

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ КОРИЧНОЙ КИСЛОТЫ

П.Н. Алиев, студент

Астраханский государственный университет им. В.Н. Татищева
(Россия, г. Астрахань)

DOI:10.24412/2500-1000-2024-3-4-201-205

Аннотация. В данной работе приведена структурно-динамическая модель молекулы коричной кислоты, построенная на основе её химической структуры. Согласно квантово-химическому методу DFT/B3LYP/6-31G(d) произведена оптимизация геометрии конформации молекулы, а также выполнен расчёт частот рамановского сдвига в виде теоретического спектра комбинационного рассеяния. Вычисления подтверждены экспериментально, установлены причины незначительных отклонений. Полученные результаты будут полезны для экспериментального обнаружения коричной кислоты в составе сложного вещества методами КР-спектроскопии.

Ключевые слова: коричная кислота, теоретический КР-спектр, спектр комбинационного рассеяния, Gaussian.

Колебательная спектроскопия, в том числе спектроскопия комбинационного рассеяния света, активно используется для исследования органических соединений [1-3]. Так, например, в работе [1] приведены результаты исследований некоторых аренов методами колебательной спектроскопии. Производными аренов являются ароматические кислоты, к которым относится коричная кислота.

Коричное масло, основным компонентом которого является коричная кислота, применяется в парфюмерии для создания характерного основного тона аромата. Также коричная кислота применяется для синтеза эфиров и в производстве фармакологической продукции. Из применений коричной кислоты следует актуальность данной работы – возможность идентифи-

кации коричной кислоты в составе вещества. Ранее проводились исследования теоретических ИК-спектров коричной кислоты [4].

Структурно-динамическая модель и теоретический КР-спектр

На рисунке 1 показана структурно-динамическая модель молекулы коричной кислоты, построенная в ПО «GaussView 5.0.8». С использованием ПО «Gaussian 09» [6] данная модель была оптимизирована в рамках теории функционала плотности DFT/B3LYP с базисным набором программы 6-31G(d) с целью получения наиболее стабильной конфигурации молекулы. Как оказалось, такой конфигурацией является состояние, при котором плоскости карбоксильной группы и бензольного кольца совпадают.

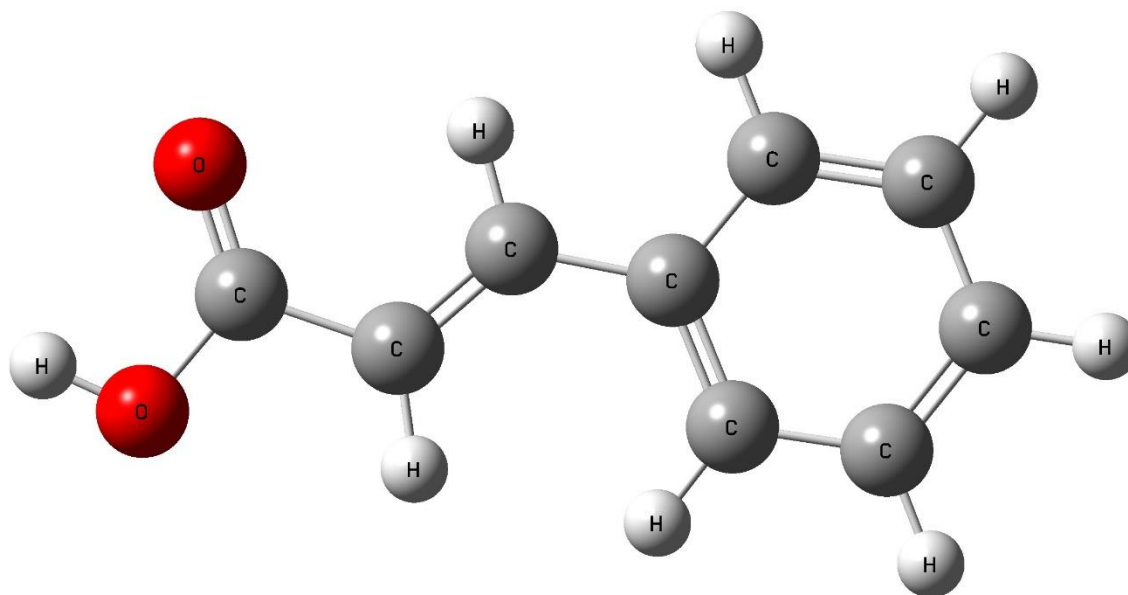


Рис. 1. Структурно-динамическая модель молекулы коричной кислоты

В рамках того же квантово-химического метода был выполнен расчёт теоретического КР-спектра в диапазоне 600...1900 см⁻¹, показанного на рисунке 2.

