

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПЛЕКСОВ

«3,6-ДИ-(2,5-ДИМЕТИЛПИРАЗОЛ-1-ИЛ)-1,2,4,5-ТЕТРАЗИН -РАСТВОРИТЕЛЬ»

¹Ившина Н.Н., ²Потемкин В.А., ²Афонькина Е.С., ¹Русинов Г.Л., ¹Ишметова Р.И.,
¹Чарушин В.Н.

¹Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, г.Екатеринбург

²ГОУВПО «Челябинский государственный университет», г.Челябинск

Проведено теоретическое исследование колебательных характеристик комплексов «реагент – растворитель». В качестве объектов исследования выступают комплексы 3,6-ди-(2,5-диметилпиразол-1-ил)-1,2,4,5-тетразина в различных протолитических и апротонных растворителях. Моделирование структур комплексов проводилось методом молекулярной механики с учетом влияния среды. Оптимизация энергии по геометрическим параметрам и расчет спектральных характеристик полученных комплексов проводились полуэмпирическим методом PM3. В результате моделирования получены структуры комплексов с различными межмолекулярными взаимодействиями такими как, водородная связь, а также ван-дер-ваальсово и π -стекинг взаимодействие (рис.1).

¹Ившина Н.Н.
¹Русинов Г.Л.
¹Ишметова Р.И.
¹Чарушин В.Н.
²Потемкин В.А.
²Афонькина Е.С.
¹Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН
²ГОУВПО «Челябинский государственный университет»

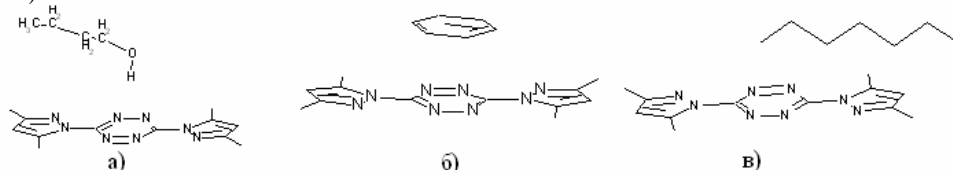


Рис.1. Примеры структур комплексов, полученных в результате моделирования: а)комплекс с водородной связью, б) стекингвый комплекс, в)комплекс с Ван-дер-ваальсовым взаимодействием

Для рассматриваемых систем «реагент-растворитель» имеются экспериментально полученные спектры. Проведено исследование изменения спектральных характеристик изолированных молекул растворителя и 3,6-ди-(2,5-диметилпиразол-1-ил)-1,2,4,5-тетразина при возникновении различного вида связывания в комплексе. Анализ полученных спектров, а также сопоставление экспериментальных и расчетных колебательных характеристик основывался на изменении частот валентных и деформационных колебаний связей, принимающих участие в образовании комплекса «реагент-растворитель».

В результате сопоставления экспериментальных и расчетных спектральных характеристик замещенного тетразина и растворителей со спектральными характеристиками комплекса определено смещение полос, характеризующих колебания связей, принимающих участие в комплексеобразовании.

На основе полученных смещений частот колебаний определены группы, участвующие в образовании всех возникающих межмолекулярных контактов.. Проведен анализ полученных данных в зависимости от строения и функциональных групп растворителей, а также от образующегося межмолекулярного взаимодействия в комплексе «3,6-ди-(2,5-диметилпиразол-1-ил)-1,2,4,5-тетразин -растворитель».

Работа выполнена при финансовой поддержке Суперкомпьютерной программы СКИФ-ГРИД Союзного государства России и Белоруссии, проектов 07-03-96112-р_урал_a, 07-03-96113-р_урал_a и государственной программы поддержки ведущих научных школ (грант № НШ-3758.2008.3).