

**APPLICATION OF INFRARED SPECTROSCOPY IN THE ANALYSIS
OF ORGANOSILANES**

Iva Movre Šapić, Sara Barukčić, Mihaela Vujnović

Sveučilište u Zagrebu Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Trg Marka Marulića 19, 10 000 Zagreb

○ **UVOD**

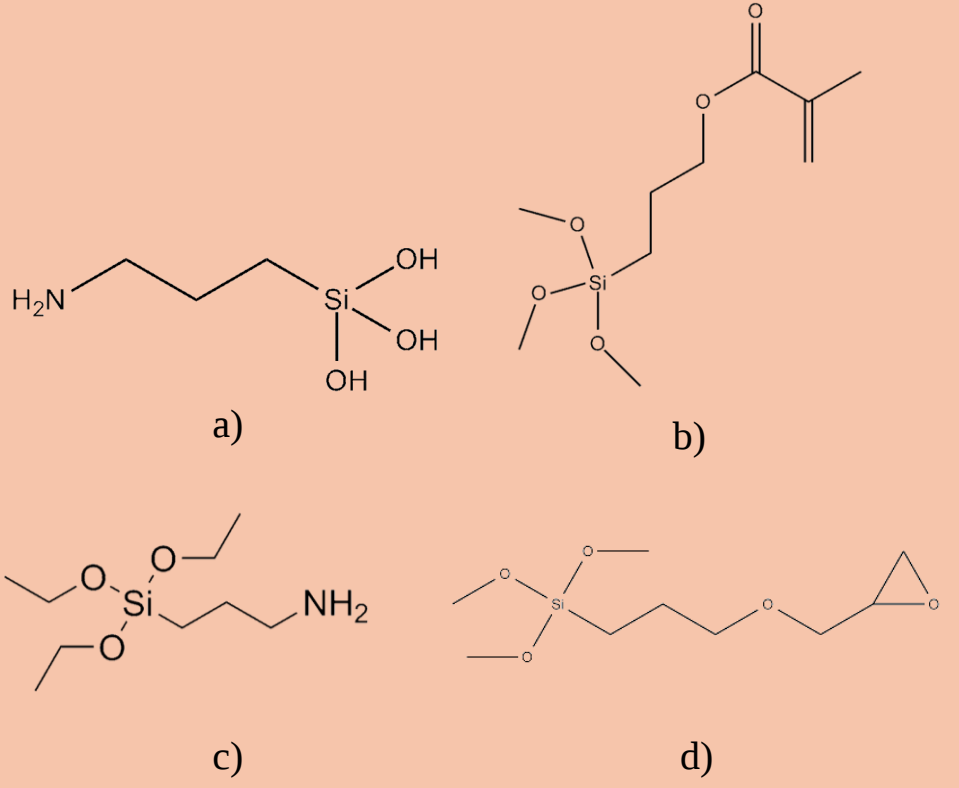
Organosilani su skupina kemijskih spojeva koji sadrže silicij kao centralni atom te barem jednu ugljik – silicij (Si-C) vezu, koja omogućuje povezivanje između anorganskih i organskih materijala. U strukturi R-(CH₂)_n-Si-X₃, X predstavlja hidrolizabilnu skupinu poput alkoksi skupine, a R organo-funkcionalne, nehidrolizabilne skupine poput amino, vinil ili epoksi skupina. Organosilani imaju vrlo važnu ulogu u rastu i istraživanju područja naprednih materijala kao sredstva za vezivanje organskih polimera s anorganskim materijalima, promotori adhezije, površinski modifikatori te kao hidrofobna sredstva. Koriste se u kromatografiji, imobilizaciji enzima, modifikaciji elektroda, premaza i katalizatora.

Cilj rada je analizirati odabrane organosilane (3-aminopropilsilantriol (APST), 3-aminopropiltrietoksisilan (APTS), 3-glicidoksipropiltrimetoksisilan (GPTS) i 3-metakriloksipropiltrimetoksisilan (MPTS)) metodom infracrvene spektroskopije te usporediti eksperimentalno dobivene spektre s teorijskim kvantnomehaničkim proračunima.

