

*М.Е. АГЕЛЬМЕНЕВ, С.М. БРАТУХИН, З.М. МУЛДАХМЕТОВ,
В.В. ПОЛИКАРПОВ, О.А. ЯКОВЛЕВА*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИК СПЕКТРОВ НЕКОТОРЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ LADY

С помощью программы LADY выполнен расчет и анализ ИК спектров поглощения мезогенных кристаллов на основе галогензамещенных арилпропаргиловых эфиров фенолов (АПЭФ). Получены значения силовых постоянных, потенциалов межатомного взаимодействия валентно несвязанных атомов, удовлетворительно описывающие экспериментальные ИК спектры. Данна интерпретация соответствующих полос спектров поглощения. Выяснено влияние типа замещения на силовое поле отдельных молекул в кристаллах АПЭФ.

Эффективность использования таких методов, как молекулярная динамика [1-3] во многом определяется знанием таких характеристик, как силовые постоянные, потенциалы межатомных взаимодействий. Основным источником такой информации являются экспериментальные данные. В этом смысле исследования спектров ИК поглощения дают наиболее полную информацию о состоянии всей молекулы.

Задача существенно усложняется для многоатомных молекул, к которым относятся жидкокристаллические соединения. Нематические жидкие кристаллы на основе арилпропаргиловых эфиров фенолов являются перспективным материалом для улучшения температурных характеристик жидкокристаллических устройств [4-6]. Необходимость подробного изучения структуры и свойств жидкокристаллических состояний АПЭФ заставляет обратить внимание на твердокристаллическое со-

стояние, предшествующее мезофазе, поскольку оно подготавливает и во многом определяет ее свойства [6]. Основная ценность исследований кристаллической структуры жидкокристаллических соединений заключается в том, что из наблюдаемой в твердой фазе мезогена молекулярной организации и расчетов энергии межмолекулярных взаимодействий можно сделать выводы о строении и наличии степеней свободы, которые, вероятно, имеют место в мезофазе [6].

Основными методами исследования стали методы колебательной спектроскопии ИК поглощения (эксперимент, теория). Спектры измерены в области $400 - 4000 \text{ см}^{-1}$ при комнатной температуре. Интерпретация спектров была дана на основе получения теоретического ИК спектра с помощью программы для моделирования динамики решетки кристаллов LADY, разработанной Смирновым М.Б. и Казимировым В.Ю. [7]

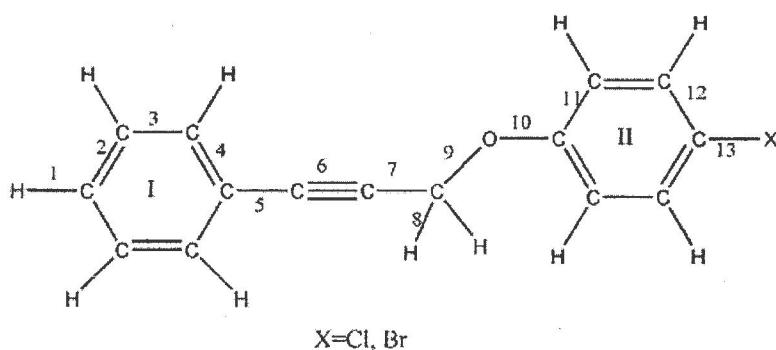


Рис. 1. Молекулярная диаграмма молекул АПЭФ с галогенными заместителями и введенная нумерация естественных координат

В качестве объектов исследования были выбраны следующие нематогенные соединения:

фенилпропаргиловый эфир п-хлор фенола (ФЭХ) ($T_{K-N}=338\text{ K}$, $T_{N-I}=390\text{ K}$, $\Delta\varepsilon=-0,81$) фенилпропаргиловый эфир п-бром фенола (ФЭБ) ($T_{K-N}=357\text{ K}$, $T_{N-I}=395\text{ K}$, $\Delta\varepsilon=-0,58$).

Геометрии изолированных молекул, а также остаточные заряды на атомах были рассчитаны с помощью полуэмпирического метода MNDO.

На рисунке 1 приведена молекулярная диаграмма молекулы АПЭФ с галогенными заместителями и введенная нумерация естественных координат.

