

УДК 539.196:535.33

## АНАЛИЗ ХАРАКТЕРИСТИЧНОСТИ КОЛЕБАНИЙ АЗОКСИГРУППЫ $-N=N(O)-$

О.В. НОВОСЕЛОВА

(Кафедра физики)

Решена прямая спектральная задача для молекул ряда азоксибензола с использованием силового поля, полученного из прямого квантового расчета. На основании анализа данных, полученных в результате решения этой прямой спектральной задачи, были определены характеристические частоты для азоксигруппы  $-N=N(O)-$ .

В современных спектроскопических исследованиях используются различные модели соединений, каждая молекулярная модель может быть математически описана некоторой совокупностью параметров. Возможности современной вычислительной техники позволяют достаточно точно рассчитать спектральные отображения для выбранной модели, а затем сравнить их с экспериментальным спектром. Для массовых расчетов спектров сложных молекул необходимо использовать накопленную ранее информацию о свойствах отдельных структурных элементов, хранящуюся в банках данных молекулярных моделей [5], которые в настоящее время уже имеются. Если эти элементы ранее не исследовались, то исходные значения силовых постоянных для их расчета можно получить из квантовохимических

расчетов потенциальной поверхности.

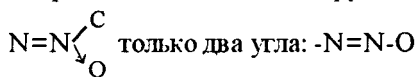
Данное исследование проводилось с целью выявления характеристических частот для азоксигруппы  $-N=N(O)-$ . Данная группировка была рассмотрена в структурах типа  $R-N=N(O)-R$  с разным сочетанием выбранных радикалов  $R = -CH_3, -C_5H_6$ . Такой выбор радикалов был обусловлен значительным различием их в массе, структуре, распределении электронной плотности, а также известных характеристических частотах. В качестве базовых были рассмотрены 2 соединения:  $HN=N(O)-CH_3$  (азоксиметан) и  $H_5C_6-N=N(O)-C_6H_5$  (азоксибензол).

Данная задача решалась в два этапа. На первом этапе из-за отсутствия в банке данных молекулярных моделей соединений, содержащих азоксигруппу, на осно-

вании полуэмпирического метода MINDO/3 [11] были получены силовые постоянные  $U_0$  данной группировки в нулевом приближении. Расчет производился по программе [11], реализующей метод квантовохимического определения [12] параметров потенциальной функции в системе зависимых естественных координат. На этом этапе производился поиск равновесной геометрии молекулы: выбирались нулевое приближение геометрии и простейшая диагональная квадратичная потенциальная функция, которая уточнялась в ходе решения. На втором этапе был выполнен расчет частот колебаний соединений  $H_5C_6-N=N(O)-C_6H_5$ ,  $H_5C_6-N=N(O)-C_6H_4CH_3$  и  $HN=N(O)-CH_3$  с использованием силовых постоянных, найденных для азоксигруппы в результате оптимизации геометрии, а для групп  $-CH_3$ ,  $-C_6H_5$ , взятых из банка данных молекулярных моделей.

В качестве нулевого приближения для процесса оптимизации геометрии азоксигруппы использовались значения длин связей и углов, выбранных на основании геометрии [7, 8], следующих группировок: азогруппы ( $-N=N-$ ), азоксигруппы ( $-N=N(O)-$ ), нитроазогруппы ( $-NO$ ), нитрогруппы ( $-NO_2$ ). Поскольку  $-CH_3$  является замкнутой атомной группировкой, то при оптимизации она была зафиксирована и ее геометрические и силовые параметры не уточнялись, а задавались на основании подобной группировки из банка данных молекулярных моделей:  $\angle HCN = \angle CCH = 109^\circ 28'$ ,  $CH = 1,090$  Å. Чтобы исключить

линейную зависимость между углами, в систему естественных координат включено для группы



и  $-N=N-C-$ . При этом не нарушалась симметрия других координат. Поскольку на первом этапе решалась задача не о вычислении частот колебаний, а об определении равновесной геометрии молекулы, то требования, предъявляемые к точности исходных значений силовых постоянных оптимизируемой группировки, невелики. Можно ограничиться диагональными значениями матрицы  $U_0$ , следя за тем, чтобы они верно передавали порядок элементов, с которыми данная естественная координата входит в выражение для потенциальной энергии. Для азоксигруппы наборы силовых постоянных ранее не определялись, поэтому их начальные значения были приняты с учетом свойства переносимости силовых постоянных атомных группировок [3] в родственных молекулах:  $-N=N-$ ,  $-N-$ ,  $-NH$  [1, 2, 6].

