

FİZİKA

К ВОПРОСУ О КОНФОРМАЦИОННОЙ ГЕТЕРОГЕННОСТИ
МОЛЕКУЛЫ *n*-ПРОПАНОЛА

Ч.О.КАДЖАР, Г.И.ИСМАИЛ-ЗАДЕ, И.З.МОВСУМОВ, М.Р.МЕНЗЕЛЕЕВ
Институт Физики Национальной Академии Наук Азербайджана

*Рассматриваются вопросы, связанные с изучением влияния внутримолекулярных водородных (H) связей на конформационное поведение молекулы *n*-пропанола. Приводятся результаты расчетов основных спектроскопических констант микроволнового спектра поглощения ОН-гош'-транс конформера, а также частот соответствующих вращательных переходов, наиболее интересных с точки зрения последующей идеентификации.*

ВВЕДЕНИЕ

Исследование конформационных свойств молекул замещенных углеводородов является одной из важнейших компонент процесса изучения строения вещества на молекулярном уровне. При этом в качестве базового фактора, определяющего конформационное поведение молекулы выступает комплекс реализующихся здесь внутримолекулярных взаимодействий различной природы, что обуславливает их приоритет в вопросах формирования основных физико-химических свойств соответствующих макросоединений. С другой стороны, разность энергий между двумя энергетически неэквивалентными конформациями молекулы, как правило, незначительна ($\sim 0\div 3$ ккал/моль) и зачастую существенно уступает силам межмолекулярных взаимодействий, проявляющих себя в конденсированных фазах вещества, что, в свою очередь, ведет к значительным искажениям реальной картины конформационных превращений в молекуле, сводя на нет наиболее прецизионные эффекты её конформационной гетерогенности, в том числе такие специфические, как внутримолекулярные водородные связи (H-связи).

В настоящее время к наиболее распространенным методам исследования межмолекулярных H-связей в жидкой фазе вещества следует отнести инфракрасную (ИК) спектроскопию, а также спектроскопию комбинационного рассеяния. Если речь идет о сильных внутримолекулярных H-связях, то специфика их индикации и изучения посредством ИК-спектроскопии по сути идентична межмолекулярным H-связям, за исключением того, что при одинаковой величине смещения соответствующей полосы по шкале частот, в последнем случае наблюдается значительно большее увеличение её полуширины и интенсивности. Что касается слабых (< 1 ккал/моль) внутримолекулярных H-связей, то они в этом случае проявляют себя лишь при крайне низких концентрациях исследуемого вещества в нейтральных растворителях. В этом смысле гораздо больше полезной информации можно получить исследуя газофазное состояние вещества в условиях минимизации (или отсутствия) возмущающих факторов сил межмолекулярных

взаимодействий. Однако изучение внутримолекулярных H -связей в газах методами ИК-спектроскопии весьма неэффективно, что связано как с чисто техническими вопросами проведения экспериментальных изысканий, так и с проблемами однозначной интерпретации их результатов. Спектроскопии же комбинационного рассеяния характерна низкая величина рассеяния излучения в газах.

В этих условиях, при исследовании внутримолекулярных H -связей гораздо более эффективным представляется метод микроволновой (МВ) газовой спектроскопии, который в полной мере раскрывает свои возможности при изучении конформационного поведения молекул со сравнительно слабыми внутримолекулярными H -связями, в частности типа $HO...HC$, наиболее характерными для большинства молекулярных систем из ряда спиртов, когда неподеленная электронная пара атома кислорода вступает во взаимодействие с протоном одного из водородов метильной (метиленовой) группы.