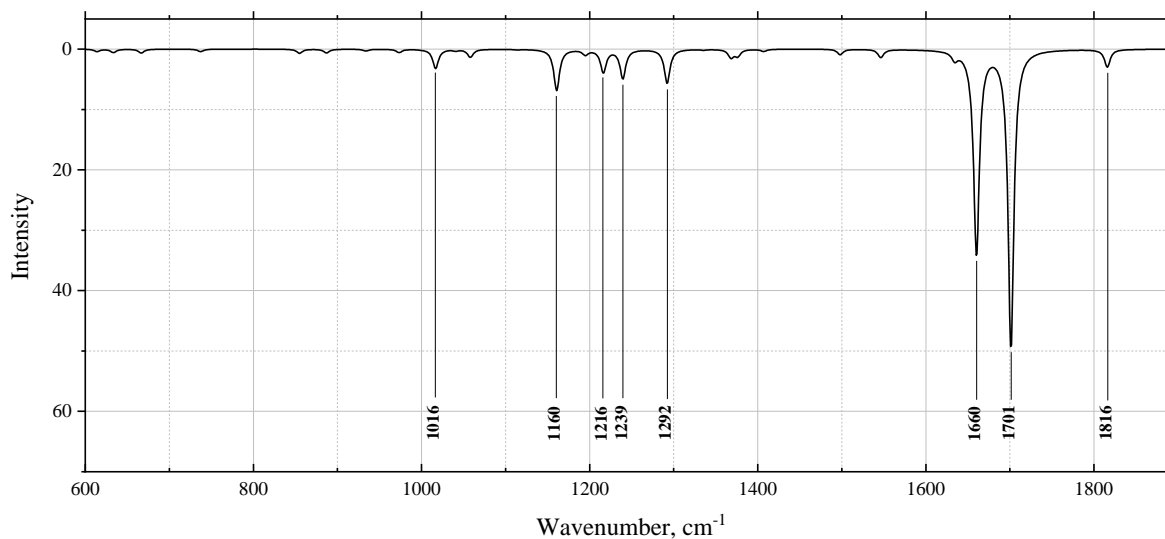


Рис. 2. Теоретический КР-спектр коричной кислоты

Результаты эксперимента и их обсуждение

Для снятия экспериментального КР-спектра использовался спектрометр «Qepro-Raman» фирмы «Ocean Optics». Диапазон измерений составляет 600...1900

см⁻¹, разрешающая способность прибора — 30 см⁻¹. На рисунке 3 показан экспериментальный КР-спектр водного раствора коричной кислоты с изменённым масштабом оси ординат.

