



**2-й Международный семинар по спектроскопии  
и фотохимии макрогетероциклических  
соединений 18–19 октября 2022 г.**

**Минск, БЕЛАРУСЬ**

**Расчеты структуры и анализ колебательных спектров  
некоторых индолиновых спиропиранов**

**Л.Л. Гладков<sup>а</sup>, Г.А. Гладкова<sup>б</sup>, А.В. Любимов<sup>в</sup>,  
Л.В. Ляшук<sup>а</sup>, Ю.Д. Хамчуков<sup>г</sup>**

<sup>а</sup> УО "Белорусская государственная академия связи", 220114,  
ул. Ф.Скорины, 8, к.2, Минск, Республика Беларусь; e-mail: llglad@tut.by

<sup>б</sup> УО «Военная академия Республики Беларусь», 220057, пр. Независимости,  
220, Минск, Республика Беларусь

<sup>в</sup> Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, 117977, ул.  
Косыгина, 4, Москва, Россия

<sup>г</sup> УО «Витебский государственный медицинский университет», 210009, пр.  
Фрунзе 27, Витебск, Республика Беларусь

Зарегистрированы колебательные спектры фотохромных соединений индолиноспиронафтооксазина (ИСНО) и индолиноспирофенантрооксазина (ИСФО). Методом функционала плотности по программе «Природа» выполнена оптимизация структуры молекул и расчет нормальных колебаний. Были обнаружены четыре стационарные точки, соответствующие различным изомерам ИСНО, разбитые на две пары. Изомеры каждой пары имеют практически одинаковые энергии и структурные параметры и отличаются друг от друга поворотом индолинового фрагмента на 180° относительно пирановой группы. У двух устойчивых изомеров энергия примерно на 900 см<sup>-1</sup> меньше, чем двух других изомеров. Основным различием в строении этих пар изомеров является поворот индолиновой части молекулы вокруг оси, перпендикулярной пирановому фрагменту. Кроме того, длина связи между спиро-атомом углерода и атомом кислорода заметно меньше (1,439 Å), чем у наиболее устойчивого изомера (1,479 Å). Зато длина связи этого углерода с азотом наоборот короче у основного изомера (1,452 и 1,48 Å, соответственно).

На основании расчетов нормальных колебаний и их активности в ИК-спектрах предложена интерпретация полученных колебательных спектров. Определена спектральная область проявления частот колебаний с наибольшим изменением связей спироатом углерода – кислород 700 – 900 см<sup>-1</sup> через которые в возбужденном состоянии, возможно, происходит фотоперестройка спироформы молекул в мероцианиновую форму.

При анализе интенсивностей в ИК-спектрах ИСФО, напыленного на поверхность пластины монокристалла и запрессованного в таблетке КВг, сделан вывод об упорядоченном расположении этих молекул на поверхности, причем углы между фенантрооксазиновым фрагментом и подложкой должны быть малы.