Действительно, в целом ряде работ, посвященных исследованию строения простейших спиртов методами МВ газовой спектроскопии [1,2], между экспериментальными и ожидаемыми значениями некоторых структурных параметров тех молекулярных конформаций, которые предсказывались предварительно проведенными полуэмпирическими расчетами потенциалов внутреннего вращения [3] наблюдались определенные расхождения, связанные, по-видимому, с возмущающим воздействием реализующихся здесь H -связей указанного типа. Кроме того, в МВ спектрах поглощения молекул структурно более сложных спиртовых соединений, характеризующихся большим числом степеней свободы внутреннего вращения, а значит и более широким спектром конформационной гетерогенности, были обнаружены серии достаточно интенсивных вращательных и торсионно-вращательных переходов, которые отнесены авторами к специфическим, стабилизированным внутримолекулярными H -связями изомерным формам. При этом необходимо отметить, что одной из причин, стимулирующих в настоящее время нарастающий интерес исследователей к ещё более углубленному экспериментальному анализу данной проблемы, явилось дальнейшее качественное развитие неэмпирических (*ab initio*) методов расчета потенциальных барьеров внутреннего вращения молекул, высокая прецизионность которых делает их весьма эффективным инструментом теоретического анализа вопросов, касающихся стимулирующей роли внутримолекулярных H -связей в формировании конформационных свойств соответствующей молекулярной системы. Так, в работе [4] приводятся результаты *ab initio* расчетов молекулярного строения этиленгликоля и 1-3 пропандиола в $HF/6-31++G^{**}$ и $HF/4-31+G^*$ оптимизациях, соответственно, что позволило предсказать возможность существования десяти изомерных форм молекулы этиленгликоля, в том числе специфической, стабилизированной внутримолекулярной H -связью гош-конформации, а также выявить значительную роль последней в формировании конформационного поведения молекулы 1,3-пропандиола. Экспериментальным подтверждением полученных в данной работе теоретических данных стали результаты исследования МВ спектра поглощения молекулы этиленгликоля [5], выявивших существование её гош-изомера ($g'Gg$), стабилизированного внутримолекулярной H -связью, в котором атомы водорода обоих гидроксильных групп инверсируют относительно плоскости $OCCO$ между двумя энергетически эквивалентными («+» и «-») конфигурациями, приводя к инверсии

онному расщеплению вращательных уровней энергии в 1,4 ГГц. Отметим, что стабилизирующая роль внутримолекулярных H -связей, как одного из факторов определяющих конформационную гетерогенность свободных молекул, была впервые экспериментально констатирована в работе [6], в которой приводятся результаты исследований МВ спектров поглощения молекулы n -пропанола- OD . Были обнаружены серии дублетных переходов, отнесенные к OD -гош'-транс конформации, вероятная структура которой характеризуется поворотом атомных групп CH_2OD и OD на углы $\varphi \sim 10^\circ$ и $\psi \sim 30^\circ$ соответственно, от транс-транс положения ($\varphi = 0^\circ$ и $\psi = 0^\circ$). Геометрически это соответствует максимальному сближению неподеленной электронной пары атома кислорода с протоном одного из водородов метиленовой группы при центральном атоме углерода (рис.1) и указывает на возможность их взаимного притяжения.

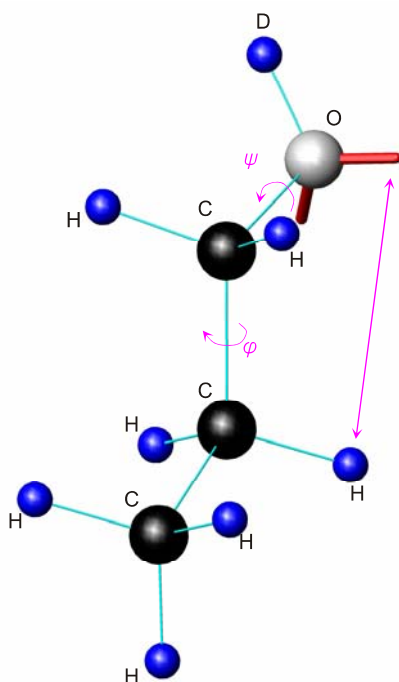


Рис.1. OD -гош'-транс конформер молекулы n -пропанола- OD .

Анализ полученных экспериментальных и расчетных данных о молекулярной структуре и электрических свойствах выявленного конформера позволил авторам предложить механизм взаимодействия, стабилизирующего указанную конформацию в виде внутримолекулярной H -связи типа $C-H \dots O$ ($\mu_{C\delta} \sim 0.6D$), а сопоставление предварительно рассчитанной конформационной карты молекулы n -пропанола с результатами измерений разности энергий между OD -транс-транс и OD -гош'-транс конформерами позволили оценить потенциал взаимодействия в 0.76 ± 0.30 ккал/моль.

При этом процесс однозначной идентификации данного изомера значительно усложняли отсутствие предварительных расчетов его основных спектральных характеристик, а также весьма существенная величина разнесения частот отдельных компонент дублетов плоскостных («а» и «b») пе-

реходов, очевидно связанная с малой величиной потенциального барьера инверсирования атома D группы OD и, соответственно, с высоким значением инверсионного расщепления («+» и «-») вращательных уровней энергии.

