СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМЕРА МОЛЕКУЛЫ БЕНЗИЛОВОГО СПИРТА

П.Н. Алиев, *студент*
Астраханский государственный университет им. В.Н. Татищева
(Россия, г. Астрахань)

DOI:10.24412/2500-1000-2025-10-2-213-220

Аннотация. *В статье выявляется геометрическая структура конформера молекулы бензилового спирта путём изменения положения метиленовой и гидроксильной групп и нахождения состояния, соответствующего глобальному минимуму полной энергии. Подтверждается достоверность полученной структуры при сравнительном анализе теоретического ИК-спектра, полученного согласно методу функционала плотности, и экспериментального ИК-спектра. Дана интерпретация ИК-спектра бензилового спирта посредством сопоставления полосы поглощения в экспериментальном спектре и колебанием атомов модели молекулы, вызывающем поглощение ИК-изучения на данном волновом числе.*

Ключевые слова: *бензиловый спирт, конформер бензилового спирта, ИК-спектр, ИК-спектроскопия, DFT.*

Фальсификация косметической продукции, в том числе парфюмерной, является важной проблемой косметологической индустрии [1]. В частности, заявленный производителем парфюмерный ингредиент может быть заменён или может вовсе отсутствовать в продукции. Парфюмерные ингредиенты зачастую представлены органическими соединениями [2]. В данной работе искомым веществом является бензиловый спирт. Он имеет сладкий цветочный аромат [3].

Провести качественный анализ образца на содержание того или иного органического соединения позволяют методы колебательной инфракрасной (ИК) спектроскопии [4]. Сопоставление теоретического ИК-спектра молекулы интересующего вещества и экспериментального ИК-спектра образца позволяет сделать вывод о наличии или отсутствии искомого соединения [5-6].

Для получения теоретического ИК-спектра достаточной точности необходимо выполнение двух условий: выбор подходящего квантового метода вычислений и использование модели молекулы, отвечающей состоянию глобального минимума энергии, т.е. конформеру. Наиболее широко используемым методом в органической квантовой химии является метод функционала плотности (density functional theory, DFT) с использованием функционала B3LYP [7-8]. Для исследований был выбран именно этот метод с разложением атомных орбиталей по базису 6-31+G(d,p), учитывающем диффузные и некоторые поляризационные функции. Данный базис выбран по причине сочетания достаточно высокой точности и использования относительно небольших вычислительных мощностей [9-10].

Определение структуры конформера

Структурная химическая формула бензилового спирта (гидроксиметилбензола) представляет собой замещение одного звена бензольного кольца соединением метиленового и гидроксильного радикалов.

На основе данной структуры построена первичная модель молекулы бензилового спирта с помощью программного обеспечения «GaussView 5.0.9». Известно, что атомы углерода бензольного кольца в состоянии с минимальной энергией располагаются в одной плоскости [11]. Для определения равновесного положения цепи замещения получена зависимость полной энергии модели молекулы от двугранного угла между плоскостью бензольного кольца и плоскостью цепи замещения. Для получения упомянутой зависимости данная цепь поворачивалась с шагом в 5° и оптимизировалась в рамках квантового метода DFT–B3LYP–6-31+G(d,p) с использованием пакета прикладных программ «GAUSSIAN G09W» [12].

На рисунке 1 выделены 4 атома молекулы, которые задают изменяющийся двугранный угол [1]4C-[2]2C-[3]3C-[4]1O. Атомы в позициях [1] и [2] не изменяют своего положения.

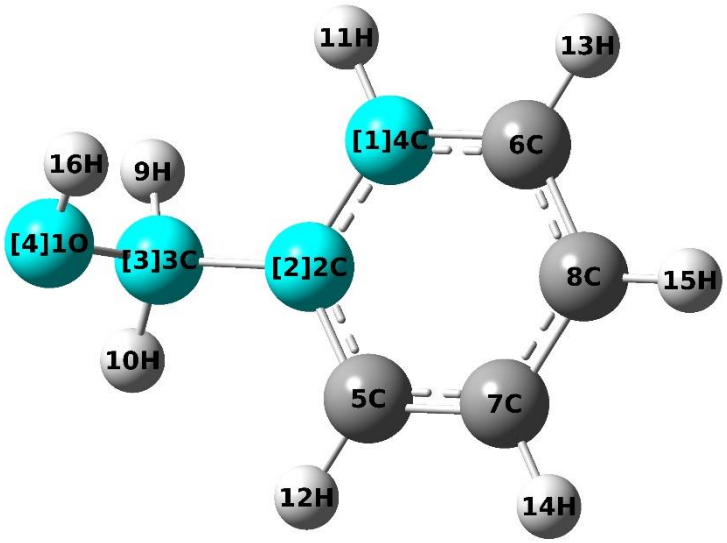

Рис. 1. Двугранный угол [1]4C-[2]2C-[3]3C-[4]1O модели

Зависимость полной энергии молекулы от двугранного угла (рис. 1) показана на рисунке 2.

