

ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ МЕТА-НИТРОАНИЗОЛА

З. И. Гаджиев, С. Д. Демухамедова

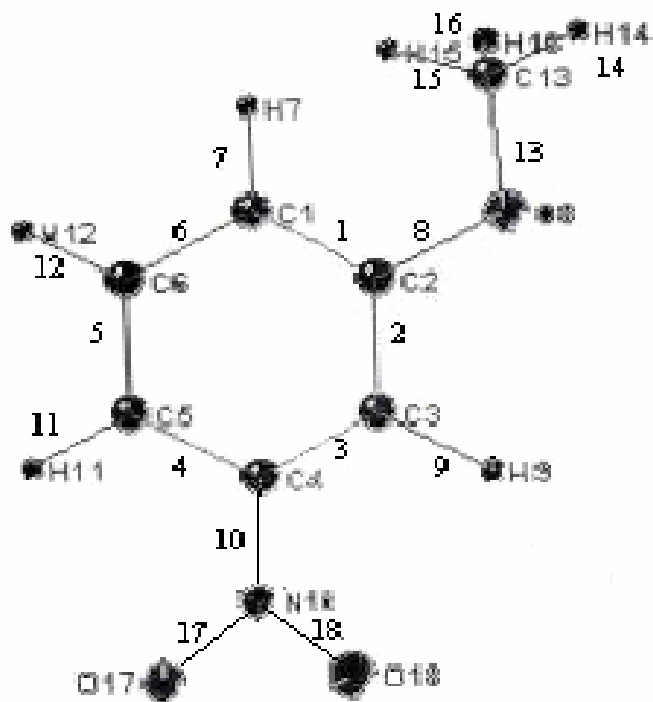
Институт Физических Проблем, Бакинский Государственный университет
e-mail: svetlanabest@mail.ru

Нитроанилины относятся к нитросоединениям, имеющим наиболее важное промышленное значение. Ароматические нитросоединения – это группа органических веществ, образованных от бензола и его гомологов (толуола и ксилола), нафталина и антрацена посредством замены одного или более атомов бензола нитрогруппой NO_2 .

Ароматические нитросоединения применяются в основном в составе взрывчатых веществ или в качестве растворителей. В основном данные соединения употребляются для восстановления производных анилина используемых в производстве красок, пигментов, инсектицидов, текстилей, пластических масс, смол, эластомеров (полиуретан), фармацевтических препаратов, регуляторов роста растений, присадок к топливу и ускорителей вулканизации каучука и антиоксидантов. Однако нитросоединения относятся к очень опасным, вредным веществам. Наиболее опасным следствием воздействия ароматических нитросоединений на здоровье является цианоз и анемия. Они также ядовиты для центральной нервной системы. Разнообразие физических и химических свойств нитросоединений определяется особенностями их молекулярного строения. Нами проведена серия работ по теоретическому исследованию ИК-спектров поглощения молекул, содержащих нитрогруппы.

В данной работе исследованы теоретические частоты нормальных колебаний и интенсивности ИК-спектра поглощения молекулы м-нитроанизола. Работа посвящена