Устойчивость решения, найденного в результате оптимизации, проверялась путем изменения начальных условий. Был выполнен еще один расчет, где в качестве исходных значений геометрических параметров были приняты конечные значения предыдущего расчета. Ниже приводятся результаты оптимизации геометрии исследуемых соединений (в скобках указаны их исходные экспериментальные значения): длины связей  $N=N = 1,210$  (1,218) Å,  $N-O = 1,250$  (1,279) Å,  $N-C = 1,478$  (1,470) Å,  $N-$

$r_{\text{C}} = 1,060$  (1,026) Å; и углы  $\text{HNN} = 118^\circ$  (115°),  $\text{NNC} = 127^\circ$  (124°),  $\text{NNO} = 118^\circ$  (114°). Как видно из приведенных результатов, точность квантовохимических расчетов геометрических характеристик молекулы вполне сопоставима с точностью экспериментальных данных — ошибки для углов получены в среднем с точностью до 3°, длин связей — до 0,1 Å, что вполне достаточно для последующих расчетов колебательных спектров молекул.

После определения равновесной геометрии молекулы были оценены силовые постоянные в окрестностях найденного минимума. Потенциальная поверхность была представлена в виде совокупности точек энергии, вычисленных для молекул разных геометрических конфигураций. При задании структуры определяемой матрицы силовых постоянных не учитывались значения некоторых недиагональных элементов удаленных координат (разделенных 2—3 связями). В расчете силовых постоянных потенциальная поверхность аппроксимировалась как квадратичной функцией, так и функцией с членами разложения 3 и 4 порядков. При вычислении силовых постоянных использовался прием разделения деформаций молекулы на чисто деформационные (изменение только углов) и чисто валентные (изменение только связей). Это позволяет, не снижая точности расчета, сократить число одновременно определяемых неизвестных параметров. Задача решалась для 3 групп параметров.

В первой группе определялись

диагональные значения и недиагональные взаимодействия силовых постоянных для связей при фиксированных углах. Наилучшее значение силовых постоянных получалось, если в потенциальную функцию включались члены третьего порядка для координат растяжения связей, включение членов четвертого порядка не оказало существенного влияния на полученные результаты. Во вторую группу были отнесены силовые постоянные, соответствующие диагональному и недиагональному взаимодействию углов при фиксированных связях. Здесь наилучшие значения силовых постоянных получались при рассмотрении области потенциальной поверхности в пределах квадратичной аппроксимации. В третью группу параметров были включены силовые постоянные, отвечающие недиагональному взаимодействию связь-угол и диагональным взаимодействиям связь-связь, угол-угол. Исходными значениями для них являлись результаты квантовохимического расчета первых двух групп. Для третьей группы параметров никакие координаты не фиксировались. Наилучшие значения силовых постоянных с точки зрения среднеквадратичного отклонения получались при аппроксимации поверхности потенциальной энергии полиномом с учетом третьих членов разложения для связей и для углов — четвертых. Наибольшие погрешности были отмечены для силовых постоянных типа угол-угол (до 47%) и связь-угол (до 71%). Согласно данным работы [10], квартовый расчет плохо пе-

редает взаимодействие именно этого типа.