○ **EKSPERIMENTALNI DIO**

Kemikalije

- 3-aminopropilsilantriol (APST)
- 3-aminopropiltrietoksisilan (APTS)
- 3-glicidoksipropiltrimetoksisilan (GPTS)
- 3-metakriloksipropiltrimetoksisilan (MPTS)



Slika 2. FTIR spektrometar PerkinElmer Spectrum One

○ **RAČUNSKI DIO**

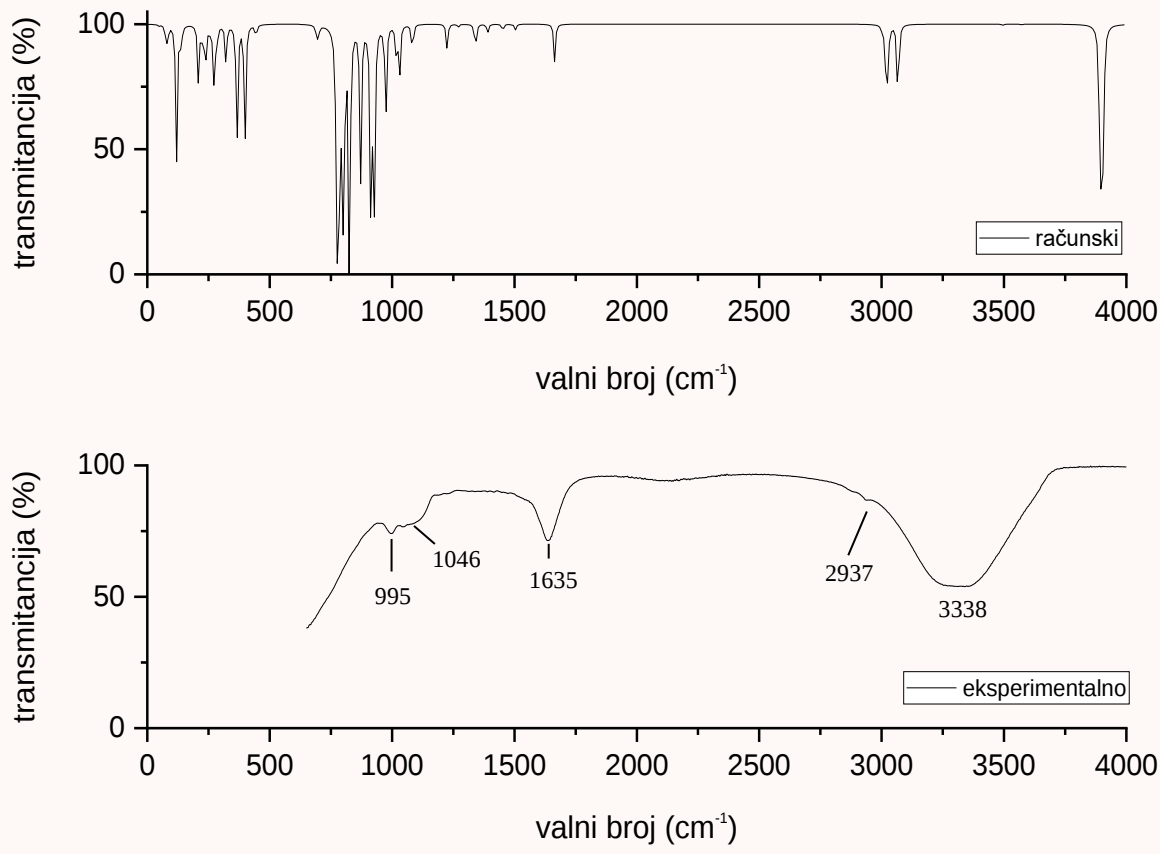
Izračun optimalne strukture molekula te infracrvenih spektara proveden je pomoću **Gaussian 09** matematičkog programa. Korištena metoda je **teorija funkcionala gustoće** (eng. *Density functional theory*, DFT) s B3LYP funkcionalom izmjene i korelacije te baznim skupom 6-311++g(d,p).



