

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ИНФРАКРАСНОГО СПЕКТРА ГАММА-УНДЕКАЛАКТОНА КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИМ МОДЕЛИРОВАНИЕМ

П.Н. Алиев, студент

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

DOI:10.24412/2500-1000-2026-3-2-210-216

**Аннотация.** В последние годы в связи с ростом промышленных оборотов в области парфюмерно-косметической продукции пропорционально растёт и количество сфальсифицированной продукции. Методы колебательной спектроскопии позволяют определить наличие того или иного вещества в составе исследуемого соединения. Таким образом, можно достоверно определить, содержится ли заявленный производителем парфюмерный ингредиент в продукции или он заменён на некачественный аналог. Объектом исследования в данной работе является гамма-ундекалактон (альдегид C14) – вещество, которое в разбавленном состоянии имеет персиковый запах. В работе приведены результаты конформационного анализа молекулы гамма-ундекалактона, его теоретический ИК-спектр, рассчитанный методом DFT/B3LYP/6-31G(d), с интерпретацией наиболее интенсивных полос, а также экспериментальный ИК-спектр. Сравнительный анализ экспериментального и теоретического ИК-спектров подтверждает достоверность выполненных в работе расчётов.

**Ключевые слова:** гамма-ундекалактон; альдегид C14; ИК-спектр; DFT; молекулярное моделирование; квантовая механика; фальсификация парфюмерии.

*Ab initio* квантово-механические вычисления в области молекулярного моделирования применительно к колебательной спектроскопии являются мощным инструментом предсказания ИК-спектров исследуемой молекулы [1-3]. Так, например, сопоставлением теоретического спектра молекулы и экспериментального спектра образца можно убедиться в правильности построенной модели и корректности выполненного конформационного анализа, что может быть полезным для понимания процесса протекания химических реакций с участием данной молекулы [4, 5].

Проведение конформационного анализа требует наличия нескольких структурно-динамических моделей с оптимизированной геометрией, по значениям энергий которых можно судить об относительной населённости конформеров в равновесном состоянии согласно статистике Больцмана [6]. Для построения данных моделей необходимо осуществить оптимизацию при различном положении функциональных групп молекулы в пространстве [7]. Далее путём усреднения ИК-спектров всех выявленных конформеров с учётом их населённости возможно получение теоретического ИК-спектра.

Отличительными особенностями ИК-спектроскопии являются неразрушающий анализ, высокая точность и скорость измерений, возможность работы с малым количеством образца, а также отсутствие необходимости его предварительной подготовки [8]. В совокупности перечисленные достоинства делают ИК-спектроскопию незаменимым инструментом при необходимости быстрой, но в то же время точной идентификации определённого вещества в составе множества различных образцов.

Объектом исследования является гамма-ундекалактон (альдегид C14) – вещество, которое активно применяется в парфюмерии благодаря наличию у него сладкого персикового аромата даже в сильно разбавленных растворах [9].

**Цель** данного исследования – определение структуры конформеров молекулы гамма-ундекалактона.

**Задачи**, необходимые для достижения цели:

1) построение моделей конформеров гамма-ундекалактона на основе его химической структуры с дальнейшей оптимизацией геометрии;

2) вычисление теоретического ИК-спектра молекулы с учётом населённости конформеров с дальнейшей интерпретации спектра;

3) проведение эксперимента по получению ИК-спектра гамма-ундекалактона и сравнительный анализ с теоретическим ИК-спектром.

### Конформационный анализ

Химическая структура молекулы гамма-ундекалактона представлена на рисунке 1. Характерной чертой лактонов является наличие гетероцикла, содержащего атом кислорода, а также карбонильной группы C=O в положении у кольца. У исследуемой молекулы в цикле имеется пять звеньев, а также замещение в виде насыщенной цепи углевода из 7 звеньев.