Что касается конформационного поведения исходной молекулы n -пропанола ($CH_3 CH_2 CH_2 OH$), то в результатах всех предыдущих исследований её МВ-спектров поглощения [7], [8] не содержалось информации о реализации здесь изомерной формы указанного типа. Это может быть объяснено тем, что данный вопрос выходил за рамки очерченного авторами круга исследований, которые сводились к проблеме поиска и идентификации конформеров предсказанных предварительными полуэмпирическими расчетами потенциалов внут-

ренного вращения. Кроме того, меньшая (по сравнению с атомной группой OD) приведенная масса инверсирующей гидроксильной группы предполагает еще большие значения дублетных расщеплений и, как следствие, значительные разнесения серий вращательных переходов в МВ спектре молекулы, перевода процесс их однозначной идентификации в плоскость весьма трудоемких, а в случае отсутствия соответствующих теоретических расчетов необходимых спектральных характеристик, и практически неразрешимых задач.

В этой связи целью настоящих исследований стало проведение предварительных теоретических расчетов основных спектроскопических параметров и спектральных характеристик OH -гош-транс конформера молекулы n -пропанола, результаты которых позволили бы осуществить целенаправленный поиск и последующую идентификацию серий вращательных переходов данной конформации в МВ-спектре поглощения молекулы n -пропанола и, тем самым, констатировать возможность реализации стабилизирующих внутримолекулярных H -связей в молекулах одноатомных спиртов.

Спектроскопические константы

В основу предварительных расчетов значений базовых спектроскопических констант OH -гош-транс конформера молекулы n -пропанола в приближении жесткого ротатора был положен традиционный метод определения его главных моментов инерции (I_a, I_b, I_c), когда в качестве первого шага координаты всех атомов должны быть получены в произвольной системе координат, а уже затем, после нахождения координат центра тяжести рассматриваемой молекулярной системы определяются координаты атомов в системе координат с началом в центре тяжести,

составляется соответствующее характеристическое уравнение, в качестве корней которого и выступают искомые значения главных моментов инерции.

При этом специфика пространственной конфигурации анализируемой конформации предопределила целесообразность указанной на рис.2 ориентационного расположения ее в произвольной координатной системе XYZ . Координаты атомов рассчитывались по приведенным в таблице 1 соотношениям для случаев $\psi = \pm 29^\circ 30'$.

При этом значения длин межатомных валентных связей и валентных углов, используемые в процессе расчетов получены экспериментальным путем для соответствующей изомерной формы молекулы n -пропанола- OD [6], а также и полученные значения главных моментов инерции (I_a, I_b, I_c), параметра асимметрии (χ), дефекта инерции ($\Delta = I_a + I_b - I_c$) и вращательных констант (A, B, C) приводятся в таблице 2.

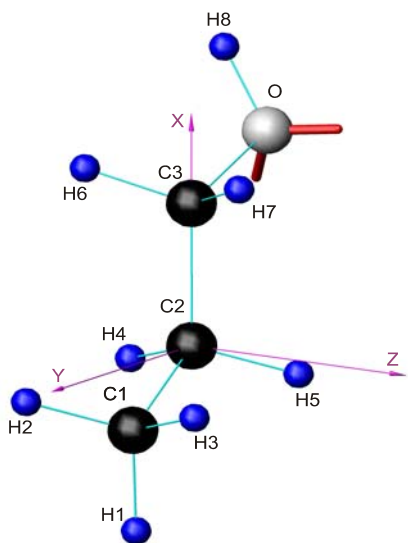


Рис.2. Ориентационное расположение OH -гош-транс конформера молекулы n -пропанола в произвольной системе координат.

Таблица 1

Расчетные соотношения для определения координат атомов *n*-пропанола в произвольной системе координат

