

КОЛИВАЛЬНИЙ СПЕКТР *p*-АМІЛОКСІБЕНЗИЛІДЕН-*p*-ТОЛУІДІНУ В КРИСТАЛІЧНІЙ ФАЗІ

В.Є. ПОГОРЕЛОВ, В.П. БУКАЛО, Ю.М. ЖОВТОВРЮХ

УДК 539.194
© 2011Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, фізичний факультет
(Просп. Академіка Глушкова, 2, Київ 03022; e-mail: pvyel@ukr.net)

У роботі виконано аналіз коливального раманівського спектра рідкого кристала *p*-амілоксібензиліден-*p*-толуїдину (АБТ). Спектр КРС було зареєстровано в інтервалі 0–1650 см⁻¹ за кімнатної температури $T = 293$ К, коли АБТ перебуває у кристалічній фазі. Проведено квантово-хімічне комп'ютерне моделювання геометрії та розрахунок теоретичних коливальних частот молекули АБТ методом V3LYP/6-31G(*d,p*). На основі результатів комп'ютерного моделювання виконано інтерпретацію експериментального спектра КРС, отримано конформаційні параметри молекули для кристалічного стану.

аніліни належать до широкого класу об'єктів, здатних утворювати рідкокристалічну фазу. Найбільш поширеними представниками цієї групи хімічних речовин є бензиліден-анілін (БА), *p*-амілоксібензиліден-*p*-толуїдин (АБТ), бензиліден-толуїдин (БТ), *N*-(*n*-метоксибензиліден)-*n*-бутиланілін (МББА), *N*-(*p*-етоксібензиліден)-*p*-бутиланілін (ЕББА). Основною складовою їх молекул є бензиліден-анілінове (БА) ядро: $-C_6H_4-CH=N-C_6H_4-$, геометричну будову якого зображено на рис. 1.

Вказані молекули відрізняються лише радикалами по обидва боки ядра. Хімічну будову деяких бензиліден-анілінів подано у табл. 1.

Слід відзначити, що для таких представників ряду, як МББА, ЕББА, в літературі накопичені майже вичерпні експериментальні дані щодо їх структури, фазового поліморфізму, спектральних властивостей [1–5]. У той час як для інших речовин, наприклад АБТ, такі дані майже відсутні або зустрічаються вкрай рідко. Зокрема, для АБТ відсутні дані щодо молекулярних конформацій у різних фазових станах, однозначна інтерпретація коливального спектра молекули АБТ. Одним із найбільш інформативних методів дослідження як внутрішньомолекулярної структури, так і властивостей зовнішньомолекулярного оточення є коливальна спектроскопія, зокрема спектроскопія КРС. Взаємозв'язок спектр–структура, а також кореляція між структурними змінами під час фазових перетворень та відповідними трансформаціями коливальних спектрів широко висвітлювалися в літературі останніх років для багатьох типів рідкокриста-

1. Вступ

Насьогодні рідки кристали досить широко використовують у промисловості. Насамперед для виготовлення моніторів персональних комп'ютерів, телевізійних приймачів та інших засобів відображення інформації. Це є причиною пошуку зі синтезування нових рідкокристалічних речовин і, відповідно, встановлення молекулярних механізмів макроскопічних властивостей мезогенів та їх змін. Знання внутрішньомолекулярних процесів і розуміння їх природи дозволить ґрунтовно підійти до моделювання рідкокристалічних речовин з наперед заданими властивостями. Протягом останнього часу було синтезовано велику кількість рідкокристалічних речовин, найбільш вивченими з яких є речовини з бензиліден-аніліновим ядром. Бензиліден-