С точки зрения решения обратной спектральной задачи молекулы АПЭФ являются очень сложными объектами, поскольку состоят из многих атомов. В связи с этим полный расчет колебательного спектра молекулы ЖК было решено проводить с использованием фрагментарного способа расчета [8]. Он состоит в том, чтобы определить силовые постоянные и потенциалы межатомного взаимодействия несвязанных атомов отдельно для каждого фрагмента молекулы, сопоставляя их рассчитанные и экспериментальные ИК спектры. На основании этих данных можно будет составить единое силовое поле для всей молекулы, путем небольшой вариации силовых постоянных и межатомных потенциалов для фрагментов.

Начальное силовое поле было составлено из силовых постоянных для отдельных фрагментов молекулы АПЭФ [9, 10]. Затем с использованием последней версии программы LADY проводилось моделирование элементарной ячейки фрагмента, а также его колебательного спектра. Первоначально создавался входной файл, содер-

жащий описание структуры моделируемого фрагмента (размер ячейки, ее симметрия, положение каждого атома в ячейке, а также заряды на атомах). После моделирования структуры ячейки задавались параметры силового поля и проводилось моделирование ИК-спектра фрагмента. Затем параметры уточнялись путем их вариации с целью наибольшего совпадения теоретического спектра с экспериментальным.

Сложность такого подхода заключалась в том, что в литературных данных расчет силовых постоянных проводился с использованием валентно-силового поля, а значит, он включает в себя помимо диагональных силовых постоянных недиагональные, которые соответствуют взаимодействию валентных связей, не имеющих общих атомов, а также взаимодействию торсионных углов. Однако программа LADY позволяет учитывать в валентном приближении кроме диагональных силовых постоянных только 3 недиагональные силовые постоянные, которые соответствуют взаимодействию связей, образующих валентный угол, и взаимодействию угла с этими связями. Все остальные взаимодействия можно учесть, вводя дополнительный межатомный потенциал. Такого рода силовое поле можно отнести к разновидности силового поля Юри-Бредли: в основе своей является приближением типа валентных сил, но включает в себя дополнительно несколько членов, соответствующих центральным силам между несвязанными атомами [9]. Межатомное взаимодействие можно описать некоторой вандерваальсовой потенциальной функцией, складывающейся из двух компонент: силы отталкивания на коротком расстоянии и силы притяжения на большом [11].

Таблица 1. Вид потенциальной функции и ее радиус действия для различных типов межатомных взаимодействий в кристаллах АПЭФ

Пара несвязанных атомов	Вид вандерваальсовой потенциальной функции	Радиус действия потенциала, Å
C - C	$-2,5842 \cdot r^{-6} + 615,618 \cdot \exp(-r/0,25024)$	2,8 – 20
C - H	$-0,623 \cdot r^{-6} + 385,434 \cdot \exp(-r/0,21344)$	2,7 – 20
C - O	$-3,465 \cdot r^{-6} + 638,6 \cdot \exp(-r/0,22816)$	3,2 – 20
H - H	$-0,1253 \cdot r^{-6} + 241,61 \cdot \exp(-r/0,17664)$	2 – 20
O - H	$-0,3332 \cdot r^{-6} + 396,94 \cdot \exp(-r/0,19136)$	2,4 – 20
O - O	$-0,8739 \cdot r^{-6} + 667,37 \cdot \exp(-r/0,20608)$	3 – 20
C - Br	$-7,948 \cdot r^{-6} + 1236,9 \cdot \exp(-r/0,26864)$	2,9 – 20
C - Cl	$-5,253 \cdot r^{-6} + 1051,56 \cdot \exp(-r/0,2576)$	3 – 20
Br - H	$-2,077 \cdot r^{-6} + 782,46 \cdot \exp(-r/0,23184)$	3 – 20
Cl - H	$-1,31 \cdot r^{-6} + 661,6 \cdot \exp(-r/0,2208)$	3 – 20
Br - O	$-4,948 \cdot r^{-6} + 1288,37 \cdot \exp(-r/0,24656)$	3 – 20
Cl - O	$-3,189 \cdot r^{-6} + 1093 \cdot \exp(-r/0,23552)$	3 – 20
Br - Br	$-23,83 \cdot r^{-6} + 2492,28 \cdot \exp(-r/0,28704)$	3 – 20
Cl - Cl	$-10,677 \cdot r^{-6} + 1805 \cdot \exp(-r/0,26496)$	3 – 20

Вандерваальсовы потенциальные функции взаимодействия валентно несвязанных атомов были рассчитаны для каждого вида парных взаимодействий в молекуле, используя данные из [12]. При этом для исключения 1,3 – взаимодействий был введен соответствующий радиус действия потенциала. В таблице 1 представлены виды вандерваальсовой потенциальной функции для различных типов межатомных взаимодействий, используемых при расчетах.