Slika 3. Logo matematičkog programa Gaussian 09

○ **REZULTATI**

3-aminopropilsilantriol (APST)

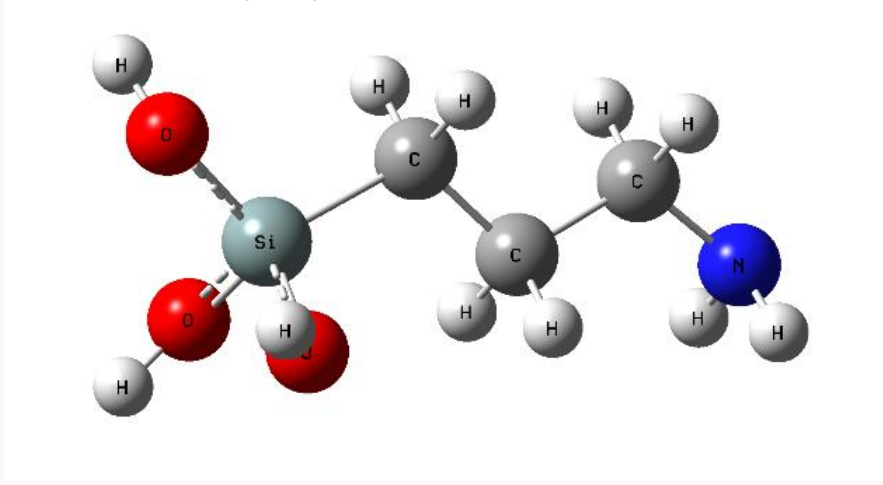


Slika 4. Usporedba računski i eksperimentalno dobivenih IR spektara APST-a

Tablica 1. Usporedba frekvencija dobivenih eksperimentalno, izračunom te podataka iz literature za APST

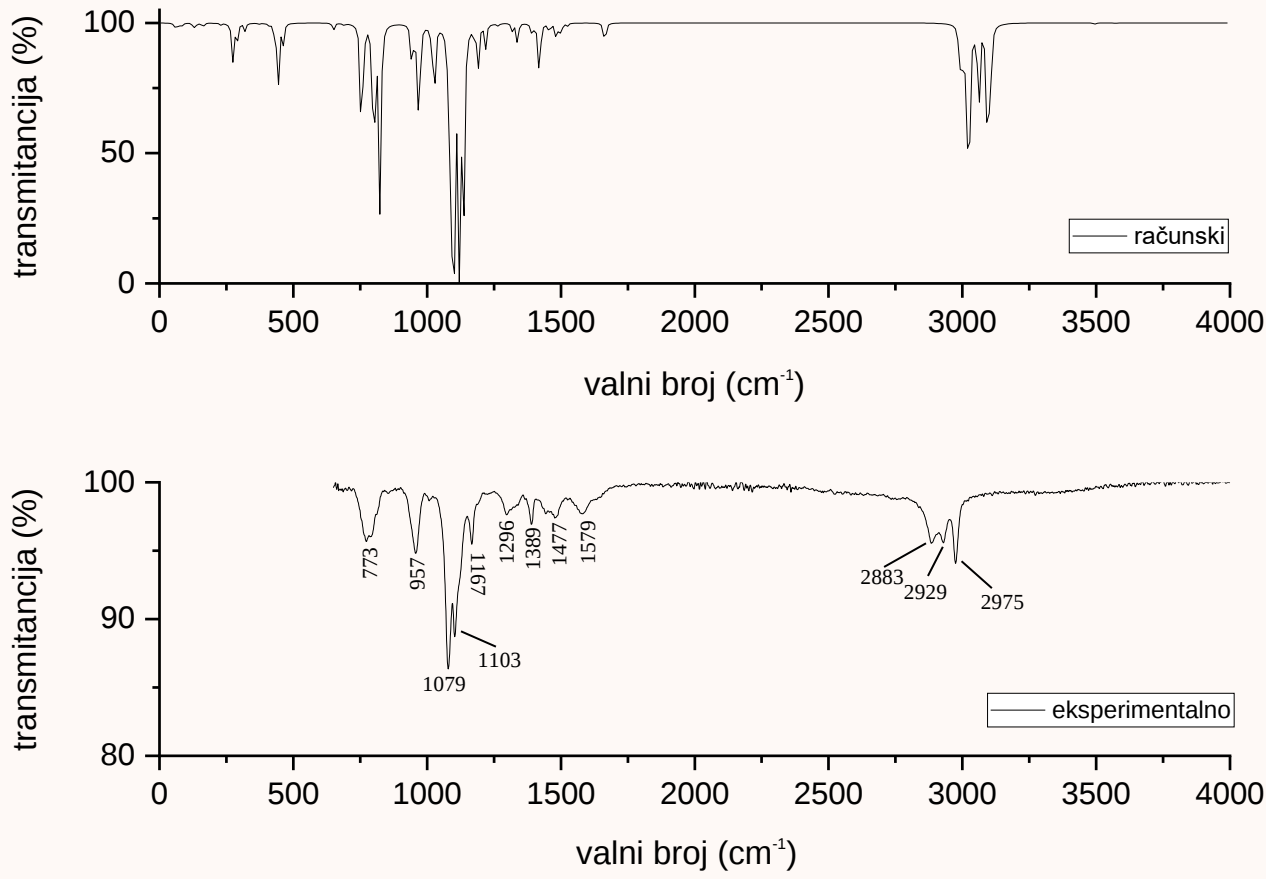
Opažene vrijednosti frekvencija, cm ⁻¹	Izračunate vrijednosti frekvencija, cm ⁻¹	Literaturni podatci frekvencija, cm ⁻¹	Vrsta vibracije
995	1015,76	1000-800	CC istezanje
1046	1087,11	1100 – 1000	CN istezanje
1635	-*	1650	voda
2937	3003,51	3000 – 2850	CH ₂ istezanje
3338	-*	3800 – 3000	voda

