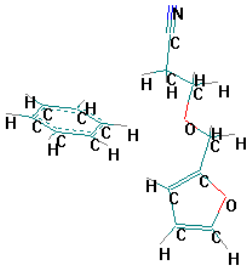
ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО КОМПЛЕКСА $C_6H_6 \cdot N{\equiv}C\text{-}(CH_2)_2\text{-}O\text{-}CH_2{-}C_4H_3O$

Шамсутдинова М.В., Просочкина Т.Р., Кантор Е.А.
Уфимский государственный нефтяной технический университет, г.Уфа

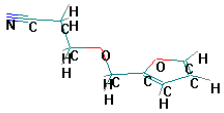
Шамсутдинова М.В.
Просочкина Т.Р.
Кантор Е.А.
Уфимский государственный нефтяной технический университет

Приближение супермолекулы успешно применяется в исследовании межмолекулярных взаимодействий, в том числе и между растворителем и растворенным веществом.

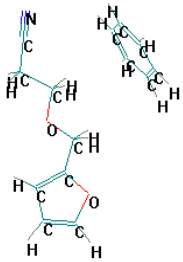
Квантово-химическими методами — полуэмпирическим (AM1) и *ab initio* (STO-3G, 6-31G**) (RHF, Polak-Ribiere) исследован молекулярный комплекс, образованный молекулами растворителя $N{\equiv}C\text{-}(CH_2)_2\text{-}O\text{-}CH_2{-}C_4H_3O$ (**1**) и бензола (**2**). Рассмотрены все возможные подходы молекулы (**1**) к молекуле (**2**).



(3)



(4)



(5)

Выявлено, что наиболее устойчивым при расчете методом AM1 является комплекс (**3**) ($\Delta\Delta H_f^{\circ}$= -1,138 ккал/моль), а при неэмпирических расчетах — комплексы (**4**) ($\Delta E_{полн.}$= -0,944 ккал/моль (STO-3G)) и (**5**) ($\Delta E_{полн.}$= -1,847 ккал/моль (6-31G**)).

Литература

1. HyperChem 6.0 Trial version. www.hyper.com
2. *Schmidt M.W., Baldridge K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.J.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, Montgomery J.A..* // J.Comput.Chem.- 1993.- v.14.- p.1347-1363.