Расчет молекул АПЭФ с помощью полуэмпирических методов позволяет получить характеристики этих молекул в газовой фазе, однако, молекула в реальном кристалле имеет существенные структурные отличия, а значит, весь кристалл уже нельзя описать, используя то же самое силовое поле.

Чрезвычайно важным для понимания строения мезофазы является анализ расположения молекул в мезогенном кристалле [13]. Как известно по данным рентгенографического анализа [5], в кристаллической структуре нематических жидких кристаллов наблюдается упаковка «внахлест», т.е. концы одной молекулы располагаются приблизительно напротив центра соседних молекул. При этом во многих случаях обнаруживается строго параллельное расположение молекул. Такая упаковка является результатом размещения объемных фрагментов одной молекулы бок о бок с менее объемистыми. Следует также отметить, что степень перекрытия моле-

кул существенно влияет на возможность образования мезофазы.

В случае кристаллов, состоящих из АПЭФ, отсутствуют данные рентгенографического анализа. Это связано с тем, что для рентгенографического анализа необходимо вырастить достаточно большие кристаллы. Однако того количества вещества, которое есть в наличии, недостаточно для этого.

В связи с этим, была проведена работа по поиску подходящей пространственной группы

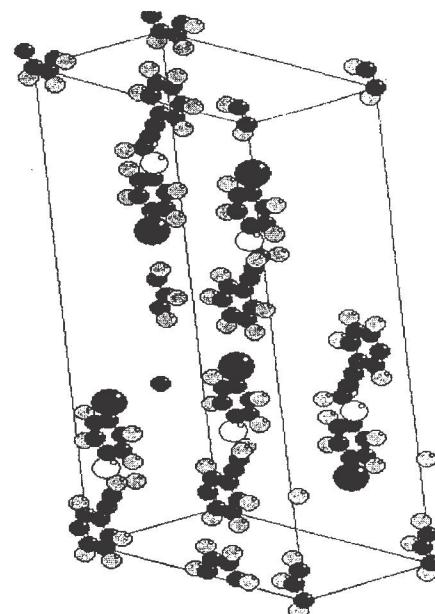


Рис. 2. Элементарная ячейка в расчетах ИК спектров кристаллов с АПЭФ

симметрии элементарной ячейки, которая задавала бы расположение отдельных молекул в ней таким образом, чтобы минимальное расстояние между ними было $3 - 3,5 \text{ \AA}$, а сами молекулы размещались «внахлест» относительно друг друга. Были опробованы разные пространственные группы симметрии и выбрана наиболее оптимальная для расчетов – I – 11 (триклинная система) с параметрами элементарной ячейки $a=20$, $b=40$, $c=10 \text{ \AA}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$. Все молекулы при моделировании располагались одинаковым образом, так, чтобы их длинные оси были направлены вдоль

оси Y. Число молекул в ячейке сохранялось равным 4 при моделировании всех кристаллов. На рисунке 2 представлен вид созданной элементарной ячейки.

Проводилась работа по вариации всех параметров силового поля мезогенных кристаллов с ФЭХ и ФЭБ для достижения наилучшего совпадения теоретического и экспериментального спектров. На рисунке 3 приведены экспериментальный и теоретический ИК спектры кристаллов ФЭХ и ФЭБ.

