طیف جذب مادون قرمز تری نیتروتولوئن(TNT)

اصغر محمودیان ، وحید صاحب* و حسین روح الامینی نژاد

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان

تری نیترو تولوئن *(TNT)* ماده ای است که به عنوان پیشران و مواد منفجره در مواد استفاده می شود. امروزه شناسایی این ماده از نظر مسائل امنیتی، آلودگی محیط زیست و نظامی دارای اهمیت می باشد. در این کار پژوهشی، طیف فروسرخ *TNT* به طور تجربی اندازه گیری شده است. سپس با استفاده از طریق روش های شیمی کوانتومی ساختار و فرکانس شیوه های ارتعاشی این مولکول محاسبه شده است. سپس با مقایسه داده های تجربی و نظری هرکدام ازپیک های جذبی فروسرخ *TNT* به شیوه های حرکت ارتعاشی این مولکول نسبت داده شده است. نتایج این تحقیق در ساخت لیزر های فروسرخ جهت شناسایی این ترکیب می تواند مورد استفاده قرار گیرد.

کلید واژه: تری نیترو تولوئن - طیف جذبی مادون قرمز تری نیتروتولوئن- شیوه های ارتعاشی - شیمی کوانتومی

Trinitrotoluene Infrared Absorption Spectrum

Asghar Mahmoudian, Vahid Saheb, Hossein Rouholamini Nejad

Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman

Abstract- Trinitrotoluene (TNT) is used as propellant and explosive. Detection of this compound is of great importance from security and environmental pollution stand points. In this research, Infrared (IR) spectrum of TNT is recorded. Next, the structure and vibrational frequencies of normal modes of TNT molecule are computed by electronic – structure calculations. By companies on of the IR peaks of TNT in the computed vibrational frequency, each IR peak is assigned to the corresponding normal mode of vibration. The results of the present work can be applied to the identifications of TNT by lasers working in IR region.

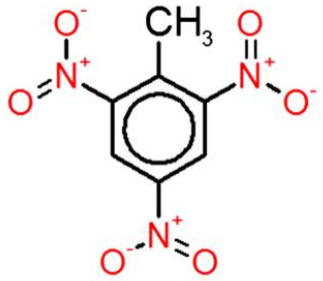
Keywords:Trinitrotoluene detection; Infrared absorption spectrum of trinitrotoluene; vibrating techniques; Quantum chemistry

[Downloaded from opsi.ir on 2025-05-17]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

۱- مقدمه

تری نیتروتولوئن[۱](TNT) از بیشترین مواد منفجره مورد استفاده شده در جنگ جهانی اول بوده است. TNT یک جامد بلوری زرد رنگ و بی بو در دمای اتاق است که بطور طبیعی در محیط بوجود نمی آید و حلالیت آن در آب (حدود ۱۳۰ میلی گرم بر لیتر (mg/L) در ۲۰ درجه سانتیگراد است) و فشار بخار نسبتا کمی دارد [۱]. فرمول مولکول آن $C_7H_5N_3O_6$ (2,4,6-Trinitrotoluene) است. در شکل ۱ ساختار مولکولی TNT نشان داده شده است.



شکل۱: ساختار مولکولی TNT .[۲]

این ترکیب با ترکیب تولوئن با مخلوطی از اسید نیتریک واسید سولفریک ساخته شده است. این ماده بسیار منفجره، یک ترکیب تک حلقه نیتروآروماتیک است. سرعت انفجار تی ان تی ۷۰۲۸ متردر ثانیه است. در دمای ۳۵۴ درجه کلوین ذوب می شود و گرمادادن به TNT بالاتر از ۳۴۳ درجه کلوین باعث ایجاد تغییرات فیزیکی وشیمیایی در آن می شود [۳]. واکنش سمی TNT در انسان ممکن است منجر به هپاتیت سمی و کم خونی آپلاستیک، که منجر به مرگ بسیاری از کارگران نظامی در طی دو جنگ جهانی شده، شود. مشکلات پزشکی جدی شامل گاستریت، درماتیت، سیانوز، کم خونی و سرگیجه بوجود آورد[۱]. TNT بعنوان یک ماده منفجره ی نیتروآروماتیک یک نگرانی امنیتی و بهداشتی و زیست محیطی برای جامعه ی جهانی بشمار می رود. مواد منفجره به طور گسترده در صنعت و فعالیت های ارتشی یا تروریستی استفاده می شود. با در نظر داشتن معایب TNT مثل اختلافات قلبی عروقی شدید، اختلال در عملکرد کبد، کم خونی، آب مروارید و سرطان زایی؛ تشخیص و آشکارسازی پسماندهای آن و مبارزه با تروریست از اهمیت فوق العاده ای برخوردار است. برای تشخیص TNT از روش های مختلفی ازجمله آشکارسازهای زیستی و حالت پشرفته تر، طیف سنج ها جهت تشخیص مواد منفجره می توان استفاده کرد. از جمله آشکارسازهای زیستی می توان به سگ ها، موش ها و زنبور عسل ها آموزش دیده اشاره کرد و حالت پیشرفته تر طیف سنجی جرمی[۲](MS)، طیف سنجی تحریک یونی[۳](IMS)، کروماتوگرافی گازی[۴](GC) و کروماتوگرافی مایع با عملکرد بالا[۵](HPLC) حساس ترین روش ها برای آشکارسازی مواد منفجره هستند؛ ازاین رو درامنیت فرودگاه ها استفاده می شوند. با وجود دقت و صحت و قابلیت اطمینان آن ها، این روش ها معایب عملی مثل پیچیدگی، هزینه بالا و زمان زیاد جهت نتیجه گیری دارند [۴].