Сравнение силовых постоянных, полученных из квантового расчета для всех трех групп параметров, показывает, что в пределах погрешностей определения их значения для однотипных связей и взаимодействий практически одинаковы. Кроме того определенные из квантовохимического расчета значения силовых постоянных для групп  $-CH_3$  и  $-NH$  согласуются со значениями силовых постоянных этих групп из банка данных молекулярных моделей, что позволяет сделать вывод о верности найденного набора силовых постоянных для других групп исследуемого базового соединения  $HN=N(O)-CH_3$ . С учетом систематической погрешности метода MINDO/3 корректировка рассчитанных силовых постоянных осуществлялась с помощью следующих множителей: 0,7-0,85 — для силовых постоянных растяжения связей; 1,2 — для силовых постоянных валентных углов (кроме углов  $HCH$ ); 1,0 — для углов  $HCH$ . Скорректированные таким образом наборы силовых постоянных использовались на втором этапе исследования для решения прямых спектральных задач. Наборы силовых постоянных для всех трех рассматриваемых групп параметров с их исходными значениями приведены с указанием погрешности в табл. 1.

Значения силовых постоянных: I — исходные, полученные в приближении MINDO/3 при: II — фиксированных углах, III — фиксированных связях, IV — с учетом

взаимодействия связь-угол, V — скорректированные.

Работоспособность набора силовых постоянных для группировки  $-N=N(O)$  — была проверена при расчете частот колебаний соединений ее содержащих. На втором этапе исследования прямая механическая задача решалась для 10 соединений: обоих изомеров для всех рассматриваемых азоксисоединений ( $H_5C_6-N=N(O)-C_6H_5$ ,  $H_5C_6-N=N(O)-C_6H_4CH_3-p$ ,  $H_5C_6-N=N(O)-C_6H_4CH_3-o$ ,  $H_5C_6-N=N(O)-C_6H_4CH_3-m$ ,  $HN=N(O)-CH_3$ ). Установлено [9], что несимметричные азоксибензолы существуют в виде двух изомеров из-за нецикличности азоксигруппы. Расчет частот колебаний производился с использованием фрагментарного способа расчета по программе комплекса [3]. Для оценки совпадения расчетных и экспериментальных значений частот колебаний из-за отсутствия работ по отнесению частот решение прямой колебательной задачи для молекулы азоксибензола было доведено до построения спектральной кривой. Поэтому на экспериментальном [13] ИК спектре этого соединения (рисунок) сравнивались только частоты с их расчетными значениями, а не характер распределения интенсивностей в спектре: расхождение частот не превышает  $30-40 \text{ см}^{-1}$ ; таким образом, система силовых параметров для группировки  $-N=N(O)-$  в целом найдена верно. Значения электрооптических параметров для азоксигруппы в нулевом приближении выбирались на основании данных [2, 4], опи-

Т а б л и ц а 1

Квантовохимический расчет параметров силового поля  
молекулы  $\text{HN}=\text{N}(\text{O})-\text{CH}_3$  азоксиметила