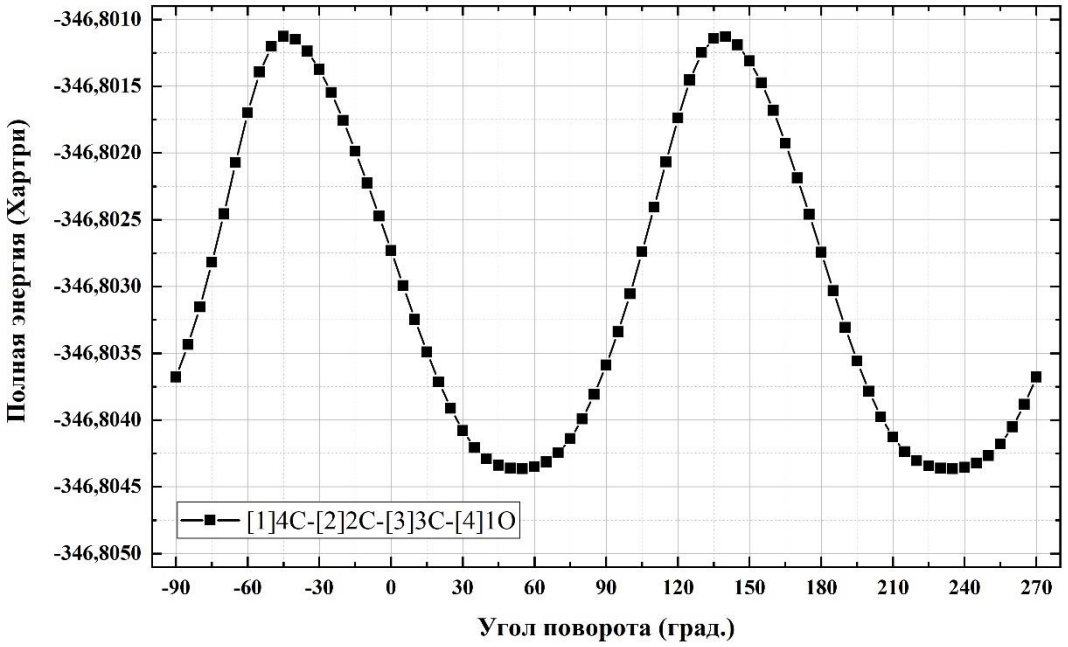

Рис. 2. Зависимость энергии молекулы от угла цепи замещения

Из рисунка 2 видно, что минимумы энергии достигаются в двух случаях: при углах приблизительно 60° и 240°. Приняв за новые опорные модели состояния с минимальной энергией цепи замещения получены аналогичные зависимости для гидроксогруппы.

Изменяющиеся двугранные углы [1]2C-[2]3C-[3]1O-[4]16H в моделях выделены на рисунке 3. Соответствующие зависимости приведены на рисунках 4 и 5.