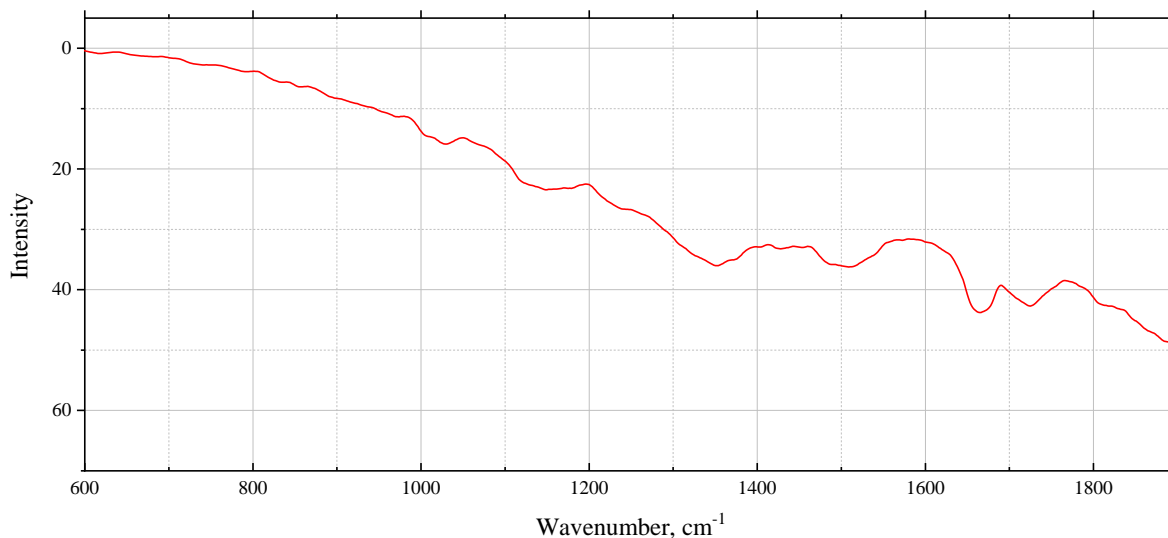


Рис. 3. Экспериментальный КР-спектр коричной кислоты

На рисунке 4 представлено сопоставление теоретического и экспериментального КР-спектров (рис. 2 и 3, соответственно).

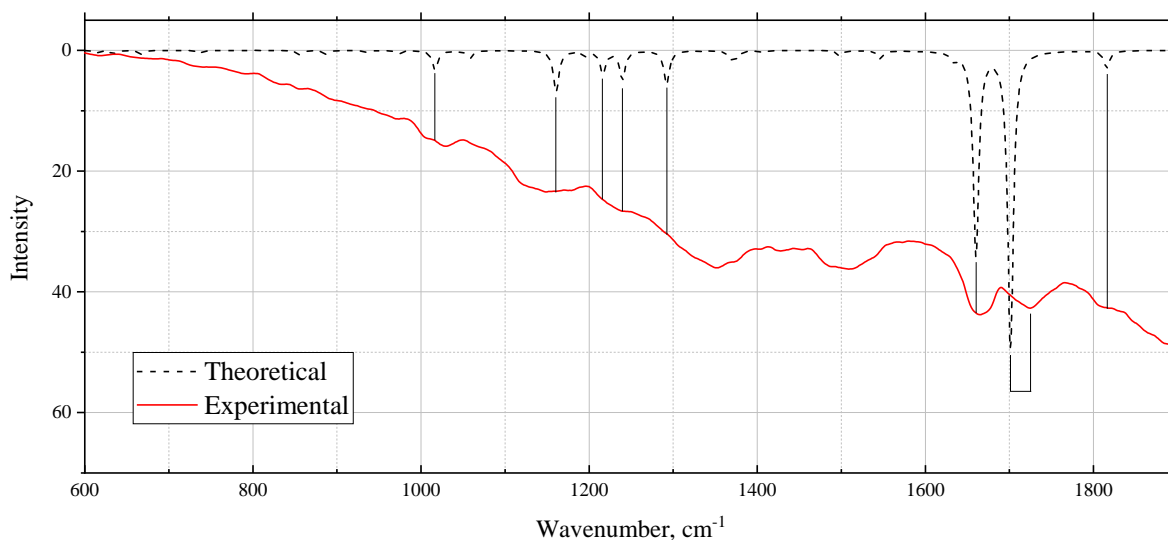


Рис. 4. Сопоставление теоретического и экспериментального КР-спектров

На рисунке 4 наблюдается совпадение большинства пиков спектров, за исключением пика на 1701 см^{-1} , у которого наблюдается разница в 25 см^{-1} , что укладывается в разрешающую способность прибора.

На первый взгляд можно выделить два принципиальных отличия экспериментального спектра от теоретического:

1) Сильная разница в интенсивностях пиков. Эта разница вызвана многочислен-

ными отражениями света лазера от подложки и поверхности раствора. Доказательством этого служит тот факт, что при уменьшении волнового числа рамановского смещения интенсивность рассеяния монотонно увеличивается. Возрастание интенсивности можно наблюдать при линейной аппроксимации экспериментального спектра, что изображено на рисунке 5.