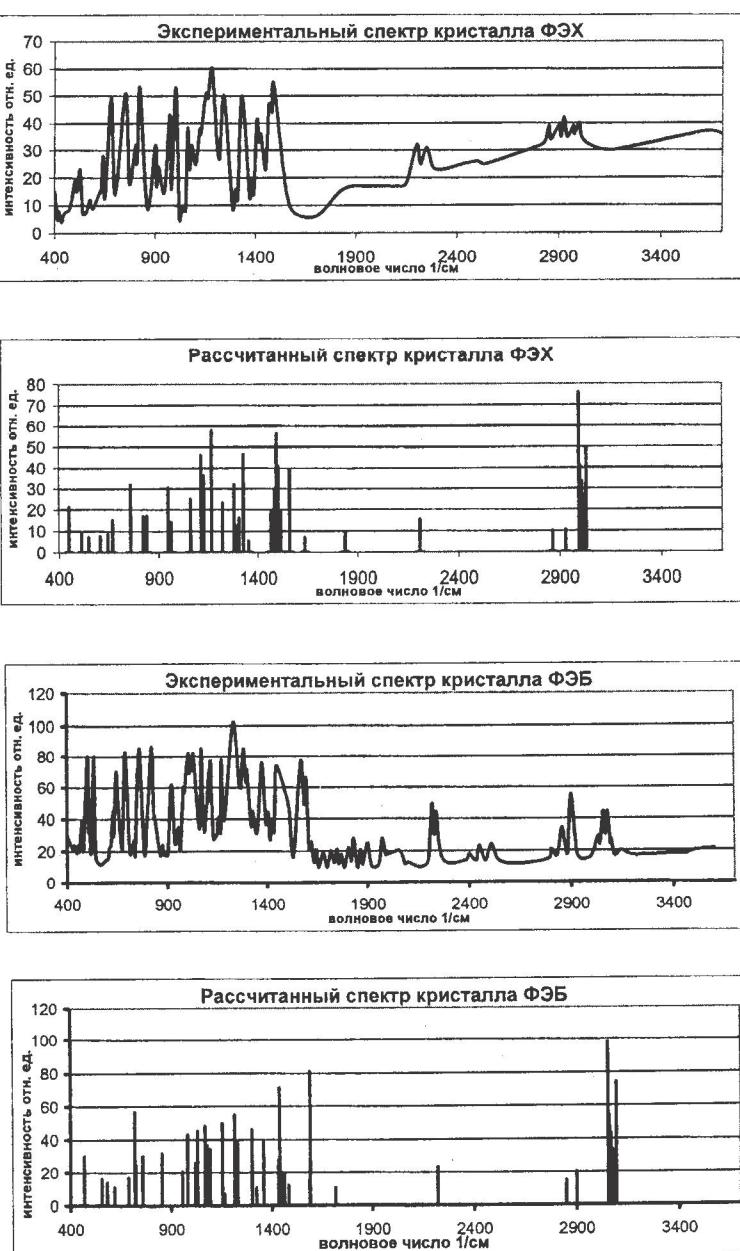


Рис. 3. Экспериментальные и теоретические ИК спектры кристаллов с ФЭХ и ФЭБ

Таблица 2. Силовые постоянные* для колебаний молекул в кристаллах АПЭФ с галогенными заместителями

Силовая постоянн.	Значение		Силовая постоянн.	Значение		Силовая постоянн.	Значение	
	ФЭХ	ФЭБ		ФЭХ	ФЭБ		ФЭХ	ФЭБ
K ₁	4,9	5,1	K _{9,10}	1,42	1,42	A ₂ ^{2,3} =A ₃ ^{2,3}	0,38	0,38
K ₂ =K ₃ =K ₄	6,0	6,0	K _{10,11}	0,8	0,8	A ₄ ^{4,5}	0,08	0,1
K ₅	4,73	4,73	K _{12,13}	0,83	0,69	A ₅ ^{4,5}	0,121	0,121
K ₆	16,4	14,75	H ₁ ²	0,218	0,218	A ₅ ^{5,6}	0,2	0,2
K ₇	5,14	5,14	H ₂ ³	0,535	0,535	A ₆ ^{5,6}	0,15	0,15
K ₈	4,58	4,46	H ₄ ⁵	0,1	0,1	A ₆ ^{6,7}	0,15	0,15
K ₉ =K ₁₀	5,83	5,3	H ₅ ⁶	0,06	0,06	A ₇ ^{6,7}	0,24	0,24
K ₁₂	6,0	6,0	H ₆ ⁷	0,164	0,164	A ₇ ^{7,8}	0,32	0,32
K ₁₃	3,2	3,1	H ₇ ⁸	0,1	0,1	A ₈ ^{7,8}	0,28	0,28
K _{1,2}	0,51	0,51	H ₇ ⁹	0,5	0,5	A ₈ ^{8,9}	0,21	0,21
K _{2,3}	0,86	0,86	H ₈ ⁸	0,04	0,06	A ₈ ^{8,9}	0,2	0,2
K _{4,5}	0,51	0,51	H ₈ ⁹	0,4	0,4	A ₉ ^{8,9}	0,13	0,13
K _{5,6}	0,6	0,6	H ₉ ¹⁰	0,08	0,08	A ₉ ^{9,10}	0,2	0,2
K _{6,7}	0,52	0,52	H ₁₀ ¹¹	0,5	0,5	A ₁₀ ^{9,10}	0,22	0,22
K _{7,8}	0,7	0,7	H ₁₂ ¹³	0,18	0,064	A ₁₀ ^{10,11}	0,38	0,45
K _{8,8}	0,55	0,54	A ₁ ^{1,2}	0,121	0,121	A ₁₂ ^{12,13}	0,21	0,35
K _{8,9}	0,5	0,5	A ₂ ^{1,2}	0,08	0,2	A ₁₃ ^{12,13}	0,559	0,35