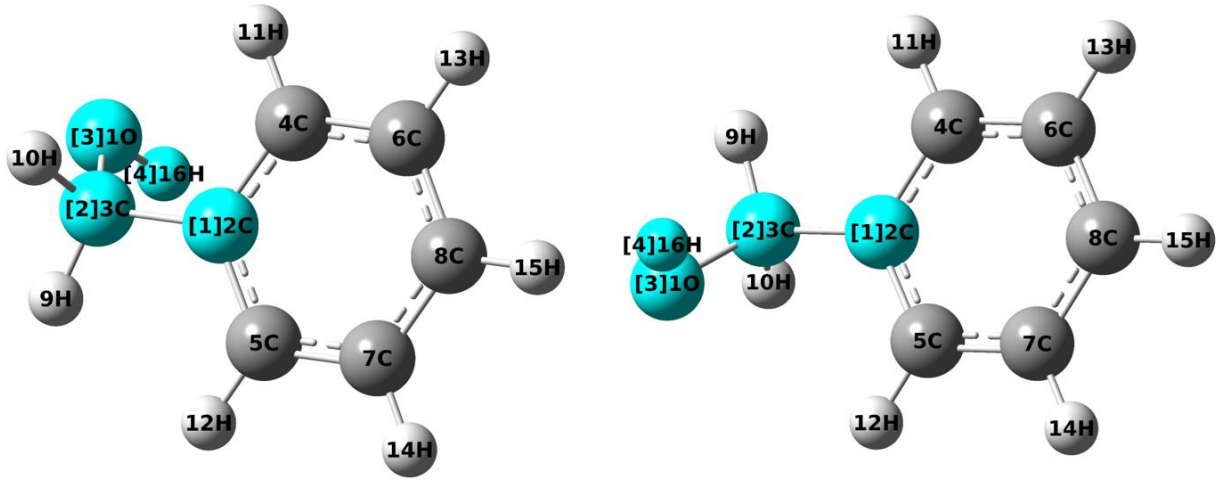

Рис. 3. Двугранный угол [1]2C-[2]3C-[3]1O-[4]16H модели:
(а) – для минимума при 60°; (б) – для минимума при 240°

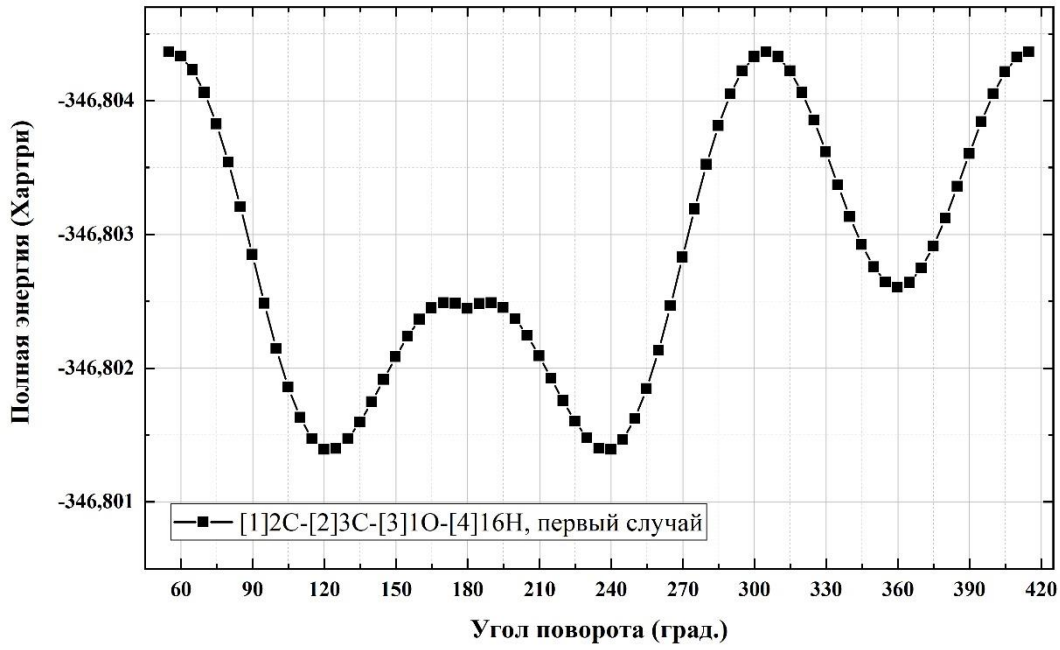

Рис. 4. Зависимость энергии молекулы от угла [1]2C-[2]3C-[3]1O-[4]16H в первом случае

