и найти частоты и формы нормальных колебаний в гармоническом приближении (для рассмотренных молекул).

Для молекулы трифторнитрометана найдена самая интенсивная полоса со значением в 1680 см⁻¹ которую можно отнести к антисимметричным валентным колебаниям связей N-O нитрогруппы.

Для молекулы дифтординитрометана найдена самая интенсивная полоса со значением в 1668 см⁻¹. Как и в случае трифторнитрометана, это антисимметричные валентные колебания связей N-O нитрогрупп (синхронное движение).

Для молекулы фтортринитрометана найдена самая интенсивная полоса со значением в 1693 см⁻¹. В этом колебании активное участие принимают атомы азота и кислорода нитрогрупп. Эту полосу можно отнести к антисимметричным согласованным валентным колебаниям связей N-O всех нитрогрупп.