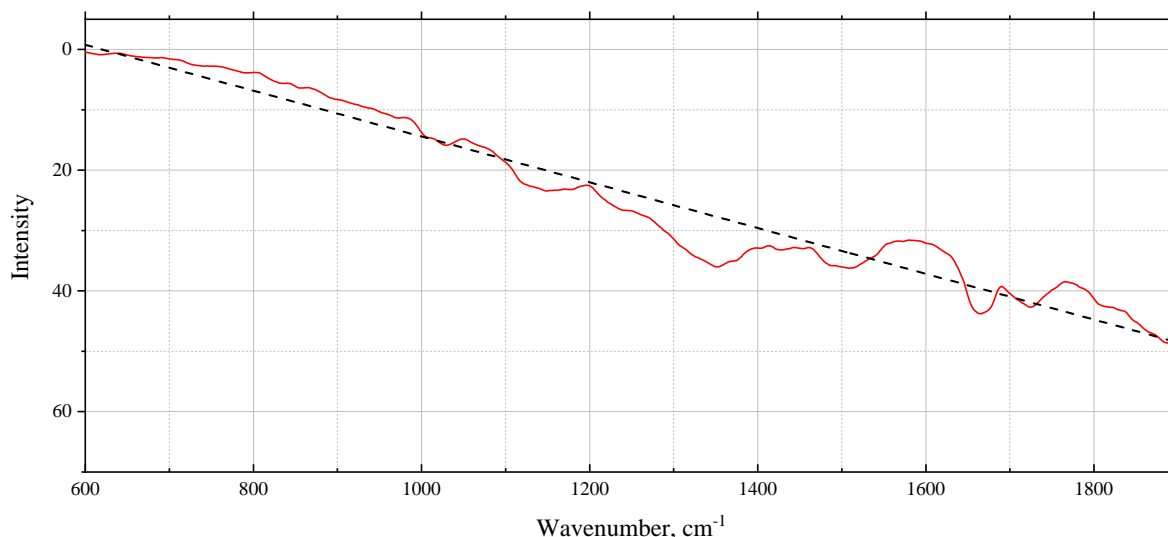


Рис .5. Линейная аппроксимация экспериментального КР-спектра

2) Пики интенсивности экспериментального спектра намного шире, чем в теоретическом. Это вызвано тем, что ширина лоренцевого контура спектра пропорциональна вращательной энергии молекул. В ходе эксперимента использовался водный раствор, в результате чего образовывались дополнительные водородные связи и происходила гидратация молекулы коричной кислоты. Это существенно увеличило вращательную энергию молекул и, как следствие, ширину пиков экспериментального КР-спектра.

Заключение

В ходе исследований была построена структурно-динамическая модель молекулы коричной кислоты. Согласно квантово-химическому методу DFT/B3LYP/6-31G(d) модель была оптимизирована, и по тому же методу был рассчитан теоретический КР-спектр молекулы. Достоверность теоретических вычислений подтверждается экспериментально. Результаты, приведённые в данной статье, могут служить для обнаружения коричной кислоты в составе вещества по экспериментальным КР-спектрам.

Библиографический список

1. Игнатенко Н.М. и др. Результаты исследований методами КР- и ИК-спектроскопии некоторых аренов // *Современные инновации в науке и технике*. – 2019. – С. 133-143.
2. Мынзул Р.А., Иванов А.В., Скрипник И.Л. Применение метода КР-спектроскопии при исследовании свойств термопластичных смазок с регулируемыми наноструктурами // *Природные и техногенные риски (физико-математические и прикладные аспекты)*. – 2014. – № 2. – С. 57-63.
3. Беляцкий В.Н. и др. Возможности спектроскопии комбинационного рассеяния света для проверки подлинности лекарственных препаратов на примере нимесулида и парацетамола // *Инновационные технологии в фармации*. – 2023. – С. 74-77.
4. Алиев П.Н. Квантово-механический расчёт молекулы коричной кислоты в ПО «GAUSSIAN» // *Инновационные научные исследования*. – 2023. – № 5-3 (29). – С. 4-10. – DOI: 10.5281/zenodo.8052720.
5. Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G.Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, et al. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.

INVESTIGATION OF THE RAMAN SPECTRUM OF CINNAMIC ACID

P.N. Aliev, *Student*

Astrakhan State University named after V.N. Tatishchev

(Russia, Astrakhan)

Abstract. *This article presents a structural and dynamic model of a cinnamic acid molecule based on its chemical structure. According to the quantum chemical method DFT/B3LYP/6-31G(d), the geometry of the conformation of the molecule was optimized, and the Raman shift frequencies were calculated in the form of a theoretical Raman spectrum. The calculations have been confirmed experimentally, and the causes of minor deviations have been established. The results obtained will be useful for the experimental detection of cinnamic acid in the composition of a complex substance by Raman spectroscopy methods.*

Keywords: *cinnamic acid, theoretical Raman spectrum, Gaussian.*