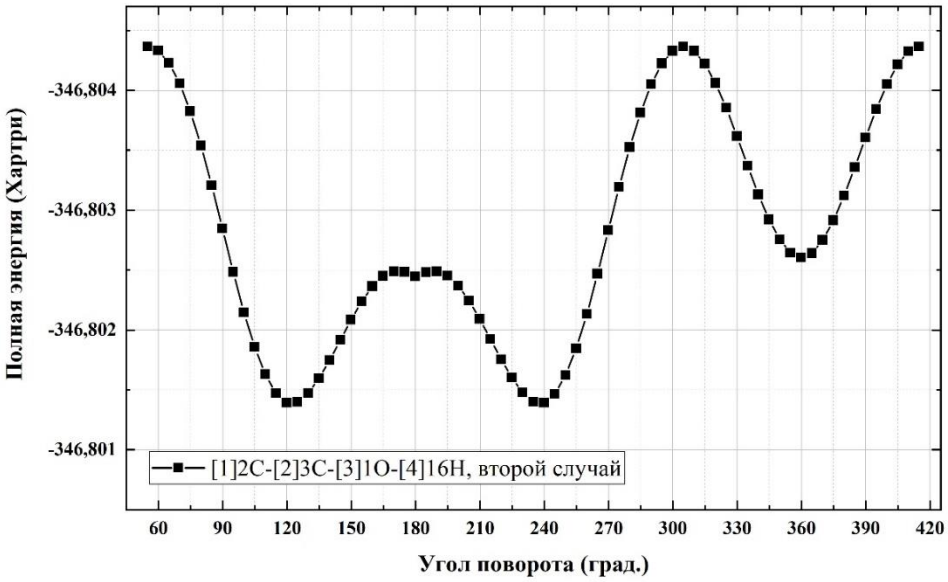

Рис. 5. Зависимость энергии молекулы от угла [1]2C-[2]3C-[3]1O-[4]16H во втором случае

Из рисунков 5 и 6 можно заметить полную идентичность зависимостей, что говорит о равносильности расположения гидроксильной как под углом 120°, так и под углом 240° (под углом 360° достигается не интересующий нас локальный минимум). Следовательно, несмотря на наличие суммарно четырёх глобальных минимумов у молекулы бензилового спирта имеется только один конформер, поскольку эти минимумы имеют одинаковое значение энергии. Все четыре конформации идентичны и представляют собой один конформер, изображение структурно-динамической модели которой приведено на рисунке 6.

Теоретический ИК-спектр

Спектроскопическое исследование полученной модели конформера молекулы бензилового спирта заключается в сравнительном анализе теоретического и экспериментального ИК-спектров данного соединения с целью интерпретации спектра и подтверждения гипотезы о существовании одного единственного конформера молекулы. Теоретический ИК-спектр, приведённый на рисунке 7, был получен исходя из вычислений фундаментальных частот колебаний модели молекулы согласно той же квантовой модели, что и ранее.

