

**СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
ПОЛИХЛОРЗАМЕЩЕННЫХ ДИБЕНЗОЦИКЛОВ**
Е.А. Джалмухамбетова¹⁾, А.П. Смирнов¹⁾, П.М. Элькин²⁾

¹⁾*Астраханский государственный университет,*

²⁾*Саратовский государственный технический университет*

Полихлорированные дибензоциклические соединения (дибензо-*n*-диоксин, дибензофуран, дибензотиофен) являются высокотоксичными промышленными отходами хлорорганического синтеза. Возможность их спектральной идентификации в указанных технологических процессах является практически значимой задачей соответствующего экологического мониторинга.

Экспериментальные данные по колебательным спектрам полихлорированных дибензоциклов, представленные в периодической литературе, ограничены и касаются отдельных спектральных диапазонов. Поэтому моделирование структуры и спектров указанных соединений имеют предсказательный характер. Достоверность полученных результатов модельных расчетов подтверждается хорошим совпадением с экспериментальными данными для тетрахлорзамещенных дибензо-*n*-диоксина. Это позволяет распространить предложенную методику построения структурно-динамических моделей полициклических соединений на полихлорзамещенные дибензофурана и дибензотиофена.

При построении структурно-динамических моделей был использован метод DFT/B3LYP/6-311G**. Учет диффузионных эффектов атомного базиса не сказывается на интерпретации колебательных состояний.

Анализ параметров адиабатического потенциала позволяет сделать вывод, о том что ангармоническое смещение можно оценить с помощью процедуры масштабирования. Для диапазона 1650 – 1000 см⁻¹ указанная операция может занижать расчетные значения на величину порядка ~ 20 см⁻¹, что для решения задач идентификации дибензоциклов и их полихлорзамещенных несущественно.

Сопоставление результатов модельных расчетов колебательных состояний с имеющимися экспериментальными данными позволило определиться с полосами в ИК и КР спектрах, которые можно использовать для спектральной идентификации исследуемых соединений.