* - K_i - силовая постоянная i-й связи (мдин/А); K_{ij} - силовая постоянная угла, образованного i-й и j-й валентными связями (мдин*А); H_i^j- силовая постоянная взаимодействия координаты растяжения i-й и j-й связей (мдин/А); A_i^j – силовая постоянная взаимодействия координаты растяжения i-й связи и изменения валентного угла, образованного i-й и j-й связями (мдин).

Таблица 3. Экспериментальные и рассчитанные частоты колебаний полос спектра поглощения ФЭХ.

$\nu_{\text{эксп.}} (\text{см}^{-1})$	$\nu_{\text{расч.}} (\text{см}^{-1})$	Отнесение*
3010 – 2970	3028 – 2998 2997 – 2992	ν_{CH} бенз. кольцо I (95) ν_{CH} бенз. кольцо II (95)
2925	2928	ν_{CH} группы CH ₂ антисимм. (100)
2850	2850	ν_{CH} группы CH ₂ симм. (100)
2250 – 2200	2221	ν_{CC} тройная связь (92)
1570 – 1480	1557 – 1502 1492 – 1467	ν_{CC} бенз. кольцо I (75), δ_{CC} бенз. кольцо I (25) ν_{CC} бенз. кольцо II (75), δ_{CC} бенз. кольцо II (25)
1330 – 1300	1325 1303	δ_{CC} бенз. кольцо I (80) $\nu_{\text{CO}_{10}}$ (43), ν_{CO_9} (9)
1240	1278	δ_{CC} бенз. кольцо II (70), ν_{CC} бенз. кольцо II (10)
1180 – 1100	1125 1110	ν_{CO_9} (22), δ_{COC} (9) $\nu_{\text{CO}_{10}}$ (24)
1060	1057	ν_{CCl} (28)
1000 – 945	962 946	ν_{CC} бенз. кольцо I (80), ν_{CC_5} (20) ν_{CC} бенз. кольцо II (60), δ_{CCC} бенз. кольцо II (20)
820	820	ν_{CC} бенз. кольцо I (20), $\nu_{\text{CO}_{10}}$ (10)
750	757	$\delta_{\text{CO}_9\text{H}}$ (35), δ_{CC} группы CH ₂ (65)
680	668	ν_{CCl} (18), δ_{COC} (12), δ_{CCC} бенз. кольцо II (30)
640	644 606	δ_{CCC} бенз. кольцо I (50) δ_{CCC} бенз. кольцо II (50)
540 – 510	513	ν_{CCl} (13), δ_{CCC} ₆₋₇ (8), δ_{COC} (18), δ_{OCC} ₁₁ (10)
445	450	ν_{CCl} (17)
	310	δ_{CCCl} (49)

Таблица 4. Экспериментальные и рассчитанные частоты колебаний полос спектра поглощения ФЭБ