* Vrijednost frekvencija nije dio izračuna



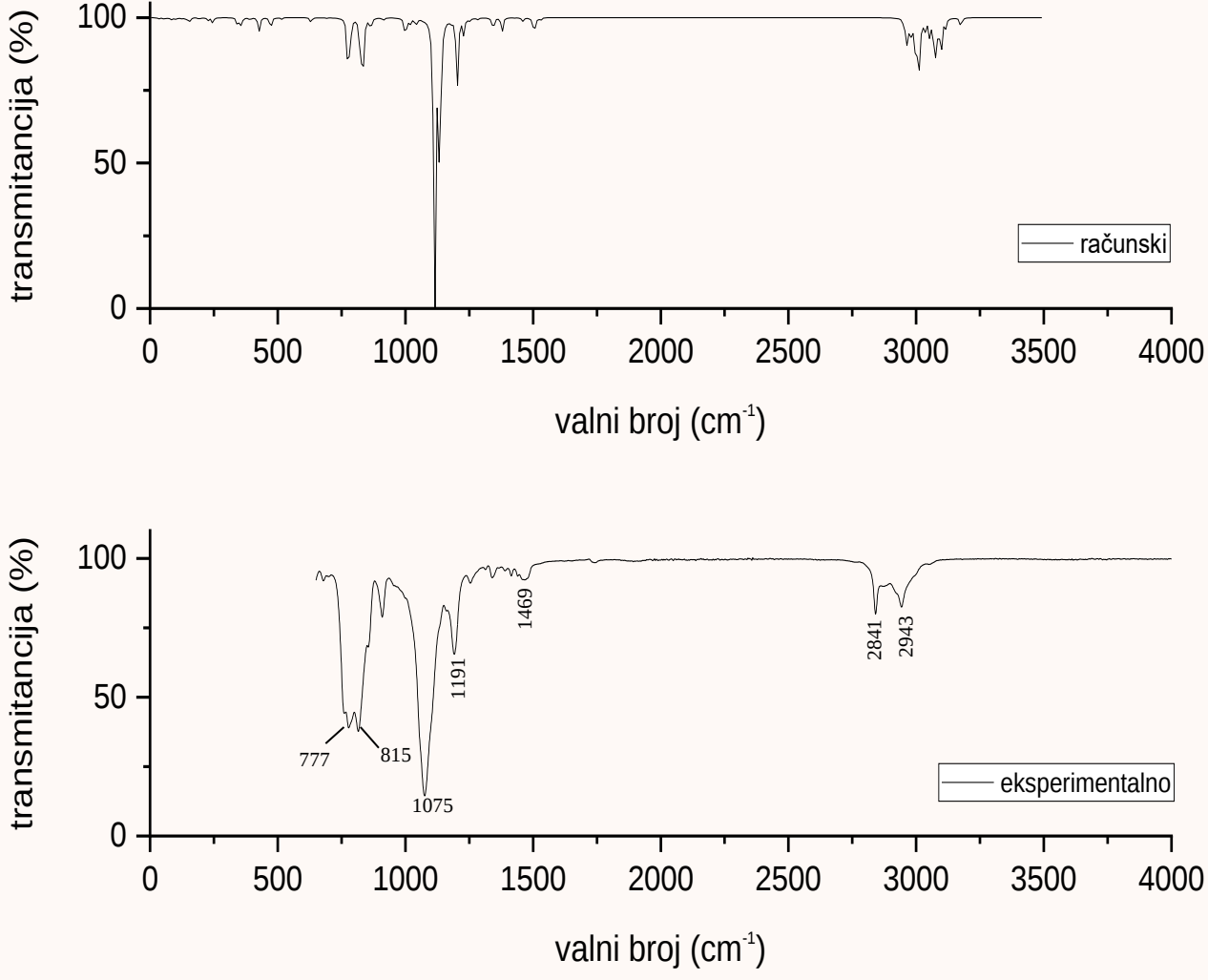
Slika 5. Optimirana struktura APST-a