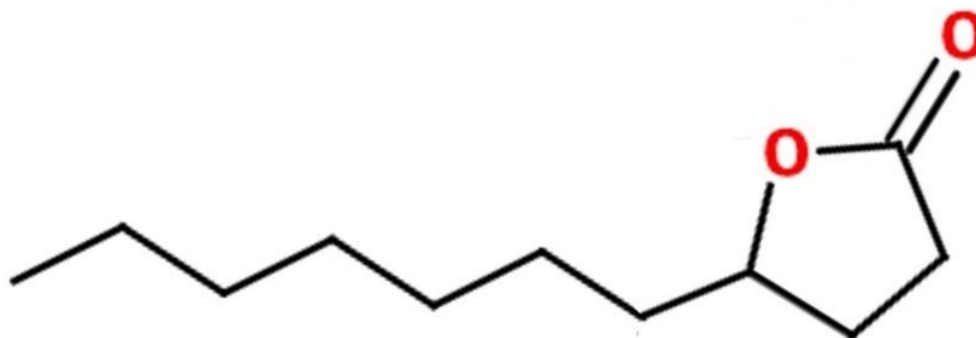


Рис. 1. Химическая структура гамма-ундекалактона

На базе данной структуры построен исходный конформер исследуемой молекулы. Далее с использованием ПО «GAUSSIAN» [10] получена зависимость энергии модели от двугранного угла, расположенного на стыке цикла и углеводородной цепи в ходе сканирования данного угла методом функционала плот-

ности с использованием гибридного функционала B3LYP в базе атомных орбиталей 6-31G(d). Данный угол является первым по счёту от кольца к концу цепи. На рисунке 2 показана модель молекулы и выделен упомянутый угол.

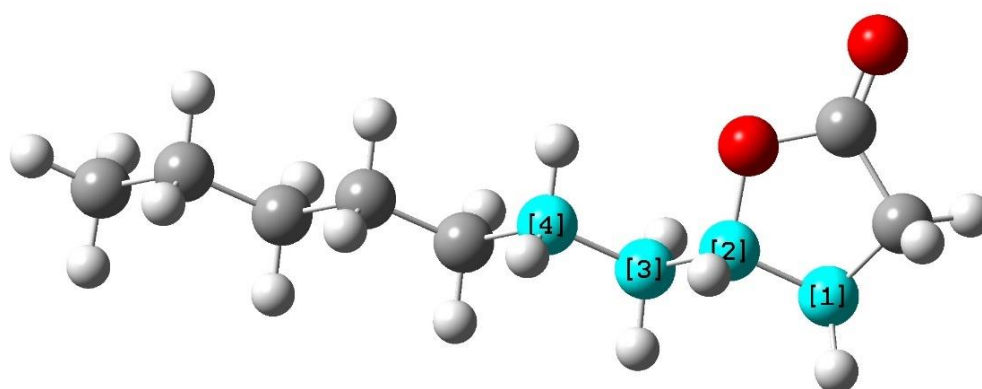


Рис. 1. Модель первичного конформера молекулы гамма-ундекалактона. Голубым цветом выделены атомы, образующие первый двугранный угол

На рисунке 3 приведён график данной зависимости. По оси абсцисс отложена величина первого двугранного угла в градусах с шагом в  $5^\circ$ , по оси ординат – разница энергий конформации с указанным углом и конфор-

мации с минимально полученной энергией. Из графика видно, что минимумы энергий достигаются при углах, равных приблизительно  $-180^\circ$  ( $\equiv 180^\circ$ ),  $-60^\circ$ ,  $60^\circ$ .

