ТЕОРЕТИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ІЧ-СПЕКТРА ФЛУОРЕНОНУ В ОСНОВНОМУ СИНГЛЕТНОМУ СТАНІ

Мінаєв Б. Ф[1,2]*.,Францева А. Г.*[1]*,Дем'яненко Є. М.*[2]
[1]Черкаський державний технологічний університет
gibis@rambler.ru
[2]Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького
lamer@cdu.edu.ua

Вивченню спектрів флуоренону і його похідних присвячена значна кількість статей. У своїй роботі ми зробили співвіднесення експериментального й теоретично розрахованого нами ІЧ-спектру цієї сполуки. Розрахунок проводився напівемпіричним методом AM1 за допомогою комп'ютерної програми HyperChem.

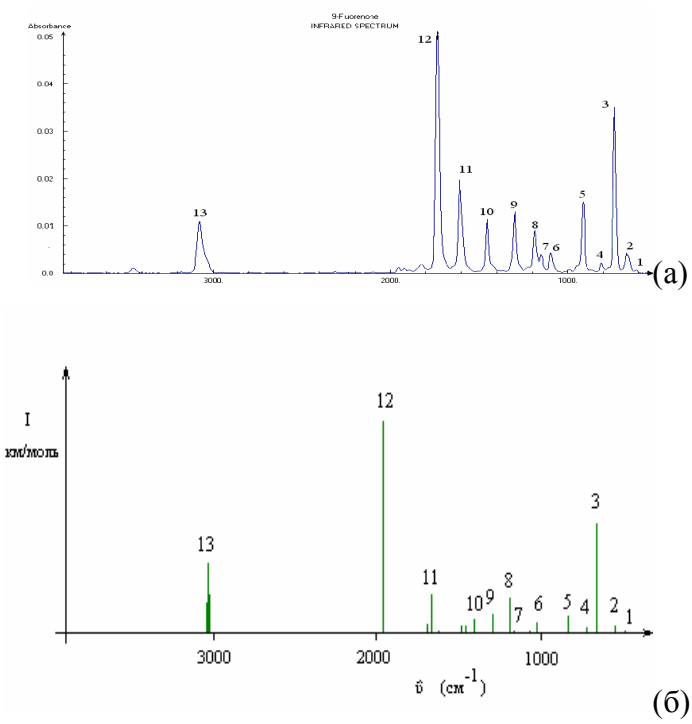

Рис.1. ИК спектри поглинання флуоренону: а- експериментальний , б- теоретично розрахований у наближенні AM-1.

На рисунку 1 наведено експериментальний (а) і теоретично розрахований (б) ІЧ спектри поглинання молекули флуоренону.

Експериментальний ІЧ спектр отриманий за допомогою спектрометра ИК-22, для якого в мікрохвильовій області отримати неможливо.

Розрахунок інтенсивності ІЧ смуг поглинання проводився шляхом обчислення похідних дипольного моменту по нормальних коливаннях. Інтенсивність смуг дана в км/моль. Всі розраховані частоти коливань були матеріальними, що відповідає стійкості молекули флуоренону.

На рисунку 1 (б) наведено розраховані смуги, інтенсивність яких не менші за 2,5 км/моль. Значна кількість смуг, які малоактивні в ІЧ спектрі або активні в КРС спектрі, в даній роботі не наведені. Як видно з рисунка 1 (б) нормальний квантово-хімічний розрахунок з повним обчисленням матриці силових сталих (Гессиана) із градієнтів повних енергій, дає надійне віднесення смуг поглинання флуоренону. Так, наприклад, довгохвильова область спектру (608-1100 см$^{-1}$) у нашому розрахунку відображена до дрібних деталей.

На підставі розрахунку виявлено значну кількість коливань у мікрохвильовій і тієї, що прилягає до неї області спектра (40-200 см$^{-1}$) які, не відображені в експерименті й мають малу інтенсивність.

Невеликі зміщення смуг розрахованого й експериментального спектрів є типовими для квантово-хімічних розрахунків. Зазвичай вводиться масштабний множник, за допомогою якого, теоретичні частоти, одержують кращі погодження з експериментом.