C_1	X	$-r_{(c-e)} \cdot \cos(\angle ccc)$
	Y	$r_{(c-e)} \cdot \sin(\angle ccc) \cdot \cos \varphi$
	Z	$r_{(c-e)} \cdot \sin(\angle ccc) \cdot \sin \varphi$
C_2	X	0
	Y	0
	Z	0
C_3	X	$r_{(c-e)}$
	Y	0
	Z	0
O	X	$r_{(c-o)} - r_{(c-o)} \cdot \cos(\angle cco)$
	Y	$-r_{(c-o)} \cdot \sin(\angle cco)$
	Z	0
H_1	X	$r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle cch - \angle ccc) - r_{(c-e)} \cdot \cos(\angle ccc)$
	Y	$[r_{(c-e)} \cdot \sin(\angle ccc) - r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle ccc - \angle cch)] \cdot \cos \varphi$
	Z	$[r_{(c-e)} \cdot \sin(\angle ccc) - r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle ccc - \angle cch)] \cdot \sin \varphi$
H_2	X	$-r_{(c-e)} \cdot \cos(\angle ccc) + r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \cos[\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} - \angle ccc]$
	Y	$[r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \sin(\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} + \angle ccc) + r_{(c-e)} \cdot \sin(\angle ccc)] \cdot \cos \varphi + r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2) \cdot \sin \varphi$
	Z	$[r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \sin(\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} + \angle ccc) + r_{(c-e)} \cdot \sin(\angle ccc)] \cdot \sin \varphi - r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2) \cdot \cos \varphi$
H_3	X	$-r_{(c-e)} \cdot \cos(\angle ccc) + r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \cos[\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} + \angle ccc]$
	Y	$[r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \sin(\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} + \angle ccc) + r_{(c-e)} \cdot \sin(\angle ccc)] \cdot \cos \varphi - r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2) \cdot \sin \varphi$
	Z	$[r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \sin(\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} + \angle ccc) + r_{(c-e)} \cdot \sin(\angle ccc)] \cdot \sin \varphi + r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2) \cdot \cos \varphi$
H_4	X	$-r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \cos[\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} + \angle ccc]$
	Y	$-[r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \sin(\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} + \angle ccc)] \cdot \cos \varphi + r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2) \cdot \sin \varphi$
	Z	$-[r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \sin(\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} + \angle ccc)] \cdot \sin \varphi - r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2) \cdot \cos \varphi$
H_5	X	$-r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \cos[\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} - \angle ccc]$
	Y	$-[r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \sin(\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} - \angle ccc)] \cdot \cos \varphi - r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2) \cdot \sin \varphi$
	Z	$-[r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2) \cdot \sin(\arccos\{\cos(\angle cch) / \cos(\angle hch / 2)\} - \angle ccc)] \cdot \sin \varphi + r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2) \cdot \cos \varphi$
H_6	X	$r_{(c-e)} - r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle cch)$
	Y	$\sqrt{(r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2))^2 - (r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle cch))^2}$
	Z	$-r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2)$
H_7	X	$r_{(c-e)} - r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle cch)$
	Y	$\sqrt{(r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle hch / 2))^2 - (r_{(c-h)} \cdot \cos(\angle cch))^2}$
	Z	$r_{(c-h)} \cdot \sin(\angle hch / 2)$
H_8	X	$r_{(c-e)} - r_{(c-o)} \cdot \cos(\angle cco) - \sqrt{(r_{(o-h)} \cdot \sin(\angle coh) \cdot \cos \psi)^2 + (r_{(o-h)} \cdot \cos(\angle coh))^2} \cdot \cos(\arcsin\left\{\frac{[r_{(o-h)} \cdot \sin(\angle coh) \cdot \cos \psi]}{\sqrt{(r_{(o-h)} \cdot \sin(\angle coh) \cdot \cos \psi)^2 + (r_{(o-h)} \cdot \cos(\angle coh))^2}}\right\} + \angle cco)$
	Y	$-r_{(c-o)} \cdot \sin(\angle cco) - \sqrt{(r_{(o-h)} \cdot \sin(\angle coh) \cdot \cos \psi)^2 + (r_{(o-h)} \cdot \cos(\angle coh))^2} \cdot \sin(\arcsin\left\{\frac{[r_{(o-h)} \cdot \sin(\angle coh) \cdot \cos \psi]}{\sqrt{(r_{(o-h)} \cdot \sin(\angle coh) \cdot \cos \psi)^2 + (r_{(o-h)} \cdot \cos(\angle coh))^2}}\right\} + \angle cco)$
	Z	$r_{(o-h)} \cdot \sin(\angle coh) \cdot \sin \psi$

Частоты плоскостных вращательных переходов

Прогнозируемые большие значения инверсионных расщеплений вращательных уровней энергии анализируемой конформации молекулы *n*-пропанола, которые обусловлены незначительностью массы инверсирующего волчка и малой (в условиях фактического отсутствия существенных стерических взаимодействий) высотой потенциального барьера, а также небольшая величина μ_c —составляющей дипольного момента [6], предопределяют, с одной стороны весьма значительный частотный разнос «+» → «-» и «-» → «+» компонент неплоскостных (μ_c) торсионно-вращательных переходов, а с другой стороны их пренебрежимо малую интенсивность. Это практически исключает вероятность их однозначной идентификации, базирующейся на результатах теоретического анализа модели жесткого ротатора для молекулы *n*-пропанола и предопределяет целесообразность осуществления экспериментальных исследований МВ-спектра ее *ОН*-гош-транс конформера в рамках поиска и отнесения серии плоскостных («+» → «+» и «-» → «-»; μ_a, μ_b) переходов, дублетная структура которых должна разрешаться в пределах теоретически предсказываемого частотного диапазона [6].