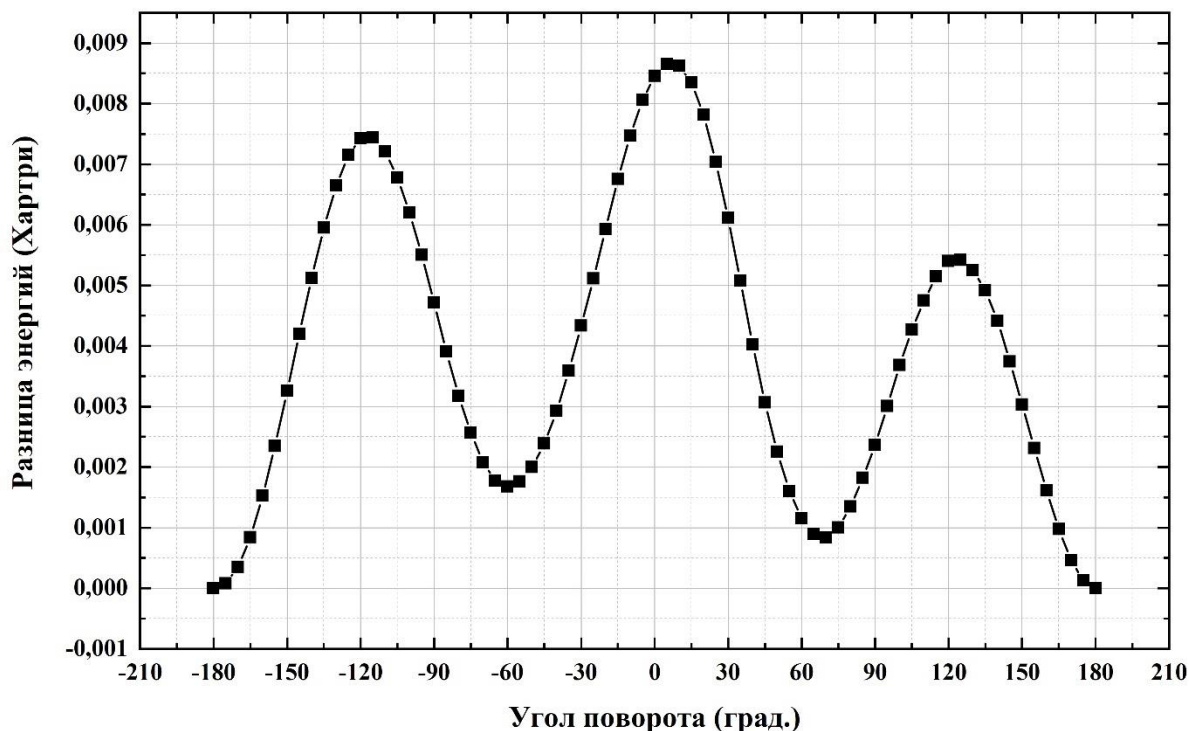


Рис. 3. График зависимости разницы энергий от первого двугранного угла

Конформации с данными углами были взяты за основу для сканирования второго угла, расположенного далее вдоль цепи. Зависимости энергии конформации от данных углов оказались близкими к приведённым на рисунке 3.

Таким образом, получено множество конформаций, из которых отобраны десять конформеров, обладающих наименьшей энергией. В таблице 1 приведены результаты конформационного анализа, проведённого по статистике Больцмана. На рисунке 4 – изображения моделей данных конформеров.

Таблица 1. Конформационный анализ молекулы гамма-ундекалактона

№	$E$ , Хартри	$\Delta E$ , Хартри	$k$	$n$ , %
1	-581,69591359	0,00000000	1,00000000	29,40
2	-581,69508180	0,00083183	0,41662547	12,25
3	-581,69467530	0,00123833	0,27159552	7,98
4	-581,69463625	0,00127734	0,26066935	7,66
5	-581,69457940	0,00133424	0,24551571	7,22
6	-581,69457340	0,00134017	0,24398802	7,17
7	-581,69457057	0,00134302	0,24325719	7,15
8	-581,69456990	0,00134373	0,24307547	7,15
9	-581,69456486	0,00134873	0,24179954	7,11
10	-581,69453801	0,00137558	0,23506152	6,91