۲- روش انجام کار

برای تهیه طیف فروسرخ TNT مقدار کمی از TNT (کمتر از۱درصد وزنی) با پودر KBr کاملا مخلوط شد.سپس از آن قرص تهیه شدو در محدوده $4400\ cm^{-1} - 450\ cm^{-1}$ توسط یک دستگاه طیف سنج فروسرخ Perkin- Elmer Mdel RX-IM طیف جذبی آن اندازه گیری شد.

۳- روش محاسبات

در این پژوهش از روش های شیمی کوانتومی برای تعیین و بهینه سازی ساختار مولکولی TNT و همچنین محاسبه فرکانس شیوه های ارتعاشی آن استفاده شده است [۵]. از روش تابعی چگالی B3LYP/6-31+G(d,p) برای محاسبه

---

[۱] Trinitrotoluene

[۲] Mass Spectrometry

[۳] Ion Mobility Spectroscopy

[۴] Gas Chromatography

[۵] High Performance Liquid Chromatography

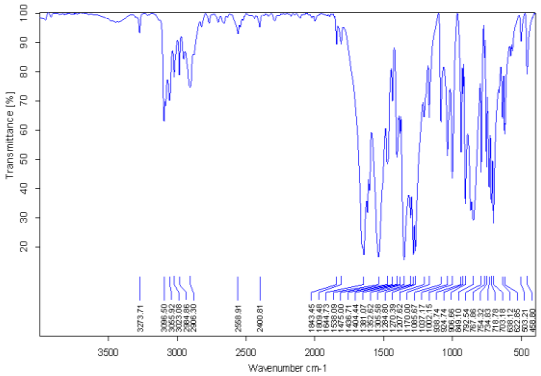
این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2025-05-17]

ساختار الکترونی مولکول TNT استفاده شده است. با حل معادلات برای قسمت الکترون میدان پتانسیل لازم برای بدست آوردن فرکانس شیوه های ارتعاشی مولکول TNT و همچنین قدرت نوسانگر هر کدام از این شیوه های ارتعاشی بدست می آید. قدرت نوسانگر معیاری از فعال بودن آن شیوه ارتعاشی در بر هم کنش امواج الکترومغناطیسی است. بنابراین، شیوه های ارتعاشی با قدرت نوسانگر بزرگتر، شدت جذب و نشر بیشتری در ناحیه فروسرخ از خودشان می دهند.

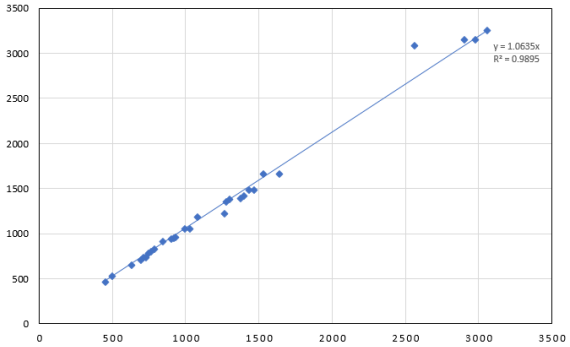
۴- نتایج

طیف جذبی فرو سرخ TNT در شکل۲ نشان داده شده است.



