

Сборник: XXIII съезд по спектроскопии. 17-21 октября 2005 г. Звенигород, Московская обл. - Тезисы докладов - Год издания: 2005 – стр.: 318 – 319.

---

---

ДЕТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ  
УФ-СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ  
С КРУТИЛЬНЫМИ ВОЛЧКАМИ

Тюлин В.И., Королева Л.А., Матвеев В.К., Краснощеков С.В.,  
Пентин Ю.А.

119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы, МГУ им. М.В.Ломоносова,  
Химический факультет, E-mail: admin@service017.chem.msu.ru

Колебательная структура УФ-спектров поглощения органических молекул с крутильными волчками содержит уникальную информацию о конформационном строении этих молекул, поскольку 70-80% наблюдаемых колебательных полос связаны с крутильными колебаниями, имеющими частоты порядка 50-100 см<sup>-1</sup>. Обилие этих полос создает трудности с их расшифровкой, т.к. большинство из них являются составными колебаниями, т.е. крутильными частотами, находящимися во взаимодействии с другими частотами изучаемых молекул в обоих S<sub>0</sub> и S<sub>1</sub> электронных состояниях. С другой стороны, крутильные уровни многократно повторяются в разных Таблицах Деландра (ТД), которые удастся построить в результате полного анализа этих спектров, и тем самым надежно определять и чистые крутильные уровни. Эта особенность дает также уникальную возможность обнаружить смещения некоторых крутильных уровней из-за Ферми-резонанса с другими уровнями, поскольку они повторяются в отдельных ТД. Другой важной

особенностью развиваемого метода является то, что полосы 00-переходов различных конформеров в УФ- спектрах сильно разнесены и соответствующие частоты не перекрываются, в противоположность Фурье - спектрам, где крутильные частоты разных изомеров часто попадают в одну область.

Развиваемый метод имеет ряд особенностей и преимуществ перед другими экспериментальными методами получения информации о торсионных уровнях, необходимых для восстановления потенциальных функций внутреннего вращения (ПФВВ). Он применяется нами на протяжении длительного времени [1-8] для исследования молекул некоторых органических соединений (производные акролеина, глиоксаля, бензальдегида и др.). Для облегчения полной расшифровки этих спектров создан комплекс программ [6], помогающих автоматизировать процесс построения ТД, оптимизировать геометрические параметры отдельных изомеров, проводить предварительный анализ экспериментальных данных и т.д. Результатом этой работы является надежное построение ПФВВ для отдельных молекул [7,8] и установление закономерностей внутри указанных органических соединений с целью создания общей теории внутреннего вращения.

#### Литература

1. Пентин Ю.А., Тюлин В.И. // Вестн.МГУ, Хим. 1977. Т. 18. N5. С.596.
2. Марголин Л.Н. // Автореферат канд.дисс. М. МГУ. 1975.
3. Глебова Л.А. // Автореферат канд.дисс. М. МГУ. 1981.
4. Годунов И.А. // Автореферат канд.дисс. М. МГУ. 1981.
5. Баженова Л.Н. // Автореферат канд.дисс. М. МГУ. 1985.
6. Матвеев В.К., Тюлин В.И. // ЖСХ. 1997 Т.38. N2. С.363.
7. Бачи- Том П.А.Л. // Автореферат канд.дисс. М. МГУ. 1998.
8. Королева Л.А., Тюлин В.И., Матвеев В.К., Пентин Ю.А. // ЖФХ. 2002. Т.76. С.332.