| Силовые постоянные            | I     | II         | III       | IV         | V     |
|-------------------------------|-------|------------|-----------|------------|-------|
| $K_{\text{NH}}$               | 11,39 | 9,68±0,21  |           | 9,44±0,85  | 7,55  |
| $K_{\text{N=N}}$              | 24,65 | 20,62±0,48 |           | 22,49±1,44 | 18,00 |
| $K_{\text{CN}}$               | 10,14 | 8,69±0,20  |           | 9,57±0,62  | 6,70  |
| $K_{\text{N-O}}$              | 28,08 | 19,09±0,38 |           | 18,40±1,38 | 14,42 |
| $K_{\text{CH}}$               | 9,36  | 10,56±0,13 |           | 10,54±0,51 | 8,40  |
| $K_{\text{HNN}}$              | 1,07  |            | 1,01±0,05 | 1,11±0,10  | 1,21  |
| $K_{\text{NNC}}$              | 2,94  |            | 1,85±0,08 | 1,66±0,18  | 2,22  |
| $K_{\text{NNO}}$              | 2,23  |            | 2,18±0,09 | 2,06±0,18  | 2,65  |
| $K_{\text{NCH}}$              | 0,99  |            | 0,82±0,03 | 0,79±0,05  | 0,94  |
| $K_{\text{HCH}}$              | 0,77  |            | 0,64±0,02 | 0,69±0,04  | 0,77  |
| $H_{\text{NH}}^{\text{N=N}}$  |       | 0,61±0,15  |           |            | 0,61  |
| $H_{\text{N=N}}^{\text{CN}}$  |       | 1,64±0,15  |           |            | 1,64  |
| $H_{\text{N=N}}^{\text{N-O}}$ |       | 2,63±0,28  |           |            | 2,63  |
| $H_{\text{CN}}^{\text{N-O}}$  |       | 1,85±0,15  |           |            | 1,85  |
| $H_{\text{CH}}^{\text{CN}}$   |       | 0,45±0,06  |           |            | 0,45  |
| $A_{\text{NH}}^{\text{HNN}}$  |       |            |           | 0,87±0,18  | 0,87  |
| $A_{\text{N=N}}^{\text{NNH}}$ |       |            |           | 0,36±0,25  | 0,36  |
| $A_{\text{N=N}}^{\text{NNC}}$ |       |            |           | 1,19±0,36  | 1,19  |
| $A_{\text{N=N}}^{\text{NNO}}$ |       |            |           | 0,62±0,30  | 0,62  |
| $A_{\text{NC}}^{\text{NNC}}$  |       |            |           | 0,05±0,02  | 0,05  |
| $A_{\text{N-O}}^{\text{NNO}}$ |       |            |           | 0,83±0,37  | 0,83  |
| $\text{NNH}^{\text{NCH}}$     |       |            | 0,14 0,04 |            | 0,14  |
| $\text{NNO}^{\text{NCH}}$     |       |            | 1,09 0,06 |            | 1,09  |

Обозначения:  $K_i$  — силовая постоянная угла связи;  $H_i^j$  — силовая постоянная взаимодействия координат растяжения связей;  $A_i$  — силовая постоянная взаимодействия координат растяжения связей и угла; — силовая постоянная взаимодействия углов. Силовые постоянные в  $10^{-6} \text{ см}^{-2}$ .

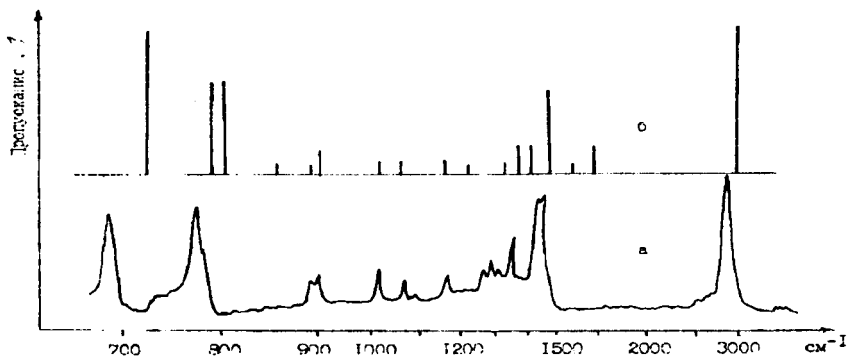


Рис. 1. Спектр поглощения азоксибензола. Эксперимент (а) и расчет (б).

раясь на свойство переносимости молекулярных параметров в ряду родственных соединений:  $\mu_{\text{CN}} = 0,763 \text{ D}$ ;  $\mu_{\text{NH}} = 0,545 \text{ D}$ ;  $\mu_{\text{N=N}} = 0,327 \text{ D}$ ;  $\mu_{\text{NO}} = 1,090 \text{ D}$ ;  $\partial\mu_{\text{CN}} / \partial q_{\text{CN}} = 0,7 \text{ D/\AA}$ ;  $\partial\mu_{\text{NH}} / \partial q_{\text{NH}} = 0,3 \text{ D/\AA}$ ;  $\partial\mu_{\text{N=N}} / \partial q_{\text{N=N}} = 1,8 \text{ D/\AA}$ ;  $\partial\mu_{\text{NO}} / \partial q_{\text{NO}} = 0,5 \text{ D/\AA}$ . Рассчитанные значения частот колебаний для молекулы азоксибензола приводятся в табл. 2, для группировки  $-\text{N=N(O)}-$  в молекуле азоксибензола — в табл. 3.