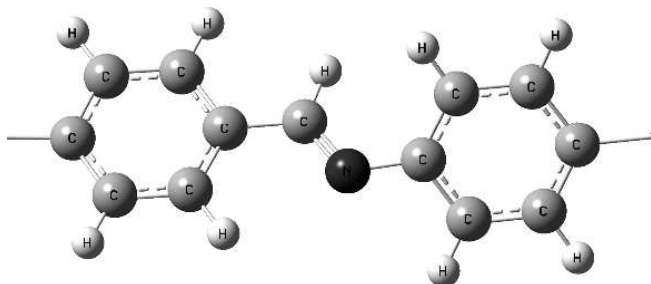


Рис. 1. Геометрична будова бензиліден-анілінового ядра

Т а б л и ц я 1. Хімічна будова деяких бензиліден-анілінів

Назва	Хімічна будова
БА	$H-C_6H_4-CH=N-C_6H_4-H$
АБТ	$NH_2-O-C_6H_4-CH=N-C_6H_4-CH_3$
БТ	$H-C_6H_4-CH=N-C_6H_4-CH_3$
МББА	$CH_3-O-C_6H_4-CH=N-C_6H_4-C_4H_9$
ЕББА	$C_2H_5-O-C_6H_4-CH=N-C_6H_4-C_4H_9$

лічних сполук (5СВ, МББА) [6–9]. Коливальна спектроскопія може бути корисною для визначення молекулярних конформацій у різних фазових станах та параметрів порядку, отримання інформації про особливості міжмолекулярної взаємодії та динаміки [10–12]. Тому у даній роботі було зроблено спробу проаналізувати коливальний спектр КРС АБТ з використанням можливостей комп'ютерного моделювання, виконати інтерпретацію коливальних частот, визначити конформаційні параметри геометрії молекули АБТ у кристалічній фазі.

2. Експеримент

У роботі використано автоматизований спектрально-обчислювальний комплекс на базі подвійного монохроматора ДФС-24. Як джерело збуджуючого комбінаційне розсіяння світла використовували аргонний лазер з довжиною хвилі випромінювання 514,5 нм. Потужність збуджуючого випромінювання становила 50–100 мВт. Така потужність не приводила до суттєвого нагрівання зразка під час реєстрації спектрів КРС та до зміни його фізичних властивостей. Розсіяне світло спостерігали під кутом 90° відносно напрямку падаючого лазерного променя. Коливальний спектр було записано при ширинах вихідної та входної щілин, що не перевищували 100 мкм. За таких щілин ширина апаратної функції монохроматора не перевищувала 2 см⁻¹. Коливальний спектр АБТ зареєстровано за температури 293 К, коли АБТ перебуває у кристалічному стані. Перехід кристал – нематик в АБТ спостерігається за температури 333 К.

3. Комп'ютерне моделювання

Комп'ютерне моделювання виконували за допомогою програмного пакета “Gaussian-03” [13]. У процесі моделювання використовували модель ізольованої молекули, так що ефекти впливу оточуючого середовища не розглядалися. На першому етапі виконували оптимізацію геометрії молекули АБТ, тобто відбувався пошук стійкого мінімуму на поверхні потенціальної енергії. Оптимізацію геометрії виконували методом теорії функціонала густини DFT з використанням обмінно-кореляційного функціонала V3LYP та базису 6-31G(*d,p*). Базисний набір 6-31G(*d,p*) використовує одну додаткову дифузну *d*-функцію для опису важких атомів, та додаткову поляризаційну *p*-функцію для атома водню Н. Використання *d*-функцій дозволяє краще описувати взаємодію атомів, системи з достатньо великим негативним зарядом та

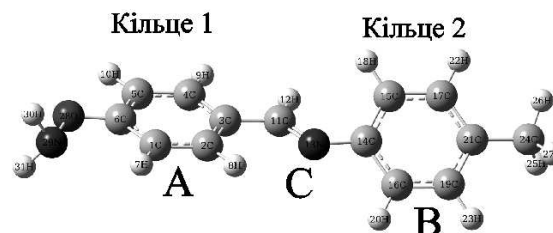


Рис. 2. Оптимізована геометрія молекули АБТ, отримана при комп'ютерному моделюванні методом DFT V3LYP/6-31G(*d,p*)

атоми з вільними парами електронів. Оптимізовану геометрію молекули АБТ показано на рис. 2.

Для оптимізованої геометрії було обчислено власні коливальні частоти, нормальні моди коливань та модельний коливальний спектр КР. Частотний аналіз виконували на тому самому рівні теорії і з тим же набором базисних функцій, що й оптимізація геометрії. Отримані виключно додатні значення коливальних частот підтвердили, що знайдена геометрія дійсно відповідає мінімуму на поверхні потенціальної енергії молекули [13]. Зазвичай отримані в гармонічному наближенні модельні коливальні частоти є завищеними у порівнянні з експериментальними. Тому для більш точного частотного збігу експериментального спектра та модельного останній масштабують на певний масштабний множник. У літературі для кожного методу з певним базисним набором існують свої масштабні множники. Відповідно до [13] для V3LYP/6-31G(*d,p*) отриманий спектр АБТ масштабували множником 0,9613. Інтерпретація коливальних частот виконано за допомогою програмного пакета GausView 4,01 [14]. Пакет GausView 4,01 дозволяє візуалізувати молекулярні коливання, що відповідають кожній коливальній частоті, й, відповідно, визначати тип цих коливань.