В этой связи, используя значения приведенных в таблице 2 спектроскопических параметров, были рассчитаны частоты плоскостных (μ_a, μ_b) переходов *Q*, *R* и *P*- ветвей, значения которых приводятся в таблице 3.

Таблица 2

Исходные и рассчитанные параметры *ОН*-гош'-транс конформера молекулы *n*-пропанола

Исходный параметр	Значение	Рассчитанный параметр	Значение.
длина связи $r_{(O-H)}$	0,966 Å	A	26765,657 МГц
длина связи $r_{(C-O)}$	1,441	B	3716,765 МГц
длина связи $r_{(C-H)}$	1,096	C	3496,133 МГц
длина связи $r_{(C-C)}$	1,525	γ	-0,981037
угол ϕ	-9°10' (+9°10')	I_a	18,887 а.е.м.·Å ²
угол ψ	29°30' (-29°30')	I_b	136,014 а.е.м.·Å ²
угол <ссо	111°05'	I_c	144,597 а.е.м.·Å ²
угол <ссс	113°12'	Δ	10,3038 а.е.м.·Å ²
угол <ссh	109°24'		
угол <hch	108°24'		
угол <сoh	105°03'		

Таблица 3

Расчетные значения частот плоскостных вращательных переходов *Q*, *R* и *P*- ветвей до *J*=10

Переход	Частота, МГц	Переход	Частота, МГц	Переход	Частота, МГц
1 ₀₁ -1 ₁₀	23269.5246	5 ₁₅ -6 ₀₆	21673.6308	10 ₁₁₀ -10 ₂₉	75611.9501
2 ₀₂ -2 ₁₁	23491.7336	11 ₂₁₀ -12 ₁₁₁	25450.1199	11 ₁₁₁ -11 ₂₁₀	76851.6045
3 ₀₃ -3 ₁₂	23827.9988	7 ₁₇ -6 ₂₄	22218.2035	3 ₀₃ -2 ₂₀	71007.5973
4 ₀₄ -4 ₁₃	24281.8492	2 ₁₂ -2 ₂₁	69808.5739	8 ₁₇ -9 ₁₈	65861.7685
5 ₀₅ -5 ₁₄	24857.9635	2 ₁₁ -2 ₂₀	69148.2526	9 ₀₁ -10 ₀₂	72134.8917
6 ₀₆ -6 ₁₅	25562.1373	3 ₁₂ -3 ₂₁	68824.5976	9 ₇₃ -10 ₇₄	72137.0812
7 ₀₇ -7 ₁₆	26401.2302	3 ₁₃ -3 ₂₂	70140.5046	9 ₅₅ -10 ₅₆	72142.5554
8 ₀₈ -8 ₁₇	27383.0850	4 ₁₃ -4 ₂₂	68401.0396	9 ₃₇ -10 ₃₈	72161.7012
9 ₀₉ -9 ₁₈	28516.4116	4 ₁₄ -4 ₂₃	70583.6755	9 ₁₉ -10 ₁₁₀	70965.5076