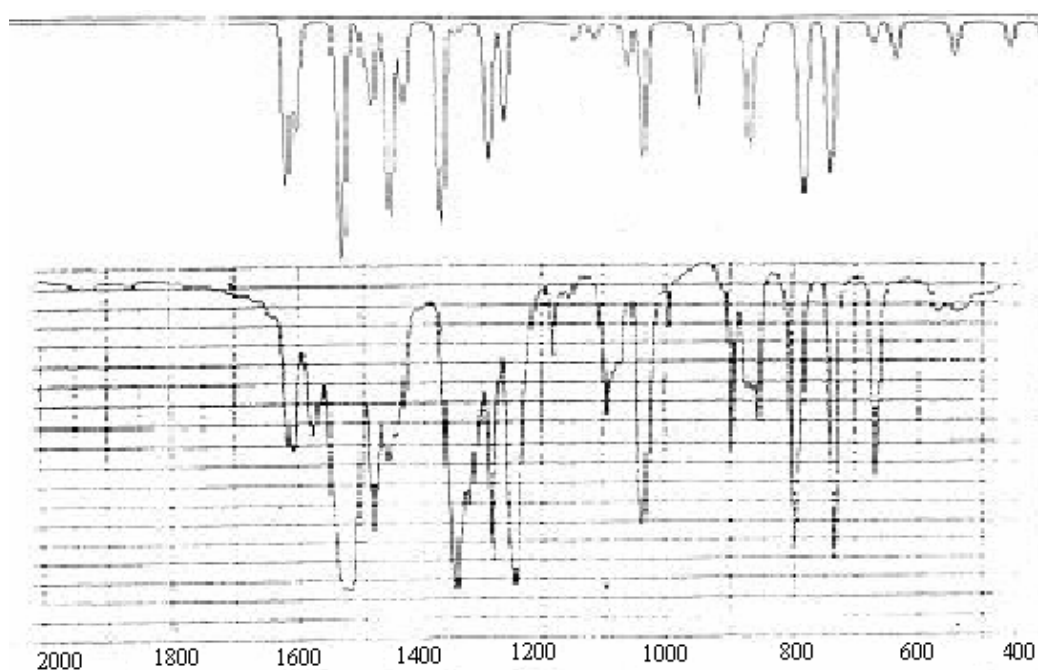
теоретическому исследованию колебательного спектра молекулы м-нитроанизола по методу, изложенному в [1-4]. Все расчеты проводились с использованием комплекса сервисных программ LEV [5]. На рисунке представлена расчетная модель молекулы мета-нитроанизола с нумерацией атомов и валентных связей. Модель молекулы м-нитроанизола создана методом фрагментарного расчета путем сшивки ранее созданной и исследованной нами молекулы анизола и молекулы нитрометана $\text{CH}_3\text{-NO}_2$. При этом одну из групп CH в анизоле заменяем на группу C-NO_2 в мета-положении к группе CO-CH_3 анизола. Все геометрические параметры, силовые постоянные и электрооптические параметры за исключением места сшивки фрагментов сохраняются как у



отдельных фрагментов. Силовые постоянные и электрооптические параметры для места сшивки молекулы м-нитроанизола определялись полуэмпирическим квантовохимическим методом расчета AM1 и в дальнейшем уточнялись решением обратных спектральных задач.

Для молекулы решены прямая и обратная спектральные задачи, найдены силовые и электрооптические параметры, определены частоты нормальных колебаний и

интенсивности в ИК спектре молекулы, а также построена теоретическая кривая распределения коэффициента поглощения модельной молекулы м-нитроанизола, которую можно наглядно сравнивать с экспериментальным ИК спектром поглощения молекулы мета-нитроанизола, взятым из атласа Садтлера [6]. Для теоретической интерпретации колебательного спектра молекулы м-нитроанизола был проведен анализ форм нормальных колебаний молекулы и распределения энергии по колебательным координатам. Анализ форм нормальных колебаний позволяет установить степень участия каждой колебательной координаты в данной полосе поглощения, а исследование распределения потенциальной энергии по различным колебательным координатам показывает, в каком структурном элементе локализована потенциальная энергия данного нормального колебания молекулы. На рисунке приведены экспериментальный (нижний) и теоретический (верхний) ИК спектры молекулы мета-нитроанизола.



Нами также был проведен функциональный анализ, позволяющий изучить влияние различных функциональных группировок в молекуле на интенсивность частот колебаний, и, следовательно, на изменение теоретических спектров поглощения. Для этого в матрице электрооптических параметров молекулы задуляются элементы электрооптических параметров и дипольных моментов связей, соответствующие вырезаемой из молекулы функциональной группировки. После этого спектр исследуемой молекулы строится в отсутствии определенных групп атомов, что помогает визуально и аналитически точнее представить какие именно полосы, а следовательно колебания, зависят от той или иной группировки атомов. Так для молекулы мета-нитроанизола рассчитывался колебательный спектр молекулы вначале без группировки C-NO₂, которая вырезалась из модели молекулы. Затем строился вычитаемый спектр в отсутствии другой группы атомов, когда в модели молекулы вырезалась группа C-NH₃.

Таким образом, нами полностью решена спектральная задача для молекулы мета-нитроанизола и сделана подробная теоретическая интерпретация ее колебательного спектра поглощения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] М.В. Волькенштейн, Л.А. Грибов, М.А. Ельяшевич, Б.И. Степанов, Колебания молекул, М., Наука, 1972.

- [2] Л.А. Грибов, Введение в молекулярную спектроскопию, М., Наука, 1976.
- [3] Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул, М., Наука, 1981.
- [4] Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, Моделирование колебательных спектров сложных соединений на ЭВМ, Наука, 1989.
- [5] L.A. Gribov, Light elucidation of vibrations, The description of the program and instruction to the user, ООО «INLAN», 1995.
- [6] The Sadtler standard spectra infrared grating spectra, Philadelphia: Sadtler research laboratories, 1978.