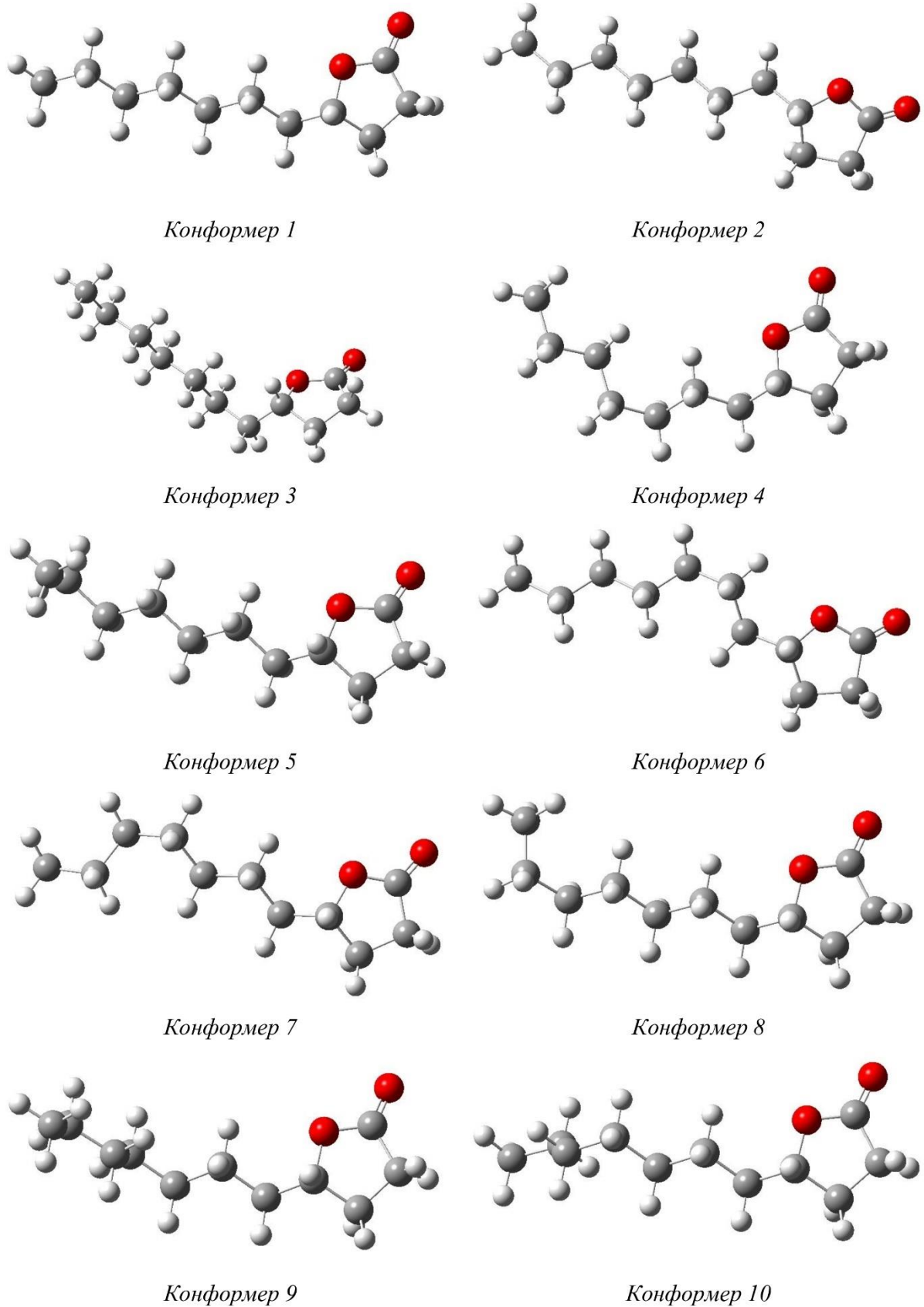


Рис. 4. Изображения структурно-динамических моделей конформеров молекулы гамма-ундекалактона

В таблице 1 приведены номера конформеров, из энергии, разница энергий между данным и минимальным значением, константа равновесия при температуре 300 К, а также относительная населённость конформеров, выраженная в процентах.

### Теоретический и экспериментальный ИК-спектры

Теоретический ИК-спектр каждого выявленного конформера рассчитан ранее применённым квантовым методом DFT/B3LYP/6-31G(d) в диапазоне «отпечатков пальцев» - 600...2000  $\text{см}^{-1}$ . К рассчитанным спектрам применён наиболее подходящий для выбранного базиса коэффициент масштабирования 0,9614 с использованием ПО «Multiwfn» [11]. Далее спектры были просуммированы с учётом относительной населённости каждого конформера, и, таким образом, получен теоретический ИК-спектр молекулы гамма-ундекалактона.

Эксперимент по получению ИК-спектра чистого (ЧДА) гамма-ундекалактона проведён

на ИК-Фурье-Спектрометре Frontier (PerkinElmer) на приставке НПВО в режиме 32 scan в диапазоне 600...2000  $\text{см}^{-1}$ .

Сопоставление теоретического и экспериментального спектров с указанием частот выявленных полос приведено на рисунке 4. Можно заметить, что большинство полос теоретического и экспериментального спектров совпало с высокой точностью, что говорит о достоверности рассчитанного спектра и, как следствие, ранее выполненного конформационного анализа и определения структуры конформеров гамма-ундекалактона.

