
СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 539.193/194.535/33/34

МОДЕЛЬНЫЕ РАСЧЕТЫ ГЕОМЕТРИИ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ИЗОМЕРОВ ТРИНИТРОФЕНОЛА

Элкин Михаил Давыдович, доктор физико-математических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru.

Смирнов Владимир Вячеславович, кандидат физико-математических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru.

Джалмухамбетова Елена Азатуллаевна, кандидат физико-математических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: alenna@list.ru.

Гайсина Альфия Рафаиловна, ассистент, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: gaisinaalfiya@mail.ru.

Алыкова Ольга Михайловна, кандидат педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru.

На основании неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала в данной работе предложена интерпретация колебательных состояний тринитрофенола. Построены структурно-динамические модели его изомеров, выявлены признаки их спектральной идентификации. Проведен анализ конформационной структуры исследуемого соединения. Обоснован выбор метода и базиса расчета частот фундаментальных колебаний и интенсивностей полос в спектрах ИК и КР. Описана методика оценки ангармонизма колебаний с использованием кубических и квартичных силовых постоянных. В статье представлены результаты численного эксперимента, определены геометрические параметры молекул, такие как длины валентных связей и величины углов между ними. Получены частоты колебательных состояний и величины их интегральных интенсивностей. Проведены интерпретация колебаний изомеров тринитрофенола и сравнение с имеющимися экспериментальными данными для замещенных нитротолуолов. Указаны общие закономерности в характере поведения спектральных полос различных изомеров. Предложены частоты, которые можно использовать для идентификации изомера по колебательным спектрам молекул. Расчет проводился квантовым методом функционала плотности DFT/B3LYP. Показано, что данный метод может быть использован для моделирования геометрических параметров молекул и электронной структуры различных замещенных нитробензола. Он позволяет построить на основе численных расчетов структурно-динамические модели указанного класса соединений.

Ключевые слова: тринитрофенол, изомеры тринитрофенола, колебательные спектры, молекулярные спектры, ИК спектры, адиабатический потенциал, силовые постоянные.

MODEL CALCULATIONS OF GEOMETRY AND VIBRATIONAL SPECTRA OF TRINITROPHENOL ISOMERS

Elkin Michael D., Sc.D. (Physics and Mathematics), Professor, Astrakhan State University, 414056, Russia, Astrakhan, 20a, Tatishchev st., e-mail: elkinmd@mail.ru.

Smirnov Vladimir V., Ph.D. (Physics and Mathematics), Astrakhan State University, 414056, Russia, Astrakhan, 20a, Tatishchev st., e-mail: kof@aspu.ru.

Dzhalmuhambetova Elena A., Ph.D. (Physics and Mathematics), Astrakhan State University, 414056, Russia, Astrakhan, 20a, Tatishchev st., e-mail: alenna@list.ru.

Gaisina Alfiya R., assistant, Astrakhan State University, 414056, Russia, Astrakhan, 20a, Tatishchev st., e-mail: gaisinaalfiya@mail.ru.

Alykova Olga M., Ph.D. (Pedagogics), Astrakhan State University, 414056, Russia, Astrakhan, 20a, Tatishchev st., e-mail: kof@aspu.ru.

On the basis of ab initio quantum calculations for the adiabatic potential in this work we propose an interpretation of the vibrational states of trinitrophenol. Constructed the structural-dynamic models of isomers, showed signs of their spectral identification. The analysis of the conformational structure of the compound has been studied. Validated the choice of method and basis of the frequencies of fundamental vibrations and the intensities of the bands in the IR and Raman spectra estimating. The technique for evaluation of anharmonicity with cubic and quartic force constants is described. The paper presents the results of numerical experiments are defined geometrical parameters of molecules, such as the valence bond lengths and angles between them. We obtain the frequency of the vibrational states and the magnitude of their integrated intensities. Held interpretation of the oscillations of isomers of trinitrophenol and comparison with available experimental data for substituted nitrotoluenes. Indicated general patterns in the behavior of the spectral bands of different isomers. Proposed frequency that can be used to identify the isomers of the vibrational spectra of molecules. The estimation was performed with quantum density functional method DFT/B3LYP. It is shown that this method can be used for modelling of the molecular geometrical parameters and electronic structure of various substituted nitrobenzene. It allows to build on the basis of numerical calculations the structural-dynamic models of this class of compounds.