4. Аналіз коливального спектра АБТ

Експериментальний та модельний спектри, що отримано для оптимізованої геометрії молекули АБТ методом V3LYP/6-31g(*d,p*), показано на рис. 3. Детальне порівняння коливальних частот для спектра комбінаційного розсіяння АБТ в інтервалі 0–1650 см⁻¹ з відповідними коливальними модами, а також порівняння з отриманими модельними частотами раман-спектра показано в табл. 2. У таблиці використано такі позначення: ν – позначає валентні коливання, δ – деформаційні коливання, ω – крутильні коливання. Неплоске деформаційне δ -коливання позначає такий тип коливання, за якого відбувається зміна валентно-

Т а б л и ц я 2. Інтерпретація коливальних частот молекули АБТ в кристалічному стані

Експеримент, см^{-1}	Модель, см^{-1}	Інтерпретація
820	804,6	Неплоске δ -коливання кілець 1 і 2
961,2	980	Неплоске $\delta(\text{C}_3\text{-C}_{11}\text{-N}_{13})+\omega(\text{H}_{12},\text{H}_8,\text{H}_9)$
1065	1080,5	Дихаюча мода кілець 1 і 2 + $\omega(\text{H}_9,\text{H}_{10},\text{H}_7,\text{H}_8)$
1126,3	1145	$\nu(\text{C-C})$ коливання кілець 2 + дихаюча мода кілець 1
1154	1174,9	$\delta(\text{C-H})$ кілець 1 і 2 + $\nu(\text{C}_{14}=\text{N}) + \nu(\text{C}_3\text{-C}_{14})$
1211,4	1238	Плоске деформаційне коливання кілець 2 + $\nu(\text{C}_6\text{-O}_{28})+\omega(\text{H}_{30},\text{H}_{31})$
1243,2	1275	$\nu(\text{C-C})$ кілець 1 + $\omega(\text{H}_{23},\text{H}_{20},\text{H}_{22},\text{H}_{18},\text{H}_8,\text{H}_7,\text{H}_9,\text{H}_{10})$
1280,5	1304,5	Несиметричне $\nu(\text{C-C})$ кілець 2 + $\nu(\text{C}_3\text{-C}_{11})+\nu(\text{C}_5\text{-O}_{28}) + \omega(\text{H}_{12})$
1348	1362	$\nu(\text{C}_{24}\text{-C}_{21})+\omega(\text{H}_{25},\text{H}_{26}, \text{H}_{27})$
1404,5	1401,8	$\nu(\text{C}_{14}=\text{N}_{13}) +$ несиметричне $\delta(\text{C-H})$ кілець 2
1491	1476	Несиметричне $\nu(\text{C-C})$ кілець 1 і 2
1566,7	1554,1	$\nu(\text{C}_{14}=\text{N}_{13}) +$ несиметричне $\nu(\text{C-C})$ кілець 2 + $\delta(\text{H-N}_{29}\text{-H})$
1591,7	1575,6	$\nu(\text{C-C})$ кілець 1 і 2 + $\nu(\text{C}_{14}=\text{N}_{13})+\nu(\text{C}_{11}+\text{C}_3) + \delta(\text{H-N}_{29}\text{-H})$
1605,6	1589,3	$\nu(\text{C-C})$ кілець 1 і 2 + $\nu(\text{C}_{14}=\text{N}_{13})+\nu(\text{N}_{13}+\text{C}_{11}) + \delta(\text{H-N}_{29}\text{-H})$
1620,7	1629,4	$\nu(\text{C}_{14}=\text{N}_{13}) + \nu(\text{C-C})$ кілець 1 і 2