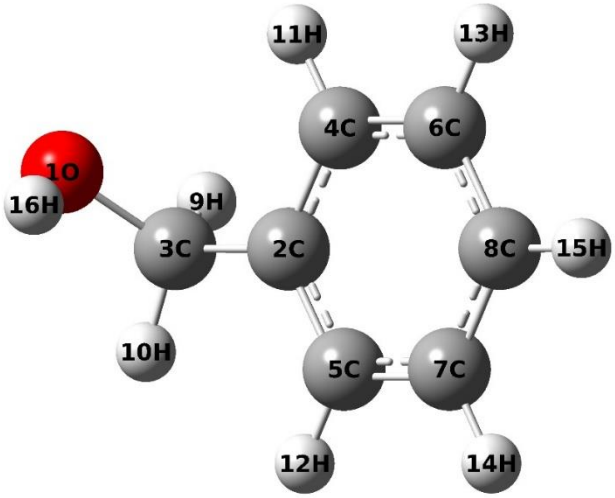

Рис. 6. Структурно-динамическая модель конформера молекулы бензилового спирта

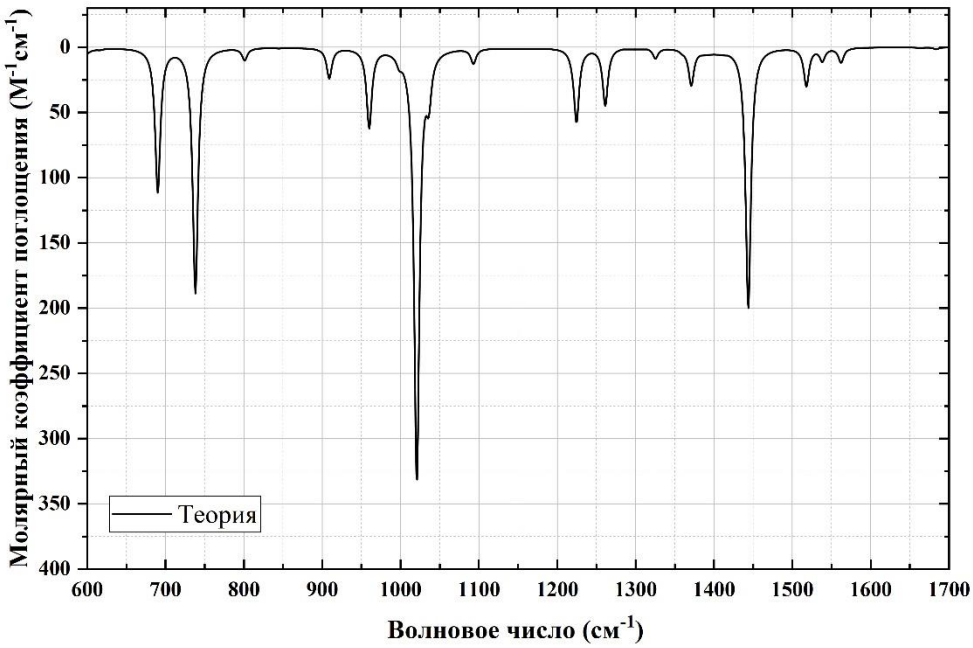

Рис. 7. Теоретический ИК-спектр молекулы бензилового спирта

Экспериментальный ИК-спектр

Экспериментальный ИК-спектр бензилового спирта получен на ИК-Фурье-спектрометре модели «Perkin Elmer» фирмы «Frontier» в диапазоне отпечатков пальцев (600…1700 $см^{-1}$). Данный спектр приведён на рисунке 8.

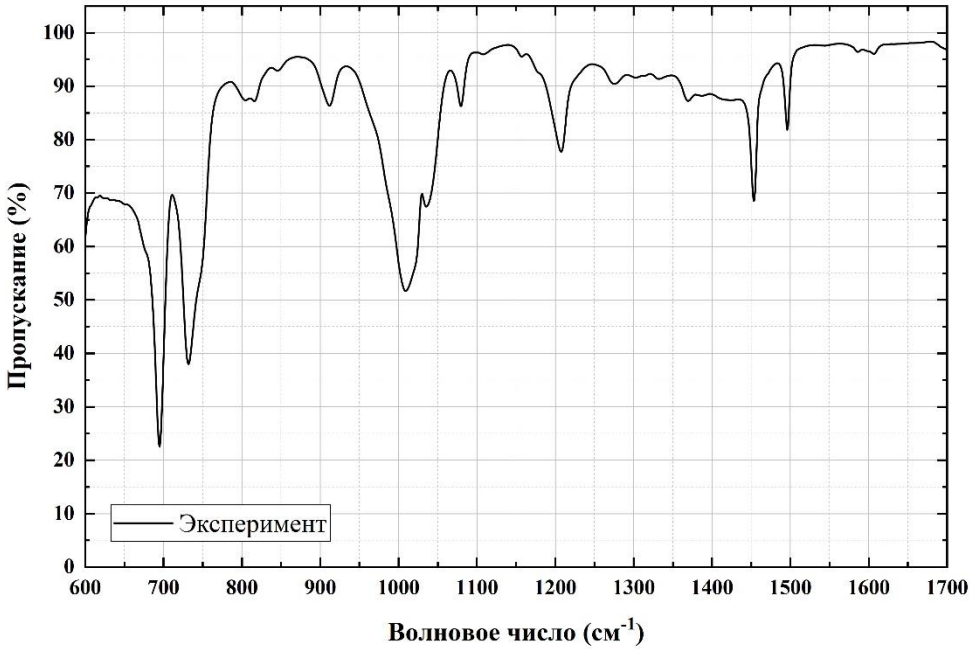

Рис. 8. Экспериментальный ИК-спектр бензилового спирта.

Сопоставление теоретического и экспериментального ИК-спектров осуществлено на рисунке 9. Из которого можно заметить, что практически все полосы сопоставляемых спектров совпали, средняя абсолютная погрешность составляет 9,4 $см^{-1}$. Уширение полос на экспериментальном спектре объясняется наличием вращательного движения молекул, а также межмолекулярных водородных связей. Совпадение полос говорит о достоверности рассчитанного теоретического спектра, а значит и о верности гипотезы о суще-

ствовании одной единственной конформации молекулы бензилового спирта.