Key words: *trinitrophenol, trinitrophenol isomers, vibrational spectra, molecular spectra, IR spectra, adiabatic potential, force constants.*

Введение. Тринитрофенол (мелинит, пикриновая кислота) – бризантное взрывчатое вещество, близкое по взрывчатым характеристикам к нитротолуолу, на которые замена алкильной группы (CH_3) на гидроксильный фрагмент (COH) существенно не влияет. При этом, по умолчанию, речь идет о 1,3,5-тринитротолуоле (1,3,5-ТНТ) и тринитрофеноле (1,3,5-ТНФ), хотя возможны и иные изомеры. Для ТНТ этот вопрос был, к примеру, предметом публикации [4]. Однако, в отличие от ТНТ, изомеры ТНФ могут иметь конформеры, связанные с двумя положениями фрагмента COH , разделенными потенциальным барьером. Для фенила и ряда гидроксифенилов исследования, связанные с оптимизацией модельных конформеров и оценкой параметров адиабатического потенциала представлены в публикациях [2, 4]. В данном сообщении показаны результаты моделирования параметров адиабатического потенциала и интерпретации фундаментальных колебательных состояний возможных изомеров ТНТ и конформеров каждого изомера.

Модельные расчеты геометрии частот колебаний. Вычислительный эксперимент осуществлялся в рамках метода функционала плотности DFT/B3LYP [6] с базисами 6-311G, 6-311G**, 6-311+G**. Отметим, что подобные теоретические исследования представлены, к примеру, в публикациях [7, 9], однако авторы ограничились рассмотрением лишь 1,3,5-(2,4,6-) изомера в рамках гармонического приближения теории молекулярных колебаний.

В исходных моделях изомеров предполагалась плоская структура шестичленного цикла. Конформеры определяются взаимным расположением гидроксильного фрагмента относительно нумерации положений заместителей (рис. 1). Рассмотрены изомеры с симметрией C_s (плоскости фрагментов NO_2 и фенольного кольца совпадают или перпендикулярны) и изомеры с симметрией C_1 , полученные изменением угла между фрагментом COH и фе-

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

нольным циклом. Такой подход дает возможность установить наличие потенциального барьера в сечении поверхности адиабатического потенциала, связанного с крутильными колебаниями связи ОН гидроксильного фрагмента относительно плоскости углеродного цикла, оценить величину барьера внутреннего вращения нитрогрупп относительно связей СN, выявить изомеры, в которых может иметь место внутримолекулярное взаимодействие между фрагментами NO₂ и СОН.

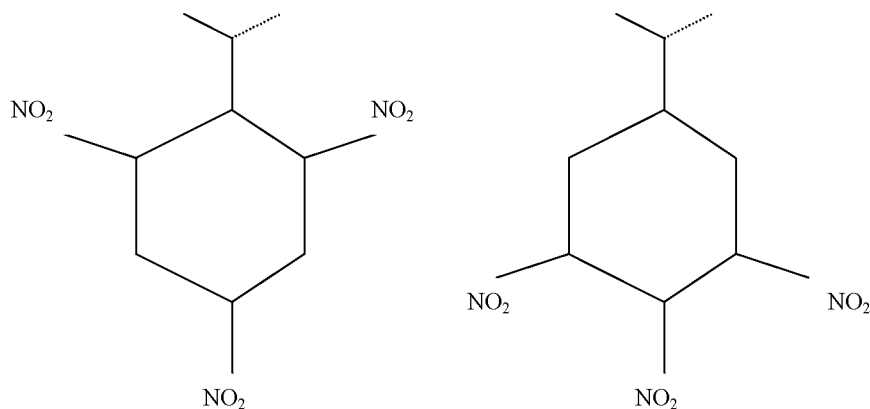


Рис. 1. Молекулярные диаграммы 1,3,5- и 1,2,6-ТНФ

Проведенные модельные расчеты позволили установить следующие общие закономерности в результатах оптимизации геометрических параметров изомеров ТНФ. Если исходить из предположения о принадлежности соединений к группе симметрии C_s, то не воспроизводятся частоты крутильных колебаний фрагментов С-NO₂ (отрицательные значения по модулю ~30 см⁻¹ для плоской исходной конфигурации изомеров, доходит до величины ~90 см⁻¹ для неплоской исходной конфигурации симметрии C_s, получаемой поворотом нитрогруппы вокруг связи СN на угол π/2).