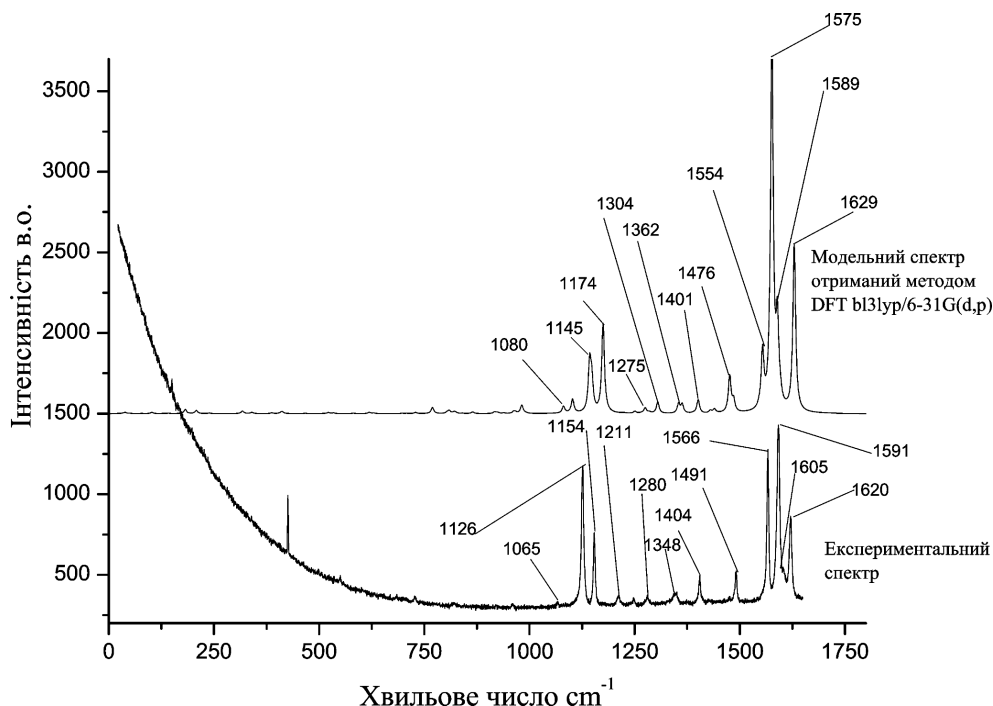


Рис. 3. Експериментальний та модельний спектри АБТ в інтервалі 0–1650 см^{-1}

го кута і при якому площина зв'язку не залишається сталою.

Слід відзначити, що модельний спектр та експериментальний спектр досить гарно корелюють між собою як кількісно, так і якісно. Насамперед слід зупинитись на чотирьох інтенсивних смугах, що виникають у спектральному інтервалі 1500–1650 см^{-1} . Це коливальні смуги з частотами 1620,7, 1605,6, 1591,7, 1566,7 см^{-1} . У модельному спектрі ці смуги виникають на частотах 1629,4, 1589,3, 1575,6,

1554,2 см^{-1} відповідно. Коливальна смуга на частоті 1620,7 см^{-1} відповідає валентному коливанню зв'язку $\nu(\text{C}_{14}=\text{N}_{13})$, що змішане з деформаційно-валентними коливаннями $\nu(\text{C-C})$ бензолних кілець 1 і 2. Ця смуга є типовою і зустрічається в усіх мезогенах, що містять бензиліден-анілінове ядро. Так, у роботі [10] для рідкокристалічних речовин 5O.5 і 5O.6 це коливання мало частоту 1627 см^{-1} та 1628 см^{-1} відповідно. У роботі [15] вивчали рідкий кристал 5O.7. Авторами було показано, що і в цьому ви-