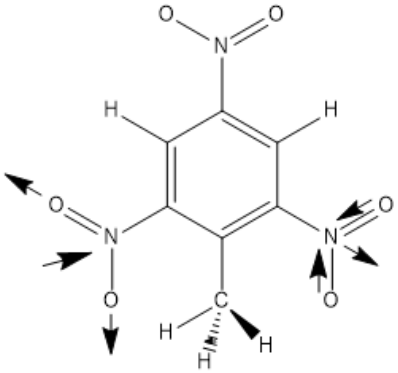
شکل۲ : طیف جذبی TNT در ناحیه فروسرخ

مقادیر عددی فرکانس های جذبی در ناحیه فروسرخ به همراه مقادیر محاسبه از روش B3LYP/6-31+G(d,p) در جدول ۱ آورده شده است. همانطور دیده می شود مقادیر محاسبه شده از مقادیر تجربی اندکی بزرگ تر است که این موضوع به خطای قطع در محاسبات شیمی کوانتومی و ناهماهنگی در ارتعاشات نسبت داده می شود. برای بدست آوردن رابطه ای بین مقادیر محاسبه شده وتجربی ، مقادیر محاسبه شده بر علیه مقادیر تجربی رسم شده است(نمودار۱). همانطور که مشاهده می شود رابطهٔ خطی خوبی $(R^2 = 0.9895)$ بین این مقادیر وجود دارد؛ به نحوی که می توان هر فرکانس جذبی در ناحیه فروسرخ را به یک شیوه ارتعاشی مولکولی TNT مرتبط ساخت.

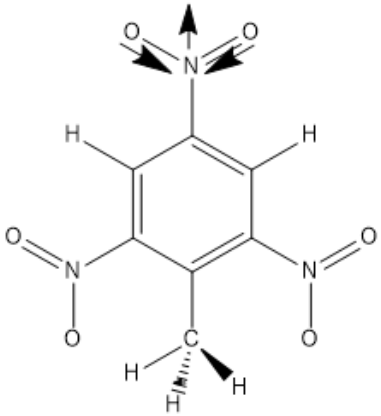


نمودار۱: رسم فرکانس های تجربی بر اساس تئوری

بطور مثال دو فرکانس جذبی مهم در ناحیه فروسرخ را می توان مطابق شکل ۳ و ۴ به شیوه ارتعاشی مولکولی TNT مرتبط سازیم .



شکل۳ : شیوه ارتعاشی مولکول TNT درناحیه فروسرخ (۱۳۹۱/۰۷ CM^{-1})



شکل۴ : شیوه ارتعاشی مولکول TNT درناحیه فروسرخ (۱۳۸۳/۰۷ CM^{-1})

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2025-05-17]

جدول ۱ : فرکانس های تئوری و تجربی TNT

فرکانس های تجربی	فرکانس های تئوری
۳۰۶۶	۳۲۵۵
۲۹۸۵	۳۱۴۸
۲۹۰۶	۳۱۴۸
۲۵۶۹	۳۰۸۸
۱۶۴۵	۱۶۶۱
۱۵۳۸	۱۶۵۷
۱۴۷۵	۱۴۸۰
۱۴۳۷	۱۴۷۹
۱۴۰۴	۱۴۲۲
۱۳۸۱	۱۳۹۱
۱۳۰۶	۱۳۸۳
۱۲۸۵	۱۳۵۷
۱۲۷۰	۱۲۲۲
۱۰۸۶	۱۱۸۵
۱۰۳۷	۱۰۴۹
۱۰۰۲	۱۰۴۹
۹۳۹	۹۵۶
۹۲۵	۹۵۰
۹۰۷	۹۴۳
۸۴۹	۹۱۶
۷۹۳	۸۳۱
۷۶۸	۸۰۱
۷۵۴	۷۷۸
۷۳۵	۷۳۸
۷۱۹	۷۳۲
۷۰۳	۷۰۴
۶۳۸	۶۴۶
۵۰۳	۵۳۲
۴۵۹	۴۶۶

[1] Nicole Fahrenfeld1; Amy Pruden2; and Mark Widdowson, P.E., M.ASCE, Kinetic and Pathway Modeling of Reductive 2,4,6-Trinitrotoluene Biodegradation with Different Electron Donors, 2015 American Society of Civil Engineers

[2] J. Yinonl and D.-G. Hwang, Metabolic Studies of Explosives, Heyden & Son Limited, 1986.

[3] Dongdong Wu, Jagdish P. Singh, Fang Y. Yueh and David L. Monts, 2,4,6-Trinitrotoluene detection by laser photo fragmentation–laser-induced, 1996 Optical Society of America.

[4] Ross J. Harper and Kenneth G. Furton, Biological Detection of Explosives, 2007 Published by Elsevier B.V. All rights reserved.

[5] W. Koch, M. C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, second ed., WILEY-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 2001.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2025-05-17]