Понижение симметрии до группы C₁ в исходной конформации за счет нарушения общей компланарности атомов гидроксильного фрагмента и углеродного кольца воспроизводит все крутильные колебания (в диапазоне 40–80 см⁻¹). Таким образом, приближение свободного вращения нитрогрупп, принятое в классической молекулярной динамике [1], не лишено оснований. При этом значение угла между плоскостью кольца и плоскостью фрагмента СОН не превышает величины ~7°. Эти результаты дают основание констатировать наличие высокого потенциального барьера между двумя положениями гидроксильного фрагмента относительно плоскости бензольного кольца, что согласуется с выводами работ [2, 4].

Для моделей изомеров симметрии C₁ некомпланарность атомов бензольного остова C₆H₂N₃O не превышает величины ~0,15 Å, а углеродного остова – 0,08 Å. Изменения длин связей углеродного кольца по сравнению с их значениями в бензоле не превышает величины ~0,02. Отклонение валентных углов кольца от значения в 120° не превышают величины ~5,5°. При этом, согласно расчетам, сумма трех смежных углов остова C₆H₂N₃ попадает в интервал 359° – 360°.

Таблица 1

**Диапазоны изменения геометрических параметров
нитро- и гидроксид- фрагментов в изомерах ТНФ**

Изомеры	Q_{OH}	β_{COH}	Q_{NO}	Q_{CN}	γ_{ONO}	Q_{O-H}
1, 3, 5	0,99	107,1	1,21–1,22	1,47–1,48	123,6–126,2	1,67
1, 2, 6	0,96	111,1	1,21–1,22	1,49	126,2–127,9	–
1, 2, 3	0,97–0,98	108,9–110,9	1,21–1,24	1,47–1,50	123,7–128,4	1,72
1, 2, 5	0,97–0,98	110,1–110,9	1,21–1,22	1,48–1,49	125,9–126,9	1,76
2, 3, 5	0,98	108,4–108,6	1,21–1,24	1,46–1,49	123,7–127,7	1,74–1,75
2, 3, 6	0,96–0,98	109,1–111,2	1,21–1,24	1,46–1,49	124,4–127,9	1,78

Согласно данным из табл. 1, зависимостью оптимизированных значений длин валентных связей и валентных углов для NO_2 и COH фрагментов от выбора исходной модели (C_s или C_1) можно пренебречь.

Сравнение результатов расчета частот фундаментальных колебаний и интенсивностей в спектрах ИК и КР для возможных изомеров ТНФ позволяет сделать вывод, что в диапазоне выше 700 см^{-1} выбор конкретного изомера модели симметрии C_s или C_1 не сказывается на интерпретации колебаний. Более того, полосы, связанные с валентными (Q_{NO}) и плоскими деформационными (γ_{ONO}) колебаниями нитрогрупп следует считать характеристическими по частоте и интенсивности в спектрах ИК. Для гидроксильного фрагмента таковыми свойствами обладают полосы, интерпретированные как валентные (Q_{OH}) и крутильные (χ_{OH}) колебания связи OH . Табл. 2 и 3 наглядно иллюстрируют сказанное.

Таблица 2

Интерпретация фундаментальных колебаний 1,3,5- и 1.2.6-тринитрофенола

Форма колебаний	$V_{эксп}$ [9]	1,3,5-ТНФ(-921.1943)				1,2,6-ТНФ(-921.1676)			
		ν_T	$\nu_{анг}$	ИК	КР	ν_T	$\nu_{анг}$	ИК	КР
Q_{OH}	3615 [2]	3344	3101	408	136	3788	3598	82	126
Q, γ, β	1632 [7]	1685	1630	277	9,8	1673	1619	1,2	13
Q_{NO}	1617	1653	1600	300	1,5	1664	1610	190	6,6
Q_{NO}	1557	1633	1580	156	16	1645	1592	250	2,1
Q, γ, β	1545	1611	1560	39	67	1621	1569	91	21
Q_{NO}, Q	1533	1592	1541	33	39	1633	1580	402	22
Q_{CO}, β	–	1503	1456	94	7,2	1509	1462	20	4,5
Q_{NO}	1350	1379	1337	104	156	1398	1356	160	59
Q_{NO}	–	1362	1322	380	114	1379	1337	41	48
Q, β	–	1343	1303	206	16	1378	1336	106	15
Q, β, Q_{CO}	1295 [2]	1321	1282	96	17	1320	1281	124	29
Q_{NO}, β, Q_{CN}	–	1301	1263	154	148	1375	1333	320	18
γ_{ONO}	917 [7]	924	899	73	4,8	936	911	73	4,2
γ_{ONO}	–	851	829	2,5	16	863	841	45	9,5
γ_{ONO}, γ	–	838	817	0,9	9,7	828	807	9,1	5,2
χ_{OH}	–	825	803	87	1,1	397	388	130	2,5

Примечание. Частоты колебаний в см^{-1} , интенсивности в спектрах ИК и КР в км/моль , в спектрах КР – в Å/а.е.м.