падку у спектрі КР зареєстровано інтенсивну смугу на частоті 1624 см^{-1} . Автори це коливання відносили до валентного коливання $\text{C}=\text{N}$ зв'язку, що змішане з крутильним коливанням зв'язку $\text{C}-\text{H}$ містка $-\text{C}(\text{H})=\text{N}-$. Вищезгадані речовини належать до гомологічного ряду $n\text{O.m}$ Рідкі кристали ряду $n\text{O.m}$ складаються з бензиліден-анілінового ядра, до якого прикріплені бокові групи $\text{C}_m\text{H}_{2m-2}$ та $\text{C}_n\text{H}_{2n-2}-\text{O}-$. Цілі числа n та m вказують на число атомів карбону C в цих бокових групах. У роботі [16] для речовин 7.040.7 і 7.050.7 це коливання проявлялось на частотах 1627 см^{-1} та 1622 см^{-1} . Речовини 7.040.7 і 7.050.7 належать до гомологічного ряду $m.\text{OpO.m}$, що складаються з двох бензиліден-анілінових ядер, з'єднаних містком- $\text{O}-(\text{CH}_2)_n-\text{O}-$ і до яких приєднані алкільні групи $\text{C}_m\text{H}_{2m+1}$. Звідси можна зробити висновок, що частота цього коливання слабо залежить від природи бічних ланок бензиліден-анілінового ядра і визначається виключно його внутрішньою структурою. Відповідно до роботи [15] дві інші коливальні частоти $1591,7$ та $1566,7\text{ см}^{-1}$ асоціюються з виродженими коливальними модами $\nu(\text{C}-\text{C})$ коливань бензолних кілець, **8b** і **8a** в позначеннях Вілсона. Коливання на частоті $1605,6\text{ см}^{-1}$, що має значно нижчу інтенсивність, ніж $1591,7$ та $1566,7\text{ см}^{-1}$, також пов'язується з деформаційно-валентними $\nu(\text{C}-\text{C})$ коливаннями бензолних кілець. Наступні дві інтенсивні смуги проявляються в експериментальному спектрі на частотах $1404,5$ та 1491 см^{-1} . В модельному спектрі їм відповідають частоти $1401,8$ та 1476 см^{-1} . Коливання з частотою 1491 см^{-1} відповідає деформаційно-валентним коливанням фенольних кілець 1 і 2. Причому, при цьому коливанні форма кільця 2 зберігається, а кільця 1 ні. Частота $1404,5\text{ см}^{-1}$ відповідає деформаційному коливанню фенольного кільця 2, змішаного з валентним коли-

ванням $\nu(\text{C}_{14}=\text{N}_{13})$. У роботі [15] також спостерігали схожі частоти для рідкого кристала 50.7, відповідно 1422 та 1499 см^{-1} . На основі комп'ютерного моделювання автори [15] відносили їх до деформаційних коливань фенольних кілець, змішаних з коливання містка $-\text{C}(\text{H})=\text{N}$. Наступні інтенсивні спектральні смуги проявляються на частотах $1126,3$ та 1154 см^{-1} . У модельному спектрі їм відповідають частоти, відповідно, 1145 та $1174,9\text{ см}^{-1}$. Коливальна мода з частотою 1154 см^{-1} відповідає деформаційним коливанням $\delta(\text{C}-\text{H})$ $\text{C}-\text{H}$ зв'язків обох фенольних кілець, що змішане з валентними коливаннями $\nu(\text{C}_{14}=\text{N}_{13})$ та $\nu(\text{C}_3-\text{C}_{14})$. Коливальна мода на частоті $1126,3\text{ см}^{-1}$ пов'язувалась з валентними коливаннями $\nu(\text{C}-\text{C})$ зв'язків бензолного кільця 2, до яких ще була примішана "дыхаюча" коливальна мода кільця 1. У роботі [15] для рідкого кристала 50.7 частота 1163 см^{-1} також пов'язувалась деформаційними коливанням $\text{C}-\text{H}$ фенольних кілець, змішаних з валентними коливаннями $\text{C}=\text{N}$ зв'язку. Дану коливальну моду автори визначали як збігаючу з виродженою модою **9a** (в позначеннях Вілсона) бензолу. Зважаючи на те, що частота смуги 1154 см^{-1} мало відрізняється від частоти смуги 1163 см^{-1} і для обох смуг було отримано приблизно однакову інтерпретацію, можна припустити, що в нашому випадку смугу 1154 см^{-1} можна ототожнювати з виродженою коливальною модою бензолу **9a**.

5. Молекулярна геометрія

Використовуючи той факт, що модельний та експериментальний спектри КР АБТ якісно дуже схожі, можна припустити, що оптимізована геометрія дійсно якісно передає структуру молекули АБТ у кристалічному стані. Теоретично розраховані конформаційні параметри показано в табл. 3.