3-aminopropiltrietoksisilan (APTS)



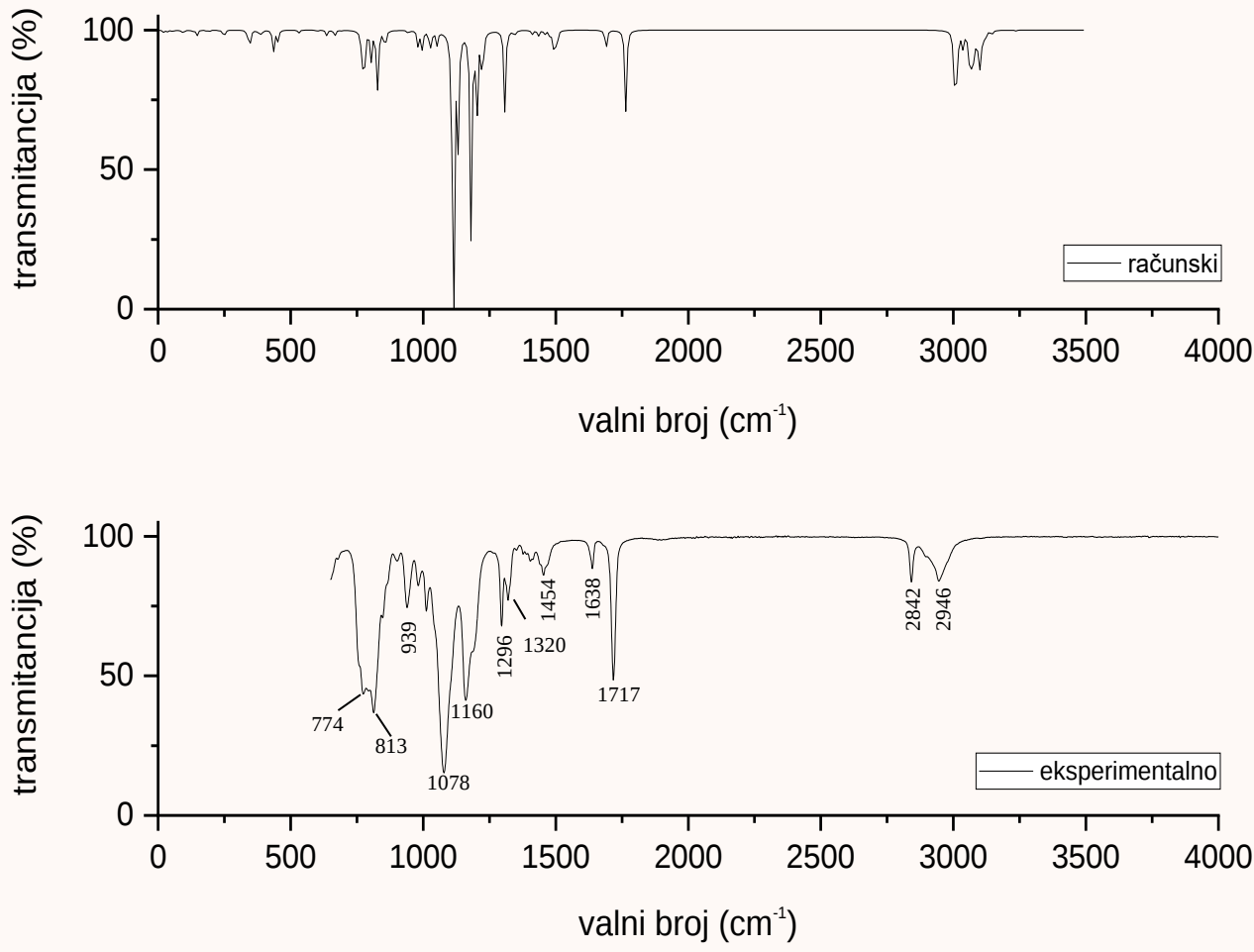
Slika 6. Usporedba računski i eksperimentalno dobivenih IR spektara APTS-a