Для конформеров тех изомеров, нитрогруппы которых соседствуют с гидроксильным фрагментом, имеет место проявление внутримолекулярного взаимодействия. Механизм такого взаимодействия – водородная связь. На это указывают расчетные значения длин свя-

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

зей $Q_{O...H}$ (табл. 1) и характер смещения полос, интерпретированных как валентное и крутильное колебание связи ОН гидроксильного фрагмента (табл. 2). Валентное колебание смещается в длинноволновый диапазон на величину $\sim 320 \text{ см}^{-1}$, крутильное – в коротковолновый диапазон на величину $\sim 300 \text{ см}^{-1}$. Эти полосы интенсивны в ИК спектрах и могут быть использованы для идентификации конформеров ТНФ.

Таблица 3

Интерпретация колебаний нитро- и гидрокси- фрагментов в изомерах ТНФ

Форма колеб	1, 2, 3-			1, 2, 5			2, 3, 5			2, 3, 6		
	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
<i>Конформер 1 (-921.1625; .1708; .1753; .1841)</i>												
Q, β, γ	1613	268	9,2	1616	193	27	1622	173	3,1	1624	23	14
Q_{NO}, Q	1618	224	6,5	1599	120	34	1592	284	8,5	1598	83	7,1
	1593	335	3,1	1589	321	18	1577	217	27	1589	417	12
	1570	44	46	1566	202	47	1558	111	26	1569	155	57
Q, Q_{NO}	1546	57	25	1563	69	45	1567	85	74	1560	197	29
Q_{NO}	1352	114	33	1356	20	127	1352	67	66	1349	102	53
	1334	4,8	79	1336	227	62	1339	164	47	1338	264	90
	1322	427	91	1328	224	49	1311	302	26	1315	183	6,3
γ_{ONO}	905	57	7,9	864	71	3,4	898	81	1,0	917	42	4,8
	838	39	17	832	31	13	832	37	9,4	845	61	11
	813	32	5,7	808	33	6,2	816	58	11	812	44	6,2
Q_{OH}	3303	251	103	3584	88	137	3299	239	90	3352	193	74
β_{OH}, β	1421	143	5,4	1350	313	4,1	1393	316	32	1369	44	68
	1237	296	41	1171	119	34	1250	117	11	1253	252	50
χ_{OH}	726	158	5,2	413	112	2,5	709	135	1,0	693	150	1,8
<i>Конформер 2 (-921.1762; .1882; .1808; .1742)</i>												
Q, β, γ	1611	323	7,9	1623	194	194	1619	69	11	1618	25	4,1
Q_{NO}, Q	1607	116	18	1600	83	83	1605	282	8,6	1606	298	9,8
	1593	303	1,8	1588	564	564	1596	165	15	1600	64	19
	1581	81	48	1552	49	49	1555	22	34	1574	361	56
Q, Q_{NO}	1560	99	19	1563	48	48	1569	296	69	1567	97	39
Q_{NO}	1359	166	58	1358	192	61	1355	138	53	1363	80	38
	1345	119	2,5	1333	203	135	1335	144	90	1337	275	83
	1331	288	105	1304	326	66	1299	294	56	1331	220	35
γ_{ONO}	905	41	3,7	866	51	2,7	896	87	6,5	916	44	7,1
	832	20	9,9	853	23	20	833	25	7,1	837	73	5,1
	812	74	6,1	809	36	4,6	815	61	11	812	54	7,4
Q_{OH}	3597	98	154	3306	263	119	3318	249	98	3606	91	109
β_{OH}, β	1208	36	3,8	1432	135	4,7	1370	72	28	1221	93	1,2
	1158	100	32	1382	24	31	1261	282	172	1141	129	19
χ_{OH}	377	122	2,1	738	107	1,0	707	70	0,4	338	125	1,9

