

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

**А. И. Комяк<sup>1</sup>, М. А. Ксенофонов<sup>2</sup>, П. С. Чибирай<sup>1</sup>, М. Б. Шундалов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь, shundalov@bsu.by*

<sup>2</sup> *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 одноптипных водородных связей между атомом О карбонильной группы и Н альдегидной. Другая линейная структура димера, образование которой также происходит за счёт двух одноптипных 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.