В таблице 2 дана интерпретация наиболее интенсивным полосам спектров в гармоническом приближении колебаний функциональных групп и отдельных атомов моделей. Интерпретация полезна для изучения путей и типов химических реакций с участием гамма-ундекалактона при непрерывном анализе ИК-спектра реагентов с целью выявления изменения интенсивности тех или иных идентификационных полос.

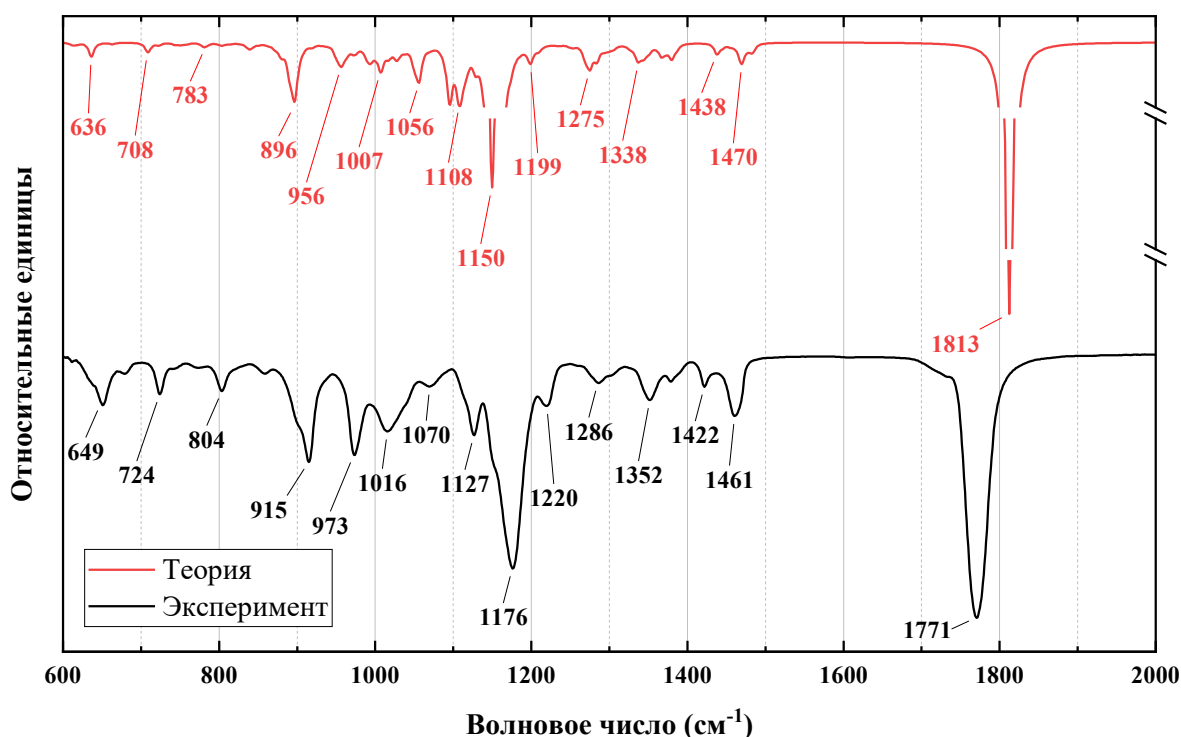


Рис. 5. Сопоставление теоретического и экспериментального ИК-спектров гамма-ундекалактона

Таблица 2. Интерпретация наиболее интенсивных полос ИК-спектра гамма-ундекалактона. Деф. – деформационные, вал. – валентные.

№	Теория, см <sup>-1</sup>	Эксперимент, см <sup>-1</sup>	Локализация колебаний	Тип колебаний
1	896	915	Цикл	Деф. С–О–С
2	1056	1070	Цикл	Вал. С–О
3	1108	1127	Цепь	Деф. крутильные Н
4	1150	1176	Цикл	Вал. С–О
5	1813	1771	Цикл	Вал. С=О

### Заключение

В работе определена структура конформеров молекулы гамма-ундекалактона (альдегида С14) путём построения и оптимизации моделей данных конформеров. Достоверность расчётов подтверждается совпадением большинства полос теоретического ИК-спектра, рассчитанного методом DFT/B3LYP/6-31G(d) с учётом населённости конформеров, и экспериментального ИК-спектра ЧДА гамма-

ундекалактона. Дана интерпретация наиболее сильным полосам спектров.