Приведенные в табл. 3 оценки ($\sim 150 \text{ см}^{-1}$) ангармонического смещения частот валентных колебаний связей ОН получены с помощью процедуры масштабирования с параметрами из публикаций [2, 4]. Однако результаты модельных расчетов с учетом ангармонизма колебаний указывают, что сдвиг указанной полосы достигает величины $\sim 300 \text{ см}^{-1}$. Доминирующий вклад, согласно методике из работы [5] вносят два первых слагаемых диагональной ангармонической константы ($F_{qqq} \sim 2780 \text{ см}^{-1}$, $F_{qqqq} \sim 1650 \text{ см}^{-1}$).

$$\chi_{ss} = \frac{1}{16} F_{ssss} - \frac{5}{48} \frac{(F_{sss})^2}{v_s} + \frac{1}{32} (F_{ssr})^2 (\Omega(s; s; -r) - \Omega(s; s; r) - 12\Omega(r; r; r)) (1 - \delta_{sr}) \quad (1)$$

В соотношении (1) v_s – частоты гармонических колебаний (в см^{-1}); F_{srt} и F_{srtu} – кубические и квартичные силовые постоянные (параметры адиабатического потенциала молекулы), $\Omega(s; \pm r; \pm t) = (v_s \pm v_r \pm v_t)^{-1}$ – резонансные функции.

Отметим характер поведения полос, отнесенных к деформационным колебаниям угла $A_{\text{COH}} (\beta_{\text{OH}})$ гидроксильного фрагмента. Для изомеров, где отсутствует внутримолекулярное взаимодействие, указанные полосы располагаются в диапазоне $1150\text{--}1220 \text{ см}^{-1}$. При наличии внутримолекулярного взаимодействия полосы сдвигаются в коротковолновый диапазон ($\sim 1370\text{--}1430 \text{ см}^{-1}$). Соответствующие колебания по форме смешаны с деформационными колебаниями связей СН бензольного остова. Полосы имеют заметную интенсивность в ИК спектрах изомеров.

В диапазоне ниже 700 см^{-1} проявляются деформационные колебания углов $A_{\text{CCN}} (\beta_{\text{CN}})$ и $A_{\text{CNO}} (\beta_{\text{CN}})$ нитрогрупп, неплоские деформационные колебания связей CN (ρ_{CN}) и связей СС бензольного остова (χ). Интенсивности соответствующих полос малы, формы колебаний смешаны. Использование их для идентификации изомеров затруднительно. По этой причине в табл. 2, 3 они не приводятся.

Выбор базиса квантового расчета не имеет принципиального значения для теоретической интерпретации колебательных состояний изомеров ТНФ. Сдвиг в диапазоне выше 700 см^{-1} полос оценивается величиной $\sim 30 \text{ см}^{-1}$, качественная оценка их интенсивностей сохраняется.

Оценки расчетных значений электронной энергии (в атомных единицах) для изомеров симметрии C_1 приведены в скобках в табл. 2 и 3. Они указывают, что энергетически доминирующим следует считать изомер 1,3,5-ТНФ, который принято называть тринитрофенолом.

Список литературы

1. Свердлов Л. М. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М. : Наука, 1970. – 559 с.
2. Элькин М. Д. Моделирование колебательных состояний гидроксизамещенных фенола / М. Д. Элькин, А. Р. Гайсина, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина, И. И. Гордеев // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2011. – № 2. – С. 55–61.
3. Элькин М. Д. Модельные расчеты колебательных состояний изомеров тринитротолуола / М. Д. Элькин, В. В. Смирнов, Е. А. Джалмухамбетова, О. М. Алыкова, Л. С. Амантаева // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2012. – № 1.
4. Элькин М. Д. Системный анализ колебательных состояний полигидроксизамещенных бензола. 1. Тригидроксизамещенные бензола / М. Д. Элькин, Т. А. Шальнова, Е. А. Джалмухамбетова, И. И. Гордеев, А. Р. Гайсина // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2011. – № 2. – С. 61–67.
5. Элькин М. Д. Учет ангармонического смещения полос в модельных расчетах колебательных спектров димеров с водородной связью / М. Д. Элькин, Л. М. Бабков // Известия Саратовского гос. ун-та. – 2011. – Т. 11, вып. 1. – С. 20–25.
6. Frisch M. J. Gaussian 03. Revision B.03 / M. J. Frisch. – 2003. – Pittsburg PA. : Gaussian Inc.
7. Gui-xiang Wang. Theoretical study on the vibrational spectra and thermodynamic properties for the nitro derivatives of phenols / Wang Gui-xiang, Gong Xue-Dong, Lin Yan, Xian He-Ming // Spectrochim. Acta. – 2009 – Vol. 74, № 2. – P. 569–574.
8. Kleza V. Theoretical investigation of electronic structure and vibrational spectra of conformers of trinitrotoluene and trinitrophenol / V. Kleza, S. Bekesiene // Acta physica PoloniaA. – 2011. Vol. 119, № 2. – P. 198–193.
9. Xian-Hong L. Vibrational spectroscopy investigation using ab initio and density functional theory analysis on the structure of 2, 4, 6-trinitrophenol / L. Xian-Hong, Z. Xian-Zhon // Computational and Theoretical Chemistry. – 2011 – Vol. 963, № 1. – P. 34–39.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

