

1,1-dichlorgermaciklopentano konformacinis tyrimas virpesinės spektroskopijos ir teoriniais metodais

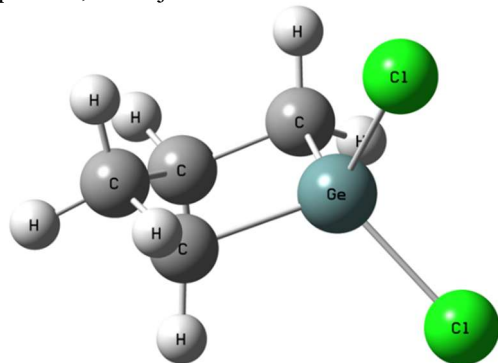
Conformational study of 1,1-dichlorgermacyclopentane by means of vibrational spectroscopy and theoretical calculations

Tautvydas Taraškevičius¹, Jogilė Mačytė¹, Justinas Čeponkus¹, Gamil A. Guirgis², Valdas Šablinskas¹
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
²Čarlstono koledžas, Chemijos ir biochemijos departamentas, SC 29424 Čarlstonas, JAV
tautvydas.taraskevicius@ff.stud.vu.lt

Konformacinė analizė yra populiarus metodas organinių medžiagų struktūriniuose tyrimuose. Konformerai gali skirtis savo fizikinėmis savybėmis, reaktingumu ir t.t., taigi norint įvertinti molekules elgseną reikalinga išsami konformacinė analizė [1]. Šio darbo tikslas yra naujai susintetintos 1,1-dichlorgermaciklopentano molekules struktūros ir galimų stabilių konformerų nustatymas, naudojantis virpesine spektroskopija ir tankio funkcionalo (DFT) skaičiavimais.

Molekules struktūros analizė buvo atliekama sugretinus molekulių eksperimentinius virpesinius spektrus su DFT skaičiavimų rezultatais. Tyrimų pradžioje buvo užregistruoti skysto bandinio pažeisto visišką vidaus atspindžio (ATR) infraraudonosios spinduliuotės spektrai. Siekiant atlikti išsamesnę spektrinių juostų identifikaciją taip pat buvo registruojami Ramano sklaidos spektrai, naudojant Furjė ir difrakcinį spektrometrus. Virpesių simetrijos nustatymui buvo užregistruoti poliarizaciniai Ramano sklaidos spektrai.

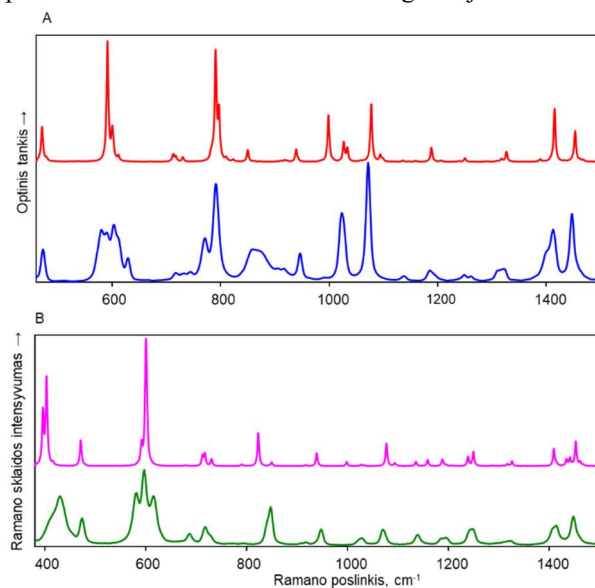
Ieškant galimų konformerų arti esančias spektrines juostas taip pat buvo užregistruoti matricinės izoliacijos FTIR sugerties spektrai. Šiuo metodu užregistruotos spektrinės juostos yra siauros, todėl arti esančios skirtingų konformerų juostos nepersiklos. duomenys interpretuoti, naudojant DFT skaičiavimus.



1 pav. Teoriškai apskaičiuota 1,1-dichlorgermaciklopentano voko struktūra, naudojant *B3LYP/cc-pVTZ*.

DFT skaičiavimai buvo atlikti naudojantis *B3LYP/cc-pVTZ* funkcionalą ir įvertinant virpesių anharmoniskumą. Panaudojant skaičiavimų ir eksperimentinius rezultatus nustatyta, kad 1,1-dichlorgermaciklopentanas turi vieną stabilią

konformaciją (žr. 1 pav.), kuriai būdinga molekules penkianario žiedo voko formos konfigūracija.



2 pav. (A) 1,1-dichlorgermaciklopentano ATR-FTIR sugerties spektras (mėlynas) kartu su teoriškai apskaičiuoto konformero IR spektru (raudonas); (B) 1,1-dichlorgermaciklopentano FT-Ramano spektras (žalias) kartu su teoriškai apskaičiuoto konformero Ramano sklaidos sklaidos spektru (rožinis).

Eksperimentiniai ir teoriniai spektrai pateikti 2 pav. Teoriškai nustatyti virpesinių spektrinių juostų dažniai gerai koreliuoja su eksperimentiškai gautais spektrinių juostų dažniais. Taigi galima teigti, kad apskaičiuota struktūra yra stebima skystos fazės bandinyje. Eksperimentinės spektrinės juostos buvo priskirtos virpesinėms modams remiantis skaičiavimų rezultatais.

Spektriniai eksperimentai dujų fazėje ir su N_2 matricioje izoliuotomis tiriamomis molekulėmis parodė, kad dujinėje būsenoje molekulė yra nestabili ir greitai suskyla.

Skaičiavimai atlikti Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto superkompiuterio "VU HPC" resursais.

Reikšminiai žodžiai: konformacinė analizė, virpesinė spektroskopija, ciklopentanas.

Literatūra

[1] Dragojlovic, V. Conformational analysis of cycloalkanes. ChemTexts 1, 14 (2015). <https://doi.org/10.1007/s40828-015-0014-0>