Интерпретация ИК-спектра бензилового спирта с указанием типа молекулярных колебаний, вызывающих поглощение ИК-излучения, представлена в таблице.

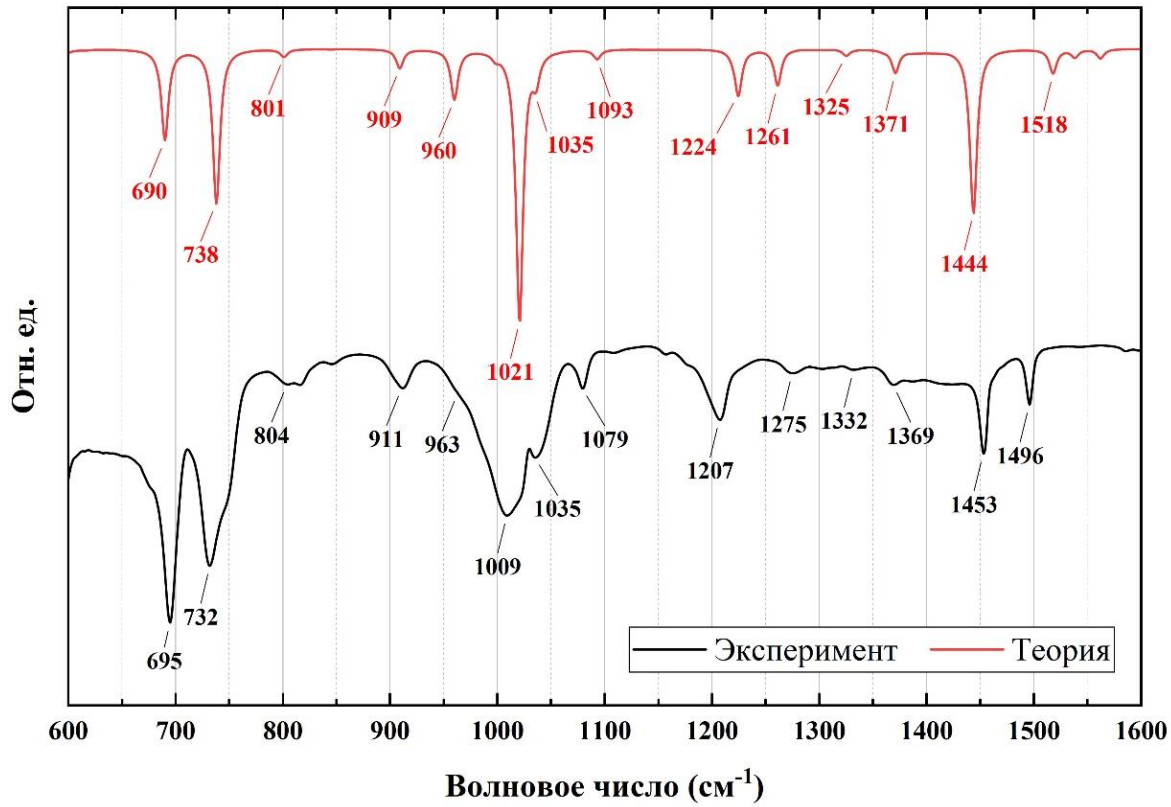

Рис. 9. Сопоставление теоретического и экспериментального спектров

Таблица. Интерпретация ИК-спектра бензилового спирта

№	Теория, $см^{-1}$	Эксперимент, $см^{-1}$	Локализация	Тип колебаний
1	690	695	11H, 12H, 15H	деформационные (деф.) веерные симметричные
2	738	732	13H, 14H, 15H	деф. веерные симметричные
3	801	804	бензольное кольцо	дыхательные
4	909	911	11H, 12H, 15H	деф. веерные асимметричные
5	960	969	9H, 10H	деф. маятниковые
			16H	деф. резонируют симметрично 10H
6	1021	1009	3C-1O	валентные
7	1035	1035	11H, 12H, 13H, 14H	деф. ножничные симметричные
8	1093	1079	11H, 12H, 15H	деф. ножничные асимметричные
9	1224	1207	9H, 10H	деф. крутильные
			16H	деф. резонируют симметрично 9H
10	1261	1275	9H, 10H	деф. веерные
			12H, 13H, 14H	деф. маятниковые симметричные
11	1325	1332	9H, 10H	деф. веерные
			16H	деф. резонируют симметрично 10H
12	1371	1369	9H, 10H	деф. крутильные
			16H	деф. резонируют симметрично 10H
13	1444	1453	9H, 10H	деф. веерные
			16H	деф. резонируют асимметрично
14	1518	1496	13H, 14H, 15H	деф. маятниковые симметричные

Заключение

В ходе исследований обнаружено, что существует один конформер молекулы бензилового спирта. Определена его структура, которая подтверждена спектроскопически, совпадением полос теоретического ИК-спектра модели изучаемой молекулы и экспериментального ИК-спектра бензилового спирта, которому дана интерпретация.

