



- **Исследование влияния водородной связи на структуру и ИК спектр биосоединений методом молекулярного моделирования.
Трифенилфосфит, салол**

Бабков Л.М., Давыдова Н.А., Титоренко Д.С., Перетокина (Ивлиева) И.В.,

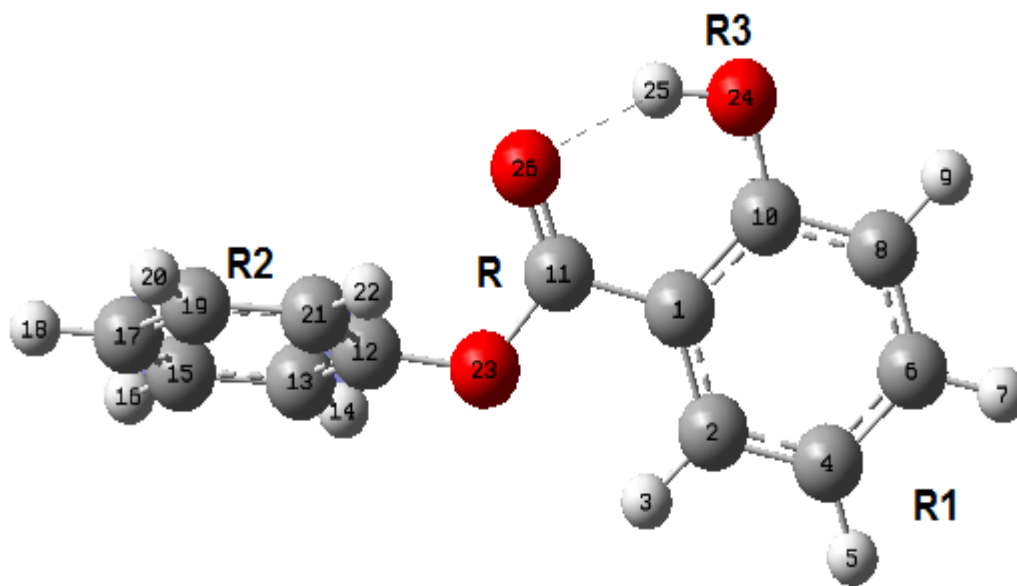
Цель работы:

Исследование влияния водородной связи на физические и химические свойства на основе молекулярного моделирования с использованием информационных технологий

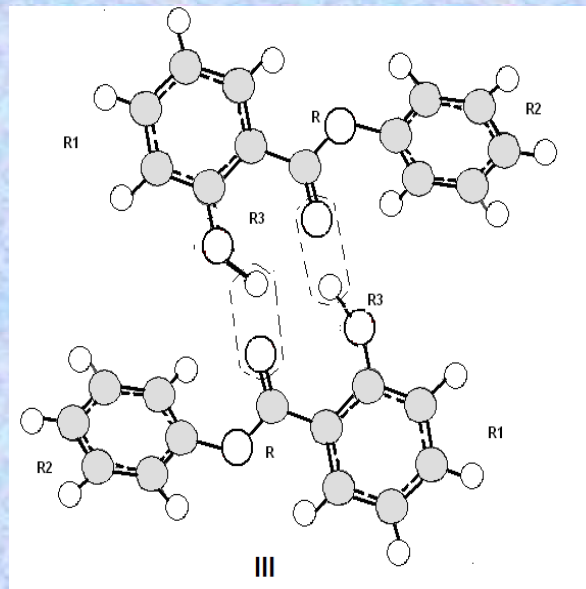
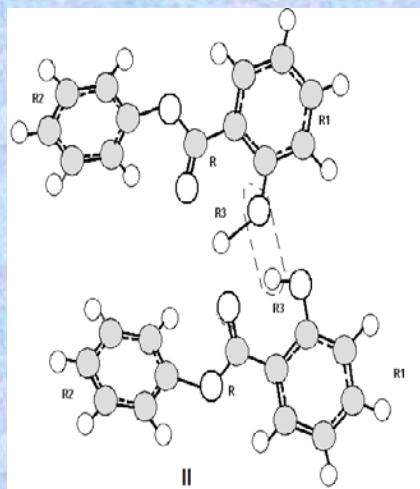
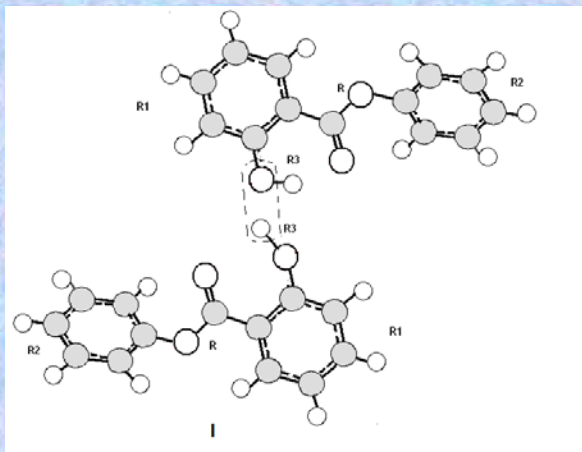
Задачи

- Построение структурно-динамических моделей изолированных молекул на основе методов молекулярного моделирования
- Предварительная интерпретация ИК спектров на основе полученных результатов.
- Построение структурно-динамических моделей комплексов с водородной связью.
- Анализ результатов квантово-химических расчетов
- Установление строения образцов вещества на основании результатов расчета