Выделение для группировки  $-\text{N=N(O)}-$  частот колебаний, обладающих характеристичностью по форме и частоте, производилось на основании анализа всех данных, полученных в результате решения прямой спектральной задачи: частот и форм нормальных колебаний, смещений атомов из положения равновесия, распределения энергии по степеням свободы. При отнесении частот по формам колебаний во внимание принимались только те формы колебаний, которые составляют не менее 15% от максимального вклада колеба-

тельных координат в данное нормальное колебание.

Появление характеристичности для различных групп связей обусловлено не только свойствами самой группы, но и ее окружением. Таким образом, для появления устойчивой характеристичности в молекуле необходимо, чтобы изменение окружения не вызывало нарушений характеристичности колебаний аддитивных групп в молекуле. Изменение окружения исследуемой группировки было смоделировано изменением значения диагональных членов ее силовых постоянных на  $\pm 10\%$  от  $U_0$ . Были рассчитаны новые значения частот колебаний для измененных силовых полей. Использовались те же 10 соединений, что и для решения прямой спектральной задачи. Проведенный анализ частот и форм нормальных колебаний показал, что для малых молекул типа азоксибензола подобное изменение силового поля группировки  $-\text{N=N(O)}-$  вызывает существенный сдвиг выделенных для нее характеристичных по форме

Таблица 2

Вычисленные значения частот для молекулы азоксиметила  $\text{H}-\text{N}=\text{N}-\text{C}_6\text{H}_5$   
 $\text{O}$

| Частота,<br>см <sup>-1</sup> | Форма колебания                             | Вклад в энергию, % | Сдвиг частоты при изменении силового поля $U_0$ |            |
|------------------------------|---|--------------------|---|------------|
|                              |   |                    | +10% $U_0$                                      | -10% $U_0$ |
| 3078                         | $\nu_{\text{CH}_3}$                         | CH, 99             |   |            |
| 3075                         | $\nu_{\text{CH}_3}$                         | CH, 99             |   |            |
| 2984                         | $\nu_{\text{CH}_3}$                         | CH, 99             |   |            |
| 2856                         | $\nu_{\text{NH}}$                           | NH, 99             |   |            |
| 1656                         | $\nu_{\text{N}=\text{N}}$                   | N=N, 77            | 93  | 97         |
| 1515                         | $\alpha_{\text{CH}_3}, \beta_{\text{CH}_3}$ | HCH, 35            | 6   | 17         |
|                              |   | HCC, 29            |   |            |
|                              |   | NO, 24             |   |            |
|                              |   | CN, 12             |   |            |
| 1480                         | $\beta_{\text{CH}_3}, \alpha_{\text{CH}_3}$ | HCH, 31            | 96  | 105        |
|                              |   | HCC, 28            |   |            |
|                              |   | NNH, 14            |   |            |
|                              |   | HCC, 14            |   |            |
| 1463                         | $\alpha_{\text{CH}_3}, \gamma_{\text{NNH}}$ | HCC, 61            | 8   | 3          |
|                              |   | NO, 21             |   |            |
|                              |   | HCH, 93            |   |            |
| 1131                         | $\gamma_{\text{NNH}}, \nu_{\text{NO}}$      | NNH, 67            | 53  | 90         |
|                              |   | NO, 20             |   |            |
| 1026                         | $\beta_{\text{CH}_3}$                       | HCC, 93            |   |            |
| 1008                         | $\beta_{\text{CH}_3}$                       | HCC, 85            | 5   | 6          |
| 919                          | $\nu_{\text{CN}}, \gamma_{\text{NNO}}$      | CN, 58             | 40  | 52         |
|                              |   | NNO, 20            |   |            |
| 535                          | $\gamma_{\text{NNO}}, \gamma_{\text{NNC}}$  | NNO, 64            | 35  | 38         |
|                              |   | NNC, 15            |   |            |
|                              |   | CN, 15             |   |            |
| 436                          | $\gamma_{\text{NNC}}$                       | NNC, 92            | 18  | 22         |

