**Строение и конформационный анализ галогенангидридов циклопропанкарбоновой кислоты в основном и низших возбужденных электронных состояниях**

***Акимов Г.А.***

*Студент, 6 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: akimov.georgyy@gmail.com*

В работе представлены результаты теоретического исследования молекул фторангидрида и хлорангидрида циклопропанкарбоновой кислоты в основном S0 и первых возбужденных триплетном (T1) и синглетном (S1) электронных состояниях.

Рис. 1. Структурные формулы фтор- и хлорангидрида циклопропанкарбоновой кислоты

Квантовохимическим методом MP2/cc-pVTZ показано, что в S0 состоянии исследуемые молекулы существуют в виде *цис*- и *транс*-конформеров, обладающих плоскостью симметрии, что согласуется с экспериментальными данными [1–6]. Рассчитаны равновесные геометрические параметры конформеров, их относительные энергии, а также барьеры внутреннего вращения. Построены потенциальные функции внутреннего вращения. Рассчитаны энергии переходов в низкочастотной области колебательного спектра. Особое внимание уделено решению ангармонической колебательной задачи для внутреннего вращения и неплоского антисимметричного колебания CXO–группы (X=F, Cl) в одномерном (1D) и двумерном (2D) приближениях вариационным методом. Изучена возможность кинематической взаимосвязи этих движений.

В возбужденных электронных состояниях молекулы рассчитывали методом CASPT2(6e,5MO)/cc-pVTZ. Полученные электронные волновые функции существенно одноконфигурационны. В результате электронного возбуждения фрагмент CCXO (X=F, Cl) пирамидализуется (угол выхода связи СХ из плоскости ССО составляет от 39 ° до 45 °) и поворачивается относительно циклопропильного кольца. В T1 и S1 состояниях обе молекулы существуют в виде трех пар энантиомеров. Получены барьеры и потенциальные функции внутреннего вращения, решены ангармонические колебательные одномерные и двумерная задачи для внутреннего вращения и инверсионного колебания, оценены вертикальные и адиабатические энергии переходов.

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №22*–*23*–*00463.*

**Литература**

1. Durig J.R., Bist H.D., Little T.S. Conformational barriers to internal rotation and vibrational assignment of cyclopropylcarbonyl fluoride // J. Chem. Phys. 1982. Vol. 77, № 10. P. 4884–4894.

2. Durig J.R. et al. Vibrational and conformational studies of cyclopropylcarbonyl chloride // J. Mol. Struct. 1983. Vol. 99, № 3–4. P. 217–233.

3. Durig J.R., Wang A.-Y., Little T.S. Far-infrared spectrum, barriers to internal rotation, structural parameters, and vibrational assignment of cyclopropylcarbonyl fluoride // J. Mol. Struct. 1991. Vol. 244. P. 117–137.

4. Durig J.R., Wang A., Little T.S. Conformational stability, barrier to internal rotation, structural parameters, ab initio calculations, and vibrational assignment of cyclopropylcarbonyl chloride // J. Mol. Struct. 1992. Vol. 269, № 3–4. P. 285–308.

5. Durig J.R. et al. Conformational studies of cyclopropylcarbonyl fluoride from temperature dependent FT-IR spectra of xenon solutions // Chem. Phys. 1996. Vol. 213, № 1–3. P. 165–179.

6. Durig J.R. et al. Conformational studies of cyclopropylcarbonyl chloride from temperature-dependent FT-IR spectra of xenon solutions // J. Mol. Struct. 1997. Vol. 407, № 1. P. 11–26.