References

1. Sverdlov L. M. Kolebatel'nye spektry mnogoatomnyh molekul / L. M. Sverdlov, M. A. Kovner, E. P. Krajnov. – M. : Nauka, 1970. – 559 с.
2. Jel'kin M. D. Modelirovanie kolebatel'nyh sostojanij gidroksizamewennyh fenola / M. D. Jel'kin, A. R. Gajsina, E. A. Dzhal'muhambetova, O. N. Grechuhina, I. I. Gordeev // Prikaspijskij zhurnal: upravlenie i vysokie tehnologii. – 2011. – № 2. – S. 55–61.
3. Jel'kin M. D. Model'nye raschety kolebatel'nyh sostojanij izomerov trinitrotoluola / M. D. Jel'kin, V. V. Smirnov, E. A. Dzhal'muhambetova, O. M. Alykova, L. S. Amantaeva // Prikaspijskij zhurnal: upravlenie i vysokie tehnologii. – 2012. – № 1.
4. Jel'kin M. D. Sistemnyj analiz kolebatel'nyh sostojanij poligidroksizamewennyh benzola. 1. Tri-gidroksizamewennye benzola / M. D. Jel'kin, T. A. Shal'nova, E. A. Dzhal'muhambetova, I. I. Gordeev, A. R. Gajsina // Prikaspijskij zhurnal: upravlenie i vysokie tehnologii. – 2011. – № 2. – S. 61–67.
5. Jel'kin M. D. Uchet angarmonicheskogo smewenija polos v model'nyh raschetah kolebatel'nyh spektrov dimerov s vodorodnoj svjaz'ju / M. D. Jel'kin, L. M. Babkov // Izvestija Saratovskogo gos. un-ta. – 2011. – T. 11, vyp. 1. – S. 20–25.
6. Frisch M. J. Caussian 03. Revision B.03 / M. J. Frisch. – 2003. – Pittsburg PA. : Gaussian Inc.
7. Gui-xiang Wang. Theoretical study on the vibrational spectra and thermodynamic properties for the nitro derivatives of phenols / Wang Gui-xiang, Gong Xue-Dong, Lin Yan, Xian He-Ming // Spectrochim. Acta. – 2009 – Vol. 74, № 2. – P. 569–574.
8. Kleza V. Theoretical investigation of electronic structure and vibrational spectra of conformers of trinitro-toluene and trinitrophenol / V. Kleza, S. Bekesiene // Acta physica PoloniaA. 2011. –Vol. 119, № 2. – P. 198–193.
9. Xian-Hong L. Vibrational spectroscopy investigation using ab initio and density functional theory analysis on the structure of 2, 4, 6-trinitrophenol / L. Xian-Hong, Z. Xian-Zhon // Computational and Theo-retical Chemistry. – 2011 – Vol. 963, № 1. – P. 34–39.

УДК 539.193/.194;535/33.34

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДИАБАТИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ ИЗОМЕРОВ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Эрман Евгений Анатольевич, кандидат технических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru.

Элькин Михаил Давыдович, доктор физико-математических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru.

Смирнов Владимир Вячеславович, кандидат физико-математических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru.

Джальмухамбетова Елена Азатуллаевна, кандидат физико-математических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: alenna@list.ru.

Гайсина Альфия Рафаиловна, ассистент, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: gaisinaalfiya@mail.ru.

Алыкova Ольга Михайловна, кандидат педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru.

На основании неэмпирических квантовых расчетов геометрической и электронной структуры предложены структурно-динамические модели салициловой кислоты. В данной