Результаты, полученные в данной работе, будут полезны в парфюмерно-косметической промышленности для обнаружения гамма-ундекалактона в исследуемом образце в целях предупреждения фальсификации продукции, а также в аналитической химии для изучения реакций с участием гамма-ундекалактона в режиме спектрального анализа реагентов в реальном времени.

### Библиографический список

1. Демухамедова С.Д. Теоретическое квантово-химическое моделирование структуры и свойств дипептида карнозина методом DFT // Актуальные вопросы биологической физики и химии. – 2022. – Т. 7. – № 2. – С. 241.
2. Snyder R. et al. Facilitating ab initio QM/MM free energy simulations by Gaussian process regression with derivative observations // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2022. – Т. 24. – № 41. – С. 25134-25143.
3. Алиев П.Н. Квантово-механический расчёт молекулы коричной кислоты в ПО «GAUSSIAN» // Инновационные научные исследования. – 2023. – № 5-3. – С. 29.
4. Степанович Е.Ю. и др. Вычисление и исследование инфракрасных спектров сахарозы // Эпоха науки. – 2024. – № 40. – С. 30-35.
5. Крикунова Л.И., Порфирьев Д.П. Химические реакции некоторых нитрилов с метиновым радикалом в разреженных молекулярных облаках и атмосферах планет // Физика космоса: труды 50-й Международной студенческой научной конференции. – Екатеринбург: Изд-во Уральского университета, 2023. – С. 372-375.
6. Paredes-Sotelo E., Martinez-Guajardo G. Temperatures Computed by DFT and Statistical Thermodynamics // Density Functional Theory: Recent Advances, New Perspectives and Applications. – 2022. – С. 55.
7. Алиев П.Н. Использование методов ИК-спектроскопии для подтверждения структуры конформеров анисового альдегида // Международный журнал гуманитарных и естественных наук. – 2025. – № 9-2. – С. 68-74.
8. Красильникова С.В. Применение ИК-спектроскопического метода в анализе лекарственных веществ // Актуальные вопросы фармацевтических и естественных наук. – 2022. – С. 237-239.
9. Патент № 2764751 С2 Российская Федерация, МПК А61К 8/33, А61К 8/34, А61К 8/35. Новые ароматические композиции и продукты с улучшающими настроение эффектами: № 2019138460: заявл. 26.04.2018: опубл. 20.01.2022 / К.А. Пригг, К.К. Пансини, К.С. Дьюган, и др.; заявитель СИМРАЙЗ АГ, ДЖОНСОН ЭНД ДЖОНСОН КОНСЬЮМЕР ИНК.
10. Gaussian 09, Revision E.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, et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.
11. Lu T. A comprehensive electron wavefunction analysis toolbox for chemists, Multiwfn // The Journal of Chemical Physics. – 2024. – Т. 161. – № 8. – DOI: 10.1063/5.0216272.

---

## INVESTIGATION OF THE STRUCTURE AND INFRARED SPECTRUM OF GAMMA-UNDECALACTONE BY QUANTUM MECHANICAL MODELING

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

**Abstract.** *In recent years, due to the growing industrial turnover in the perfume and cosmetics industry, the number of counterfeit products has also increased proportionally. Vibrational spectroscopy methods make it possible to determine the presence of a particular substance in a given compound. This allows one to reliably determine whether the perfume ingredient declared by the manufacturer is present in the product or whether it has been replaced with a low-quality analogue. The object of study in this paper is gamma-undecalactone (aldehyde C14), a substance that has a peach-like scent when diluted. This paper presents the results of a conformational analysis of the gamma-undecalactone molecule, its theoretical IR spectrum calculated using the DFT/B3LYP/6-31G(d) method, with an interpretation of the most intense bands, and an experimental IR spectrum. A comparative analysis of the experimental and theoretical IR spectra confirms the accuracy of the calculations performed in this paper.*

**Keywords:** *gamma-undecalactone; C14 aldehyde; IR spectrum; DFT; molecular modeling; quantum mechanics; perfume counterfeiting.*