У таблиці використано такі позначення: **A** – площина кільця 1, що вміщує атоми ($\text{C}_1, \text{C}_2, \text{C}_3, \text{C}_4, \text{C}_5$), **B** – атоми ($\text{C}_{14}, \text{C}_{15}, \text{C}_{17}, \text{C}_{21}, \text{C}_{16}, \text{C}_{19}$), **C** – атоми ($\text{C}_{11}, \text{H}_{12}, \text{N}_{13}$); $\phi(\mathbf{A}, \mathbf{C})$, $\phi(\mathbf{B}, \mathbf{C})$ – двогранні кути між площинами **A**, **C** та **B**, **C** відповідно; R_1 і R_2 – середні довжини зв'язків $\text{C}-\text{C}$ кілець 1 і 2. Розрахунки показали, що площина бензолного кільця 1 **A** майже збігається з площиною **C** ($\text{C}, \text{N}, \text{H}$) – кут між ними становить всього $1,2^\circ$. Площина бензолного кільця 2 **B** розвернута на кут $37,9^\circ$ по відношенню до площини **C**. Також слід відзначити, що зв'язок $\text{N}-\text{O}$ також лежить у площині бензолного кільця 1 **A**. Отримані двогранні кути між площинами бензолних

Т а б л и ц я 3. Конформаційні параметри молекули АБТ у кристалічному стані

Параметр	Значення
$R_1(\text{C}-\text{C})$	$1,4\text{ \AA}$
$R_2(\text{C}-\text{C})$	$1,4\text{ \AA}$
$\text{C}=\text{N}$	$1,28\text{ \AA}$
$\text{O}-\text{N}$	$1,44\text{ \AA}$
$\text{C}-\text{O}$	$1,37\text{ \AA}$
$\phi(\mathbf{A}, \mathbf{C})$	$1,2^\circ$
$\phi(\mathbf{B}, \mathbf{C})$	$37,9^\circ$
$\phi(\text{C}_{11}, \text{N}_{13}, \text{C}_{14})$	$120,3^\circ$
$\phi(\text{C}_3, \text{C}_{11}, \text{N}_{13})$	123°
$\phi(\text{C}_6, \text{O}_{28}, \text{N}_{29})$	$113,7^\circ$

кілець знаходяться у гарному співвідношенні з теоретично розрахованими в роботі [15] двограними кутами для рідких кристалів серії nO.m. Отримані теоретичні значення двограних кутів між площинами бензольних кілець для рідких кристалів 5O.7, 4O.6, 3O.5, 2O.4 лежали в інтервалі 38–40°. Для 5O.7 авторами було виконано порівняння конформаційних параметрів з експериментальними даними для кристалічного 5O.7, отриманими в роботі [17]. Знайдено, що розраховані параметри досить добре узгоджуються з експериментом, за винятком двогранного кута між площинами бензольних кілець. Розрахунок за методом V3LYP/6-31G(*d,p*) дає значення 37,5°, експеримент 47°. Таке збігання авторами пояснювалось неврахуванням міжмолекулярної взаємодії, що є особливо суттєвою у кристалічній фазі, в модельних розрахунках. Подібна ситуація має мати місце і у випадку АБТ, тобто розраховане значення двогранного кута між бензольними кільцями є дещо заниженим.

6. Висновки

У роботі було проаналізовано коливальний спектр рідкого кристала АБТ, виконано його інтерпретацію. При порівнянні коливального спектра АБТ з раман-спектрами інших рідких кристалів, що містять в своєму складі БА-ядро, встановлено, що коливальна смуга з частотою 1620 см⁻¹ є характеристичною, її частота слабо залежить від будови бокових груп, що приєднуються до БА-ядра. На базі комп'ютерного квантохімічного моделювання було отримано геометричні параметри молекули АБТ в кристалічній фазі.

1. V.Ye. Pogorelov and I.B. Estrela-Llopis, *J. Mol. Struct.* **348**, 269 (1995).
2. V.Ye. Pogorelov and I.B. Estrela-Llopis, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **265**, 237 (1995).
3. W. Witko and J.M. Janik, *Acta Phys. Pol. A* **54**, 521 (1978).
4. P.C. Jain and S.R.S. Kafle, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **29**, 199 (1985).
5. I.B. Estrela-Llopis, V.Ye. Pogorelov, V.P. Bukalo, and Yu.A. Astashkin, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **320**, 45 (1998).
6. I.B. Estrela-Llopis, V.Ye. Pogorelov, V.P. Bukalo, and Yu.A. Astashkin, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **320**, 29 (1998).
7. V.Ye. Pogorelov, I.B. Estrela-Llopis, I.P. Pinkevich, and V.P. Bukalo, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **301**, 377 (1997).
8. L.M. Babkov, I.I. Gnatyuk, and S.V. Trukhachev, *J. Mol. Struct.* **744-745**, 425 (2005).

