

ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

Празян Тигран Леонидович

ведущий инженер, магистрант

ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет»

г. Кемерово, Кемеровская область

**АНАЛИЗ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ЧАСТОТНОГО
СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ $C_6H_4N_3O_6$**

Аннотация: в работе представлен обзор геометрической структуры и ИК-спектра энергетического материала $C_6H_4N_3O_6$. Расчет проведен методами B3LYP, B3PW, PBE0 и HF. Первопринципный расчет выполнен для структуры в газовой фазе.

Ключевые слова: высокоэнергетические материалы, $C_6H_4N_3O_6$, первопринципные методы.

Исследование структурных и электронных свойств – одни из важнейших задач в изучении новых химических соединений. В частности, исходя из таких свойств можно сделать выводы об эффективности синтеза высокоэнергетических материалов, их восприимчивости к внешним воздействиям (трению, удару и др.), скорости и давлении детонации таких веществ [1]. В связи с этим, проведена работа по выявлению метода расчета одного из высокоэнергетических материалов в газовой фазе, ранее не был изучен. Дальнейшее исследование кристаллической структуры будет проводиться на основании изучения молекулярной модели данного вещества. Выбор для исследования молекулярной модели объясняется тем, что кристаллы высокоэнергетических материалов являются молекулярными и логично предположить, что физико-химические свойства изолированной молекулы будут слабо отличаться от свойств уже кристаллических структур.

$C_6H_4N_3O_6$ представляет собой структуру, в основании которой лежит бензольное кольцо, к трем атомам углерода присоединены единичные атомы водорода, еще к двум – две нитрогруппы, к последнему атому углерода цепляется нитрогруппа, к одному из кислорода в которой присоединен атом водорода.

Расчет проводился с использованием программного пакета CRYSTAL09 [2], основанный на методе линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Базисные наборы [3], использовавшиеся при расчетах: C_6-21G*, H_3-1p1G, N_6-31d1G, O_6-31d1. Так, оптимизация геометрии представлена в таблице 1. Полная энергия приведена в кэВ, длины связей – в Å, углы – в °.

Таблица 1

Полная энергия, длины связей и углы в молекуле $C_6H_4N_3O_6$

	B3LYP	B3PW	PBE0	HF
E_{tot}	-23.013	-23.015	-22.999	-22.896
C – H	1.082	1.084	1.084	1.071
C ₄ –(NO) ₂	1.473	1.468	1.463	1.457
C ₆ –NO ₂	1.464	1.459	1.455	1.447
C ₂ –NO ₂ H	1.377	1.373	1.369	1.343
O ₂ – H ₄	0.977	0.975	0.973	0.952
C ₄ – C ₂ – C ₅	118.73	118.83	118.87	118.19
O ₄ – N ₃ – O ₆	125.39	125.57	125.63	125.24
N ₁ – O ₂ – H ₄	104.22	104.41	104.56	105.45
O ₁ – N ₁ – O ₂	118.84	119.06	119.06	117.39

Анализируя полученные значения минимумов энергий можно сделать вывод о том, что наиболее вероятную геометрическую структуру позволяют рассчитать B3LYP и B3PW. Ранее при исследовании уже известных энергетических материалов было выявлено, что метод B3LYP дает более близкие к экспериментальным данным длины связей и углы. Значит, дальнейшее исследование электронных свойств данной молекулы будет производиться этим методом.

На рисунке 1 представлен ИК-спектр молекулы $C_6H_4N_3O_6$ и ее визуализация.

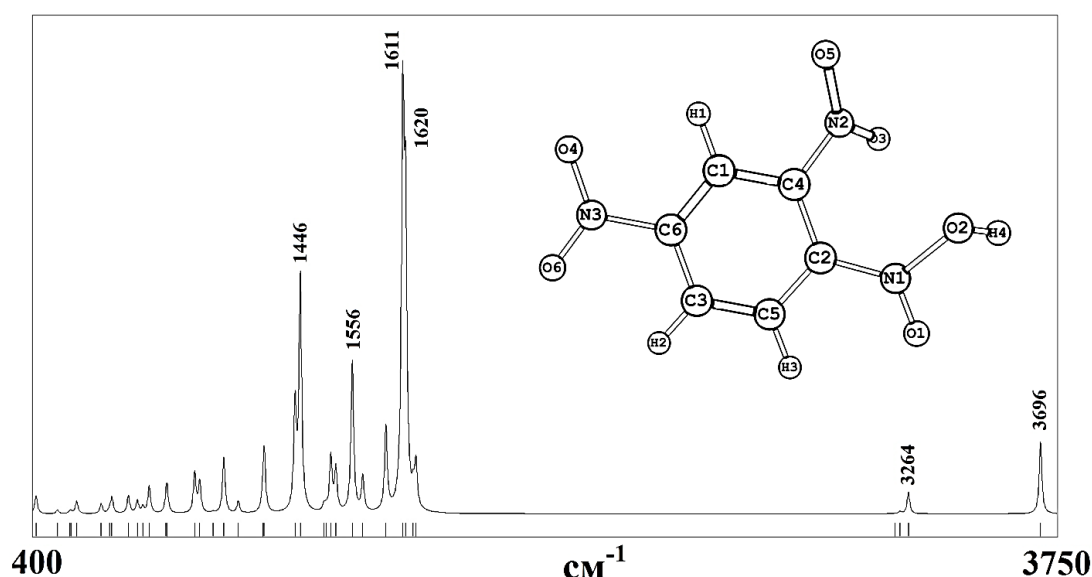


Рис. 1. ИК-спектр и визуализация молекулы $C_6H_4N_3O_6$

Анализ спектра дал следующие результаты по колебаниям связей: при частоте 1446 см^{-1} и интенсивности 350 км/моль и частоте 1556 см^{-1} интенсивности 192 км/моль колеблются связи $C_1 - H_1$, $C_2 - C_4$, $C_3 - H_2$, $C_5 - H_3$, $C_6 - C_1$, $C_6 - C_3$. При частоте 1611 см^{-1} и интенсивности 895 км/моль и частоте 1620 см^{-1} интенсивности 642 км/моль колеблются связи $C_1 - H_1$, $C_3 - H_2$, $C_5 - H_3$. При частоте 3264 см^{-1} и интенсивности 50 км/моль колеблется связь $C_1 - H_1$; частоте 3696 см^{-1} интенсивности 166 км/моль – связь $O_2 - H_4$. Колебания связей, содержащих атомы кислорода, лежат в диапазоне от 400 до 1700 см^{-1} и имеют низкие интенсивности.

Список литературы

1. Празян, Т.Л. Исследование физико-химических свойств ряда взрывчатых веществ методами компьютерного моделирования / Т.Л. Празян, Ю.Н. Журавлев // Вестник КемГУ. – 2014. – №4 (60). – Т. 2. – С. 137–144.
2. Dovesi R. CRYSTAL09 User's Manual / R. Dovesi, V.R. Saunders, R. Roetti et al. // University of Torino: Torino. – 2009.
3. CRYSTAL Basis Sets Library // [Электронный ресурс] / Режим доступа: http://www.crystal.unito.it/Basis_Sets/Ptable.html