$\nu_{\text{эксп.}} (\text{см}^{-1})$	$\nu_{\text{расч.}} (\text{см}^{-1})$	Отнесение*
3100 – 3030	3092 – 3062 3058 – 3053	$\nu\text{CH}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (98) $\nu\text{CH}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (98)
2900	2900	$\nu\text{CH}_{\text{группы CH}_2 \text{ антисимм.}}$ (96)
2855	2850	$\nu\text{CH}_{\text{группы CH}_2 \text{ симм.}}$ (100)
2270 – 2220	2221	$\nu\text{CC}_{\text{тройная связь}}$ (81), νCC_7 (9)
1570	1591 1589	$\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (43), νCO_{10} (23), $\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (19) $\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (58), $\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (12)
1532 - 1448	1463 1449 1440	$\delta\text{CCH}_{\text{группы CH}_2}$ (34), $\delta\text{CHN}_{\text{группы CH}_2}$ (27), $\delta\text{HCO}_{8.9}$ (27) $\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (74), $\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (11), $\delta\text{CCC}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (10) $\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (65), $\delta\text{CCC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (10)
1374	1359	$\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (69), $\delta\text{CCC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (8)
1320 - 1260	1325 1302	$\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (64), $\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (31) $\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (51), $\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (30)
1260 - 1200	1229 1215	νCO_9 (26), $\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (23), $\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (20), νCO_{10} (9) $\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (88)
1170	1153	$\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (42), $\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (19), νCC_7 (6)
1116	1093	$\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (23), νCC_7 (14), $\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (13), νCO_9 (8)
1070	1079	$\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (50), νCBr (21)
1030	1030	$\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (71), $\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (19)
1004	981	$\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (30), νCO_9 (15), $\delta\text{CCC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (12), νCC_7 (11)
955	954	$\delta\text{CCC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (55), $\delta\text{CCH}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (9), δCCBr (5), νCO_9 (6)
822	852	$\nu\text{CC}_{\text{бенз. кольцо I}}$ (46), νCC_7 (15)
690	688	$\delta\text{CCH}_{\text{группы CH}_2}$ (32), $\delta\text{CCC}_{5.6}$ (15), $\delta\text{CCC}_{6.7}$ (15)
630	619	$\delta\text{CCC}_{\text{бенз. кольцо II}}$ (41), νCBr (5)
543 - 455	468	$\delta\text{CCC}_{5.6}$ (21), νCC_5 (19), δCCO_9 (14), νCO_{10} (11), νCC_7 (10)
	273	δCCBr (43)

* - νAB – растяжение связи A-B, δABC – изменение угла ABC; в скобках указаны вклады (в процентах) деформации соответствующей координаты в распределение потенциальной энергии данного колебания.

В таблице 2 представлены наборы силовых постоянных, при которых удалось получить хорошее согласование наблюдаемых и вычисленных частот.

Рассчитанные колебательные частоты достаточно хорошо соответствуют экспериментальным и позволяют провести детальную интерпретацию спектральных полос. Эта информация с указанием распределения потенциальной энергии (РПЭ) колебаний по естественным координатам для ФЭХ и ФЭБ дана в таблицах 3 и 4.

В высокочастотной области ($\sim 3000 \text{ см}^{-1}$) в каждом спектре имеются несколько полос поглощения, перекрывающихся между собой. Они соответствуют колебаниям связей C-H бензольных колец, причем частоты колебаний кольца без замещения хлором или бромом несколько выше частот колебаний кольца с замещением. Две полосы с частотами 2928 см^{-1} и 2850 см^{-1} в спектре ФЭХ и 2900 см^{-1} и 2855 см^{-1} в спектре ФЭБ

были отнесены к антисимметричному и симметричному колебаниям метиленовой группы CH_2 соответственно. Данное отнесение подтверждается также результатами других неэмпирических расчетов, приведенных в работах Грибова Л.А. и Свердлова Л.М. [10,14].

В спектральной области $2200 - 2270 \text{ см}^{-1}$ соответствующие полосы были интерпретированы как колебания растяжения связи C?C.

Для колебаний с частотами ниже 1570 см^{-1} характерно присутствие одновременно деформаций связей C-C бензольных колец и валентных углов C-C-H и C-C-C.

Область $1300 - 1110 \text{ см}^{-1}$ характеризуется проявлением колебаний связей эфирного мостика CO_9 и CO_{10} , а также деформациями углов C-O-C.

В низкочастотной области проявляются полосы, обусловленные валентными и деформационными колебаниями связи C-Cl и C-Br. Растви-

жение связи С-Cl характеризуется колебанием с частотой 1060 см⁻¹, а связи С-Br – с частотой 1070 см⁻¹, что совпадает с отнесением для галогензамещенных бензола в работах Свердлова Л.М. [14]. Кроме того, по результатам расчетов деформационным колебаниям С-C-Cl и С-C-Br отвечают полосы поглощения с частотами 310 см⁻¹ и 273 см⁻¹ соответственно.

Таким образом, на основании расчета распределения потенциальной энергии можно сделать вывод о тенденции изменения спектра кристаллов АПЭФ при замещении одного из атомов бензольного кольца на атом галогена.