10 ₀₁₀ -10 ₁₉	29810.6262	5 ₁₄ -5 ₂₃	67884.4297	9 ₈₂ -10 ₈₃	72135.7779
11 ₀₁₁ -11 ₁₁₀	31275.6414	5 ₁₅ -5 ₂₄	71138.5770	9 ₆₄ -10 ₆₅	72139.1144
1 ₁₁ -2 ₁₂	14205.1634	6 ₁₆ -6 ₂₅	71805.7965	9 ₄₆ -10 ₄₇	72149.1043
1 ₀₁ -2 ₀₂	14424.2196	6 ₂₅ -5 ₃₂	72540.1325	9 ₂₈ -10 ₂₉	72089.1500
1 ₁₀ -2 ₁₁	14646.4286	6 ₂₄ -5 ₃₃	72429.7066	9 ₈₁ -10 ₈₂	72135.7779
2 ₁₂ -3 ₁₃	21306.7634	7 ₁₆ -7 ₂₅	66608.0074	9 ₆₃ -10 ₆₄	72139.1144
3 ₁₃ -4 ₁₄	28407.1950	7 ₂₅ -6 ₃₄	65149.5302	9 ₄₅ -10 ₄₆	72149.1490
3 ₀₃ -4 ₀₄	28835.8328	7 ₁₇ -7 ₂₆	72586.0008	9 ₂₇ -10 ₂₈	72346.0318
3 ₂₂ -4 ₂₃	28850.3659	6 ₀₆ -7 ₁₇	70627.2660	9 ₀₉ -10 ₁₀	71872.0535
3 ₃₁ -4 ₃₂	28854.7238	7 ₂₆ -6 ₃₃	65348.3627	9 ₉₀ -10 ₉₁	72134.8917
3 ₃₀ -4 ₃₁	28854.7660	8 ₁₈ -8 ₂₇	73479.9165	9 ₇₂ -10 ₇₃	72137.0812
3 ₂₁ -4 ₂₂	28866.1251	8 ₁₇ -8 ₂₆	65870.3731	9 ₅₄ -10 ₅₅	72142.5556
3 ₁₂ -4 ₁₃	29289.6831	9 ₁₉ -9 ₂₈	74488.3077	9 ₃₆ -10 ₃₇	72167.2664

Дипольный момент и его составляющие вдоль главных осей

Значения дипольного момента *ОН*-гош'-транс конформера и его составляющих вдоль главных осей ($\mu_{\text{общ}} = 1,75 \pm 0,08D$; $\mu_a = 1,18 \pm 0,06D$; $\mu_b = 1,24 \pm 0,06D$; $\mu_c = 0,42 \pm 0,10D$; $\mu_{\text{С-Н...O}} = 0,06D$) молекулы были приняты идентичными соответствующим параметрам *OD*-гош'-транс конформера молекулы *n*-пропанола-*OD*, приведенным в [6], поскольку при изотопических замещениях электрические свойства соединений не изменяются.

Таким образом, в работе получены теоретические данные, которые ложатся в основу последующих экспериментальных исследований с целью идентификации спектра *ОН*-гош'-транс конформера молекулы *n*-пропанола-*ОН* в очерченных диапазонах частот МВ-спектра.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.Maeda, F.C.De Lucia, E.E.Herbst. The astrophysical Journal, Supplement Series, (2006), 162, 428.
2. C.F.Su, C.R.Quade. Journal of Molecular Spectroscopy, (1996), 175, 428.
3. R.A. Scott and H.A. Scharaga. Journal of Chemical Physics, (1965), 42, 6.
4. P.Bulttilinck, A.Goeminne and D.Van der Vandel. Journal of Molecular Structure, (1995), 357, 19.
5. D.Cristen, A.Gudert, J.A.Larsson and D.Crener. Journal of Molecular Spectroscopy, (2001), 205, 185.
6. Абдурахманов А.А., Исмаилов Г.И. Журнал структурной химии, (1987), 28/2, 91
7. Абдурахманов А.А., Рагимова Р.А., Велиюлин Э.И., Иманов Л.М. Журнал Структурной Химии, (1981), 22, 39.
8. H. Draiser and F. Scappini. ZEIT, Nature, (1981), 36A, 1187.

N-PROPANOL MOLEKULUNUN KONFORMASION HETEROGENLİYİ BARƏSİNDƏ

Ç.O.QACAR, H.İ.İSMAİLZADƏ, İ.Z.MÖVSÜMOV, M.R.MENZELEYEV

XÜLASƏ

İşdə *n*-propanol molekulunun konformasion hallarına daxili molekulyar hidrogen (H) əlaqələrinin təsiri ilə əlaqədar suallara baxılır. *OH*-qoş'-trans konformerinin mikrodalğalı udulma spektrinin əsas spektroskopik sabitlərinin hesablama nəticələri və həmçinin identifikasiya baxımından maraqlı olan fırlanma keçidlərinin uyğun tezlikləri verilmişdir.

ON THE CONFORMATIONAL HETEROGENEITY
OF *N*-PROPANOL MOLECULE

CH.O.QAJAR, G.I.ISMAILZADE, I.Z.MOVSUMOV, M.R.MENZELEYEV

SUMMARY

The questions related to the study of intramolecular *H*-bonds influence upon conformational behaviour of *n*-propanol (CH_3 CH_2 CH_2 OH) molecule have been examined. The results of calculations of basic spectroscopic constants and frequencies of most perspective for future identification microwave rotational transitions of *n*-propanol *OH*-gauche'-trans conformational isomer spectra have been presented.