

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ НА СТРУКТУРУ МОЛЕКУЛЫ, ИСПОЛЬЗУЕМОЙ В КАЧЕСТВЕ СТЕРЖНЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПЕРЕКЛЮЧАТЕЛЯ

¹Тен Г.Н., ¹Саяпин К.А., ¹Кривда И.В., ²Баранов В.И.

¹ Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов
² Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН, Москва

¹Тен Г.Н.,
¹Саяпин К.А.,
¹Кривда И.В.,
²Баранов В.И.

¹Саратовский
государственный
университет им.
Н.Г. Чернышевского,
²Институт геохимии и
аналитической химии им.
В. И. Вернадского РАН

Существует ряд способов управления нековалентными межмолекулярными взаимодействиями в молекулярных переключателях [1,2]. Один из самых распространённых – влияние внешнего воздействия, приводящее к изменению силы межмолекулярного нековалентного взаимодействия.

В работе рассмотрено изменение структуры молекулы-стержня, образующего в состоянии «выключено» водородную связь с кольцом псевдоротахсана. Расчёт был выполнен методом DFT с помощью программы Gaussian-09 и набора базисных функций 6-311++g(d,p) [3]. В качестве модели, позволяющей оценить величину водородной связи «кольцо-стержень», был рассмотрен комплекс из стержня и двух молекул воды (рис. а). Величина водородной связи N...HO двух молекул воды составляет 10,9 ккал/моль. [4].

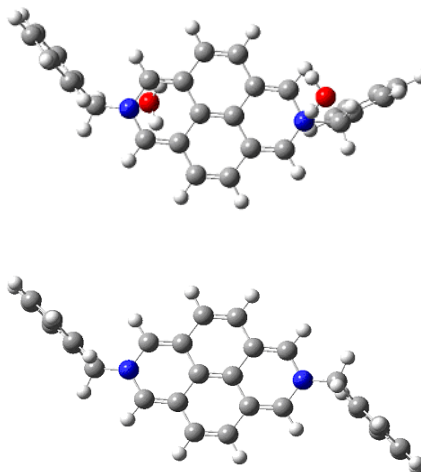


Рис. Молекулярная структура стержня до (а) и после (б) внешнего воздействия

Литература

1. Stoddart J. F., Special issue on molecular machines // Acc. Chem. Res. 2001. V. 34. P. 409-522.
2. Balzani V., Credi A., Venturi M. Molecular devices and machines – A journey into the nano world. Weinheim, Germany : Wiley-VCH, 2003. 494 p.
3. Sauvage J.-P. Structure and Bonding. Munich, Germany: Springer-Verlag GmbH, 2001. V. 99. 281 p.
4. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009. 394 p.