Полученные результаты будут полезны при выявлении фальсификата парфюмерной продукции методами ИК-спектроскопии, так как теоретический ИК-спектр модели молекулы бензилового спирта может служить эталонным при попытках его обнаружения в составе исследуемого образца.

Библиографический список

1. Филатова В.В. и др. Фальсификация парфюмерно-косметической продукции // Государство и право: проблемы и перспективы совершенствования. – 2022. – С. 298-303.

2. Неймышева М.А. Газохроматографическое определение диэтифталата в парфюмерии // Наука молодых. – 2023. – С. 201-205.

3. Шугаипова Л.Р. и др. Оценка летучих соединений цветков различных видов каштана // Проблемы региональной экологии. – 2024. – № 5. – С. 5-13.

4. Слободскова А.А. и др. ИК-спектроскопия одна из новейших методов физических исследований пищевых продуктов // Качество в производственных и социально-экономических системах. – 2022. – С. 347-350.

5. Бабков Л.М. ИК спектры и структурно-динамические ангармонические модели циклогексанола // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. – 2025. – Т. 25. – № 1. – С. 24-36.

6. Алиев, П.Н. Взаимосвязь химической структуры и ИК спектров олеиновой кислоты // Перспектива: Сборник научных статей – Астрахань: ФГБОУ ВО «АГУ имени В.Н. Татищева», 2023. – С. 10-14.

7. Беспалов Д.В. и др. Сравнение методов MP2 и DFT для расчета структуры и ИК-спектров на примере соединений магния с аминокислотами // Вестник Новгородского государственного университета им. Ярослава Мудрого. – 2024. – № 3 (137). – С. 416-424.

8. Rabichi I. et al. Experimental and theoretical investigation of olive mill solid waste biochar for vanillic acid adsorption using DFT/B3LYP analysis // Water, Air, & Soil Pollution. – 2024. – Т. 235. – № 6. – С. 369.

9. Степанович, Е.Ю. и др. Вычисление и исследование инфракрасных спектров сахарозы // Эпоха науки. – 2024. – № 40. – С. 30-35. – DOI 10.24412/2409-3203-2024-40-30-35.

10. Chan B. Optimal small basis set and geometric counterpoise correction for DFT computations // Journal of Chemical Theory and Computation. – 2023. – Т. 19. – № 13. – С. 3958-3965.

11. Исмаилов С.А. Обсуждение общей формулы аренов // Проблемы науки. – 2024. – № 3 (84). – С. 8-10.

12. Frisch M.J., Trucks Gary, Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman James, Scalmani Giovanni, Barone Vincenzo, Mennucci Benedetta, Petersson G.A., Nakatsuji H., Caricato Marco, Li X., Hratchian H.P., Izmaylov A.F., Bloino Julien, Zheng Guishan, Sonnenberg Jason, Hada Masahiko, Fox Douglas. (2009). Gaussian 09 Revision A.1. Gaussian Inc.

SPECTROSCOPIC STUDY OF THE CONFORMER OF THE BENZYL ALCOHOL MOLECULE

P.N. Aliyev, *Student*
Astrakhan State University named after V.N. Tatishchev
(Russia, Astrakhan)

Abstract. *The geometric structure of the conformer of the benzyl alcohol molecule is revealed in the article by changing the position of the methylene and hydroxyl groups and finding the state corresponding to the global minimum of total energy. The reliability of the obtained structure is confirmed by a comparative analysis of the theoretical IR spectrum obtained using the density functional method and the experimental IR spectrum. The IR spectrum of benzyl alcohol is interpreted by comparing the absorption band in the experimental spectrum and the vibration of the atoms of the molecule model, which causes the absorption of the IR spectrum at a given wavenumber.*

Keywords: *benzyl alcohol, benzyl alcohol conformer, IR spectrum, IR spectroscopy, DFT.*