

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ЦИКЛОГЕКСАНОЛА В РАЗЛИЧНЫХ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЯХ

Л.М. Бабков¹, Н.А. Давыдова², Е.А. Моисейкина¹

¹*Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов*

²*Институт физики НАН Украины, Киев*

Методом нейтронографии и рентгеноструктурного анализа установлены четыре полиморфные модификации циклогексанола, структуры которых в значительной степени определяются водородной связью (Н-связь), и четыре конформера молекулы, различающихся ориентацией гидроксильной группы.

Измерены колебательные спектры циклогексанола в жидком состоянии при разных температурах и в двух полиморфных кристаллических модификациях. Предварительный анализ спектров указывает на наличие в образце водородных связей. Спектры полиморфных модификаций отличаются друг от друга. Причиной является различие в упаковках, на которые существенно влияет Н-связь, и возможное преобладание в них конформеров определенного строения.

Для теоретического обоснования и проверки этого предположения методом функционала плотности (B3LYP) в базисе 6-31+G(d) с использованием комплекса программ Gaussian'03 построены структурно-динамические модели конформеров молекул циклогексанола, различающихся ориентацией гидроксильной группы, и различных Н-комплексов (цепочечный ассоциат, циклические тример и тетрамер) конформеров одного типа.

Минимизированы энергии, оптимизированы структуры, рассчитаны дипольные моменты, поляризуемости, силовые постоянные и частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении, распределение интенсивности в ИК спектрах и сечение рассеяния в спектрах КР.

На основании анализа результатов моделирования установлено соответствие между структурами Н-комплексов различных конформеров и полиморфными модификациями, дана интерпретация измеренных спектров.