3-glicidoksipropiltrimetoksisilan (GPTS)



Slika 8. Usporedba računski i eksperimentalno dobivenih IR spektara GPTS-a

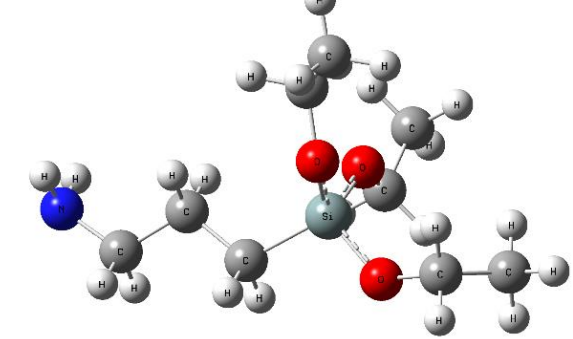
3-metakriloksipropiltrimetoksisilan (MPTS)



Slika 10. Usporedba računski i eksperimentalno dobivenih IR spektara MPTS-a

Tablica 2. Usporedba frekvencija dobivenih eksperimentalno, izračunom te podataka iz literature za APTS

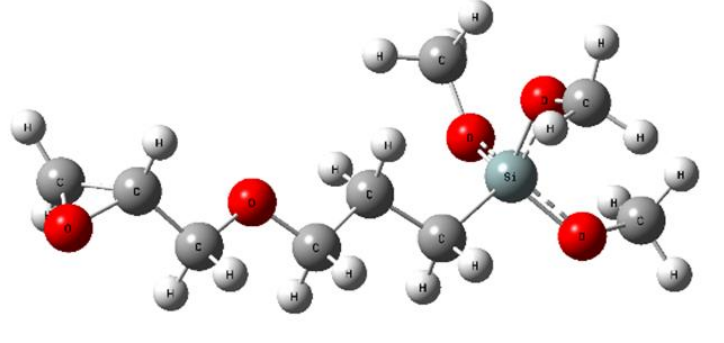
Opažene vrijednosti frekvencija, cm ⁻¹	Izračunate vrijednosti frekvencija, cm ⁻¹	Literaturni podatci frekvencija, cm ⁻¹	Vrsta vibracije
773	824,40	830-750	NH ₂ klačenje
957	964,81	970-940	SiOCC istezanje
1079	1088,20	1075	SiOCC istezanje
1103	1123,24	1100	SiOCC istezanje
1167	1138,49	1170-1160	SiOCC istezanje
1296	1310,32	1475-1365	CH ₂ savijanje
1389	1396,09	1475-1365	CH ₂ savijanje
1443	1456,88	1475-1365	CH ₂ savijanje
1477	1482,09	1475-1365	CH ₂ savijanje
1579	1664,14	1640 – 1550	NH ₂ strizna v.
2883	2989,84	3000 – 2850	CH istezanje
2929	2999,94	3000 – 2850	CH istezanje
2975	3004,09	3000 – 2850	CH istezanje