9. L.M. Babkov, O.V. Gorshkova, G.A. Puchkovskaya, and I.N. Khakimov, *J. Struct. Chem.* **39**, 44 (1998).
10. A. Bhattacharjee, P.R. Alapati, and A.L. Verma, *Liq. Cryst.* **28**, 1315 (2001).
11. S.K. Dash, R.K. Singh, P.R. Alapati, and A.L. Verma, *Liq. Cryst.* **25**, 459 (1998).
12. K. Vikram, N. Tarcea, J. Popp, and R.K. Singh, *Appl. Spectrosc.* **64**, 187 (2010).
13. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M. A. Robb, J.R. Cheeseman, V. G. Zakrewski, J.A. Montgomery, Jr., R.E. Stratmann, J.C. Burant, S. Dapprich, J.M. Milliam, A.D. Deniels, K.N. Kudin, M.C. Strain, O. Farkas, J.B.V. Tomasi, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G.A. Petersson, P.Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J. Cioslowski, J.V. Ortiz, A.G. Baboul, B.B. Stefanov, G. Liu, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, J.L. Andres, C. Gonzales, M. Head-Gordon, E.S. Replogle, and J.A. Pople, *Gaussian 03, Revision A.1* (Gaussian Inc., Pittsburg, Pa, 2003).
14. R. Dennigton II, T. Keith, J. Millam, K. Eppinnett, W.L. Howell, and R. Gilliland, *Gauss View 03* (Semichem Inc., Shawnee Mission, Ks, 2003).
15. K. Vikram, P.R. Alapati, and R.K. Singh, *Spectrochim. Acta A* **75** (2010).
16. B. Gogoi, A. Bhattacharjee, P.R. Alapati, and A.L. Verma, *Liq. Cryst.* **30**, 931 (2003).
17. F. Heinemann and P. Zugenmaier, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **157**, 845 (2000).

Одержано 11.04.11

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР p-АМИЛОКСИБЕНЗИЛИДЕН-p-ТОЛУИДИНА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЕ

В.Е. Погорелов, В.П. Букало, Ю.М. Жовтобрюх

Резюме

В работе был выполнен анализ колебательного раман-спектра жидкого кристалла *p*-амилоксибензилиден-*p*-толуидина (АБТ). Спектр КР был зарегистрирован в спектральном интервале 0–1650 см⁻¹ при комнатной температуре $T = 293$ К, когда АБТ находится в кристаллическом состоянии. Также были выполнены квантово-химическое моделирование геометрии и расчет колебательных частот молекулы АБТ методом V3LYP/6-31G(*d,p*). На основе результатов компьютерного моделирования выполнена интерпретация экспериментального спектра, получены конформационные параметры молекулы АБТ в кристаллическом состоянии.

VIBRATIONAL SPECTRUM OF
p-AMYLOXYBENZYLIDENE-*p*-TOLUIDINE
IN THE CRYSTALLINE PHASE

V. Ye. Pogorelov, V. P. Bukalo, I. M. Zhovtobriukh

Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics,
(2, *Prosp. Academician Glushkov, Kyiv 03022, Ukraine;*
e-mail: pvye@ukr.net)

S u m m a r y

The Raman spectrum of *p*-amyloxybenzylidene-*p*-toluidine (ABT) liquid crystal in the crystalline phase has been analyzed. The

spectrum was recorded in a spectral range of 0–1650 cm⁻¹ and at room temperature ($T = 293$ K). The quantum-chemical computer simulation of a molecular geometry has been carried out, and the vibrational frequencies of ABT molecules have been calculated by applying the B3LYP/6-31G(*d,p*) method. The results of quantum-chemical computer simulation were used to interpret the experimental Raman spectrum. The conformational parameters of ABT molecules in the crystalline phase have been determined.