## Вычисленные значения характеристических по частоте колебаний

группировки  $\text{-N=N(O)-}$  молекулы азоксибензола  $\text{H}_5\text{C}_6\text{-N=N-O}$

| Частота, $\text{см}^{-1}$ | Форма колебания   | Вклад в энергию, % | Сдвиг частоты при изменении силового поля $U_0$ |            |
|---------------------------|---|--------------------|---|------------|
|                           |   |                    | +10% $U_0$                                      | -10% $U_0$ |
| 1650                      | $Q_{\text{N=N}}, Q_{\text{NC}}$                                 | N=N, 71            | 4   | 3          |
| 1410                      | $Q_{\text{N-O}}, \gamma_{\text{NNC}}, \gamma_{\text{NNO}}$      | NO, 56             | 8   | 1          |
|                           |   | HCC, 19            |   |            |
|                           |   | NC, 5              |   |            |
| 868                       | $\gamma_{\text{NNC}}, \gamma_{\text{NNO}}$                      | NNO, 36            | 20  | 10         |
|                           |   | NNC, 24            |   |            |
| 669                       | $\gamma_{\text{NNO}}, \gamma_{\text{NNC}}, \gamma_{\text{CCC}}$ | CCC, 47            | 6   | 3          |
|                           |   | NNO, 15            |   |            |
| 535                       | $\gamma_{\text{NNC}}, \gamma_{\text{CCC}}$                      | CCC, 47            | 4   | 2          |
|                           |   | HCC, 17            |   |            |
| 400                       | $\gamma_{\text{NNC}}, \gamma_{\text{CCC}}$                      | NNC, 40            | 4   | 2          |
|                           |   | CCC, 27            |   |            |
|                           |   | NC, 15             |   |            |

колебаний (от 40 до 100  $\text{см}^{-1}$ ); для молекул типа азоксибензола наблюдается малое изменение подобных частот колебаний и интервал такого изменения не превышает 20  $\text{см}^{-1}$ .

Таким образом, устойчивость частот колебаний для азокси-группы сохраняется, если сохраняется ее аддитивность. Однако не удалось выделить внутри азокси-группы частоты колебаний, обладающие характеристичностью по форме для деформационных и валентных координат азокси-группы: поскольку в эти колебания вносят практически равный вклад (19—26%) различные координаты

(растяжения длин связей — NC, NO, N=N и изменения валентных углов — NNC, NNO).

Трудно сделать вывод о точном отнесении частот колебаний только на основании анализа форм колебаний, так как обычно форма колебания содержит вклады большинства колебательных координат, но в различной степени. Поэтому целесообразно также анализировать форм колебаний в декартовых координатах по смещению атомов из положения равновесия. Чтобы колебание было характеристично по форме, необходимо, чтобы атом, связывающий фрагмент с соседним участком молекулы, не смещался или



смещался перпендикулярно связанному с ним ближайшему атому. Подобный анализ по смещению атомов был проведен для тех же 10 молекул, для которых реша-

лась прямая спектральная задача. Условие характеристичности колебаний по форме выполняется только для всего структурного элемента  $-N=N(O)-$ .