Наибольшее изменение силового поля наблюдается в области эфирного мостика, а также тройной связи. Это обусловлено влиянием атома галогена соседней молекулы в кристалле на центральную часть данной молекулы. Взаимодействие с соседним атомом брома приводит к уменьшению силовой постоянной связи С?С на 1,65 мдин/А по сравнению с кристаллом ФЭХ, а силовые постоянные связей С-О эфирного мостика уменьшаются на 0,5 мдин/А.

Таким образом, в результате решения обратной спектральной задачи для кристаллов ФЭХ и ФЭБ были получены значения силовых постоянных, потенциалов межатомного взаимодействия валентно несвязанных атомов, удовлетворительно описывающих экспериментальные ИК спектры. Это позволило дать интерпретацию полос спектров поглощения таких многоатомных молекул.

Авторы выражают благодарность одному из создателей программы LADY Смирнову М.Б. за предоставление программы и консультации в вопросах её использования.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Агельменев М.Е., Мулдахметов З.М., Братухин С.М., Пак В.Г., Поликарпов В.В., Яковлева О.А. // Жур. физ. хим., 2008. Т.82, №5. с.902-907.
- 2 Agelmanev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Pak V.G., Polikarpov V.V., Yakovleva O.A. // Mol. Cryst. . Liq. Cryst., 2008. Vol. 494. p. 339–352.
- 3 Мулдахметов З.М., Агельменев М.Е., Братухин С.М., Пак В.Г., Поликарпов В.В., Яковлева О.А. // Доклады НАН РК. -2007. №5. - С. 68-76.
- 4 Мулдахметов З.М., Агельменев М.Е., Советов Е.С. // Ж. физ. хим. - 1999. - Т. 73, № 11. - С. 2085-2086.
- 5 Агельменев М.Е., Бажиков К.Т., Мулдахметов З.М., Сизых М.Ю. // Ж. физ. хим. – 2002. - Т. 76, № 10. - С. 1891-1893.
- 6 Брайян Р.Ф. Журн. структ. химии, 23 (1982) 154-174.
- 7 Smirnov M.B., Kazimirov V.Yu. LADY: Software for lattice dynamics simulations, Dubna (2001).
- 8 Грибов Л.А., Дементьев В.А. Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул, Москва, Наука (1981)
- 9 Волькенштейн М.В., Грибов Л.А., Ельяшевич М.А., Степанов Б.И. Колебания молекул, Москва, Наука (1972) 153-164.
- 10 Грибов Л.А., Дементьев В.А., Тодоровский А.Т. Интерпретированные колебательные спектры алканов, алкенов и производных бензола, Москва, Наука (1986)
- 11 Буркерт У., Эллинджер Н. Молекулярная механика, Москва, Мир (1986) 30-35
- 12 Илиел Э., Аллинджер Н., Энжайл С., Моррисон Г. Конформационный анализ, Москва, Мир (1969) 529
- 13 Палищук А.П., Тимофеева Т.В., Антипин М.Ю., Куликов В.И., Стручков Ю.Т. Кристаллография, 29 (1984) 86-93.
- 14 Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул, Москва, Наука (1970) 401-407.

Резюме

LADY бағдарламасының көмегімен галоген бар фенолдардың арилпропаргил эфирлерінің (ФАПЭ) негізіндегі мезогенді кристалдарды сінірудің ИК спектрінің анализі жөне есептеуі орындалған. Тәжірибелі ИК спектрлерін ойдағыдан сипаттайтын күштің тұрактылығының, валенттілікпен байланыспаған атомдарының атомаралық өзара әрекеттесудің өлеуеті аныкталған. Сініру спектрлерінің сыйкес сыйыктарының түсіндірілуі берілген. Орын басу типінің ФАПЭ кристалдарындағы молекулалардың күш майданына тигізетін өсері аныкталған.

Summary

The calculation and analysis of the IR absorption spectra of the mesogen crystals on the basis of halogen substituted arylpropargyl ethers of phenols (APEC) by means of the LADY program were done. The values of force constants, potentials of internuclear interaction of the atoms that are not connected in valency, which are well describes the experimental infrared spectra were found. The interpretation of the corresponding bands of the absorption spectra was given. The influence of the substitution type on a force field of the separate molecules in crystals APEC was found.

Институт органического синтеза и углехимии
г. Караганда

Поступила 30.06.09