

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ
ДИМЕРОВ ДИМЕТИЛФОРМАМИДА МЕТОДОМ ТЕОРИИ
ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ**

А. И. Комяк¹, М. А. Ксенофонов², П. С. Чибирай¹, М. Б. Шундалов¹

¹ *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь, shundalov@bsu.by*

² *НИИ Прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко, Минск, Беларусь*

Диметилформамид (ДМФА) является представителем простейших амидов с рядом интересных свойств. Благодаря наличию у ДМФА большого (3.91 Д) дипольного момента, предполагается доминирование диполь–дипольных межмолекулярных взаимодействий, вследствие чего осуществляется формирование ближнего порядка в жидкой фазе. Кроме того, жидкий ДМФА представляет собой важный апротонный дипольный растворитель, а формирующиеся в жидкой фазе молекулярные кластеры ДМФА обладают сравнительно малыми энергиями связывания.

В данной работе представлены результаты квантово-химических расчётов структуры и колебательных спектров нескольких вариантов димеров ДМФА. Расчёты выполнялись на основе методов ТФП в приближении B3LYP/cc-pVDZ. Установлено, что наиболее устойчивый димер имеет линейную структуру, которая формируется в результате образования двух однотипных водородных связей между атомом О карбонильной группы и Н альдегидной. Другая линейная структура димера, образование которой также происходит за счёт двух однотипных водородных связей, но уже между атомом О карбонильной группы и Н метильной, обладает большей (5.85 кДж/моль) энергией. Два димера, имеющие слоистую структуру, отличаются друг от друга взаимным расположением альдегидных групп и формируются за счёт образования четырёх водородных связей между атомом О карбонильной группы и двумя атомами Н различных метильных групп. Слоистые димеры также обладают большими (2.21 и 6.06 кДж/моль) энергиями относительно первого линейного димера. Для всех вариантов димеров ДМФА смоделированы колебательные ИК и КР спектры и определены спектральные сдвиги полос поглощения и линий рассеяния относительно мономерной молекулы, а также другие спектральные характеристики.