Т а б л и ц а 4

**Области характеристических нормальных колебаний группировки  $-N=N(O)-$  в структурах типа  $R-N=N(O)-R_1$**

| Область частот, $cm^{-1}$ | Форма колебания                            | Вклад в энергию колебания, %                 |
|---------------------------|--|--|
| 1600—1660                 | $Q_{N=N}, Q_{NC}$                          | $N=N$ , 70—78                                |
| 1480—1420                 | $Q_{N-O}, \gamma_{NNC}, \gamma_{NNO}$      | $N-O$ , 50—65<br>HCC, 5—30                   |
| 900—860                   | $\gamma_{NNC}, \gamma_{NNO}$               | $NNO$ , 30—35<br>$NNC$ , 12—25<br>CN, 10—15  |
| 650—680                   | $\gamma_{NNC}, \gamma_{NNO}, \gamma_{CCC}$ | CCC, 40—47<br>$NNO$ , 15—18<br>$NNC$ , 15—18 |
| 510—540                   | $\gamma_{NNC}, \gamma_{HCC}$               | $NNC$ , 30—40<br>HCC, 15—20                  |
| 380—440                   | $Q_{NC}, \gamma_{NNC}, \gamma_{CCC}$       | $NNC$ , 25—45<br>NC, 15—25<br>CCC, 25—30     |

Характеристические по частоте колебания можно выделить на основании анализа распределения потенциальной энергии по степеням свободы. Свойством характеристичности по частоте будут обладать те элементы молекулы, которые при данном нормальном колебании требуют максимальных затрат энергии. Согласно подобному расчету, для молекул типа азоксибензола  $R-N=N(O)-R_1$  большее число колебаний локализовано в бензольном кольце и в группировке  $-N=N(O)-$ . Деформа-

ция углов  $NNC$  и  $NNO$  вносит вклад практически во все колебания азоксигруппы (15—25%) и только одно валентное колебание связи  $N=N$  дает значительный вклад по энергии (70—75%). Также можно считать характеристическим по частоте валентное колебание связи  $N-O$  (вклад по энергии 50—58%).

Таким образом, проведенное исследование позволило выделить в ИК спектрах для структур типа  $R-N=N(O)-R_1$  колебания характеристические по частоте для

группировки  $-N=N(O)-$  в спектральных областях, которые представлены в табл. 4.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Волькенштейн М.В., Грибов Л.А., Ельяшевич М.А., Степанов Б.Н.* Колебания молекул. М.: Наука, 1972. — 2. *Грибов Л.А.* Введение в молекулярную спектроскопию. М.: Наука, 1976. — 3. *Грибов Л.А., Дементьев В.А.* Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул. М.: Наука, 1981. — 4. *Дементьев В.А., Носкова М.Н., Грибов Л.А.* Расчет интегральных интенсивностей полос поглощения колебательного спектра молекулы диэтиламина. — *Опт. и спектр.*, 1972, т. 33, с. 1004—1006. — 5. *Новоселова О.В., Грибов Л.А.* Состав и опыт эксплуатации библиотеки молекулярных структур для обеспечения массовых расчетов ИК спектров органических соединений. — *Журн. структ. химии*, 1993, т. 31, с. 197—201. — 6. *Свер-*

*длов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П.* Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Наука, 1970. — 7. *Химическая энциклопедия*, т. 3. М.: Советская энциклопедия, 1973. — 8. *Химический энциклопедический словарь*. М.: Советская энциклопедия, 1984. — 9. *Шабаров Ю.С.* *Органическая химия*, т. 2. М.: Химия, 1996, с. 721. — 10. *Шатохин С.А., Грибов Л.А., Перельгин И.С.* — *Журн. структ. химии*, 1985, т. 26, № 4, с. 42—47. — 11. *Шатохин С.А., Грибов Л.А., Перельгин С.А.* Программа для квантовохимического расчета параметров потенциальной поверхности многоатомных молекул. М., 1985, Деп. № 3747—85. — 12. *Bigham R. C., Dewar M. J., Lo D. H.* — *J. American Chem. Society*, 1975, vol. 97, N 6, p. 1285—1293. — 13. *The Sadtler standart spectra: Infrared prism spectra. Philadelphia, Sadtler res. lab., 1962—1966, vol. 12, N 11984.*

*Статья поступила 4 февраля 1997 г.*

#### SUMMARY

The force field obtained from quantum calculation was used for solving the direct spectral problem for series of azoxybenzene. Characteristic frequencies for  $-N=N(O)-$  group have been defined by analysis of the data obtained by solution of this direct spectral problem.