Slika 7. Optimirana struktura APTS-a

Tablica 3. Usporedba frekvencija dobivenih eksperimentalno, izračunom te podataka iz literature za GPTS

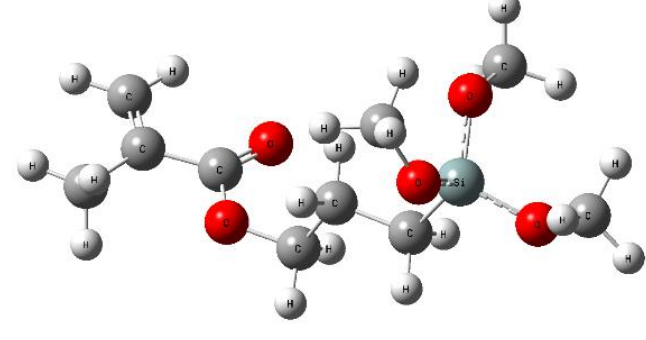
Opažene vrijednosti frekvencija, cm ⁻¹	Izračunate vrijednosti frekvencija, cm ⁻¹	Literaturni podatci frekvencija, cm ⁻¹	Vrsta vibracije
777	782,58	800 – 900	SiO istezanje
815	864,12	950 – 815	CO istezanje
909	1113,34	1100 – 1080	SiOC istezanje
1075	1116,02	1100 – 1080	SiOC istezanje
1191	1201,30	1190	SiOC istezanje
1469	1510,66	1465	CH ₂ strizna v.
2841	2953,64	3000 – 2850	CH ₂ istezanje
2943	2966,41	3000 – 2850	CH ₂ istezanje



Slika 9. Optimirana struktura GPTS-a

Tablica 4. Usporedba frekvencija dobivenih eksperimentalno, izračunom te podataka iz literature za MPTS

Opažene vrijednosti frekvencija, cm ⁻¹	Izračunate vrijednosti frekvencija, cm ⁻¹	Literaturni podatci frekvencija, cm ⁻¹	Vrsta vibracije
774	803,77	900 – 800	SiO istezanje
813	826,75	900 – 800	SiO istezanje
939	996,65	1300 – 1000	CO istezanje
1078	1115,14	1100 – 1080	SiOC istezanje
1160	1204,57	1190	SiOC istezanje
1296	1308,01	1300-1000	CO istezanje
1320	1349,15	1475 – 1365	CH ₂ savijanje
1404	1416,81	1475 – 1365	CH ₂ savijanje
1454	1458,46	1475 – 1365	CH ₂ savijanje
1638	1689,69	1640 – 1625	C=C istezanje
1717	1764,45	1740 – 1715	C=O istezanje
2842	3002,74	3000 – 2850	CH ₃ istezanje
2946	3007,72	3000 – 2850	CH ₃ istezanje



Slika 11. Optimirana struktura MPTS-a

○ **ZAKLJUČAK**

U spektru molekule APTS vidljive su očekivane vrpce amino skupine, istezanja veze ugljik-vodik u propilnom lancu te etoksi skupine. Molekula GPTS pokazuje karakteristične vrpce epoksi prstena, istezanja veza ugljik-vodik te metoksi skupine, dok se iz MPTS spektra jasno dobiva informacija o dvostrukoj ugljikovoj vezi, esterskoj funkcionalnoj skupini, istezanju veza ugljik-vodik propilnog lanca te metoksi skupine. U spektru molekule APST, molekula vode prekrila je vrpce amino skupine te istezanja veza ugljik-vodik.

Usporedivši opažene frekvencije iz navedenih spektara s podacima iz literature, uočavaju se dobra podudaranja, kao i sa vrijednostima frekvencija dobivenih teorijskim izračunom.

Prema uspoređenim podacima, može se utvrditi kako kvantnokemijski izračuni dobro predviđaju vibracijske spektre molekula što je vrlo bitno za unaprjeđenje svojstava raznih materijala.