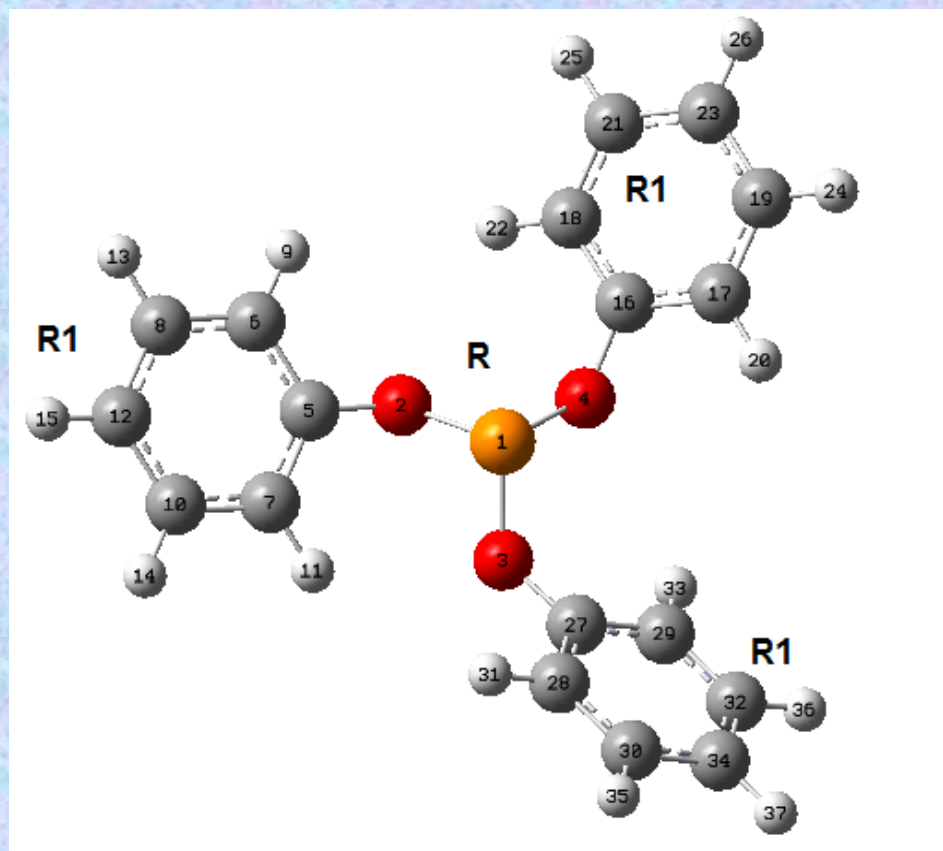
Молекула салол



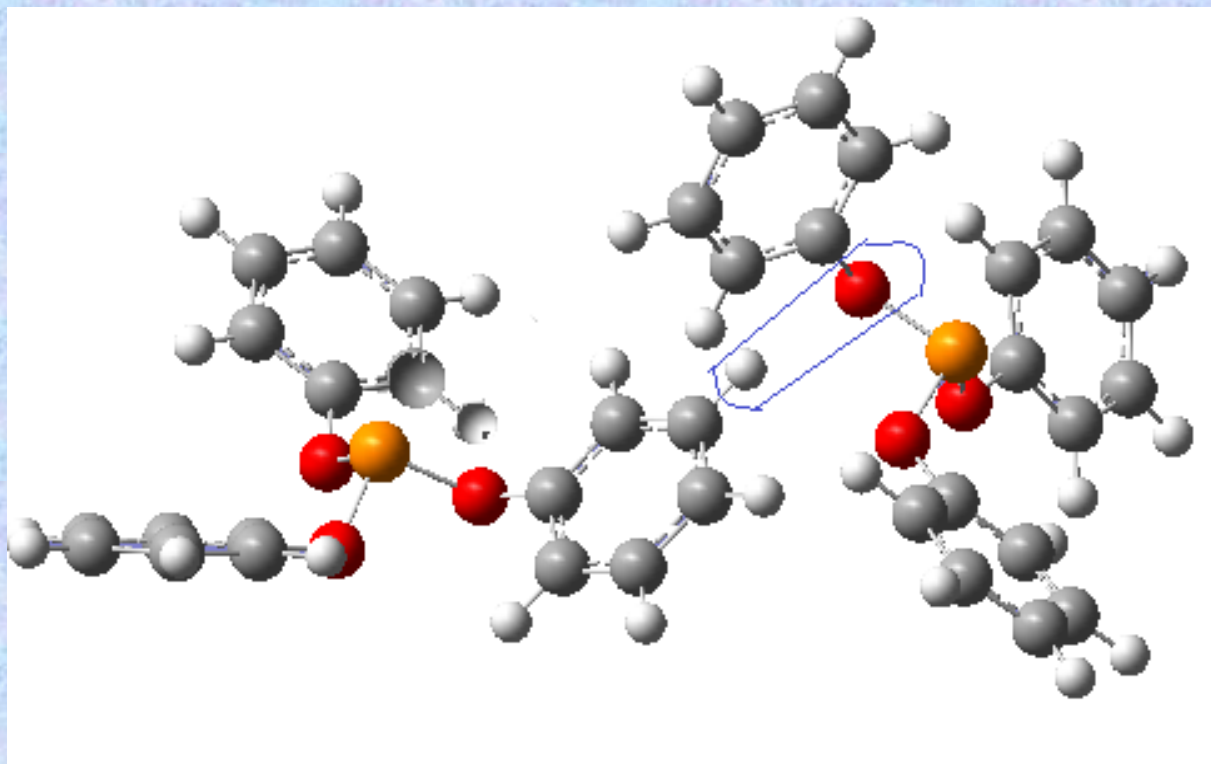
Димеры салола



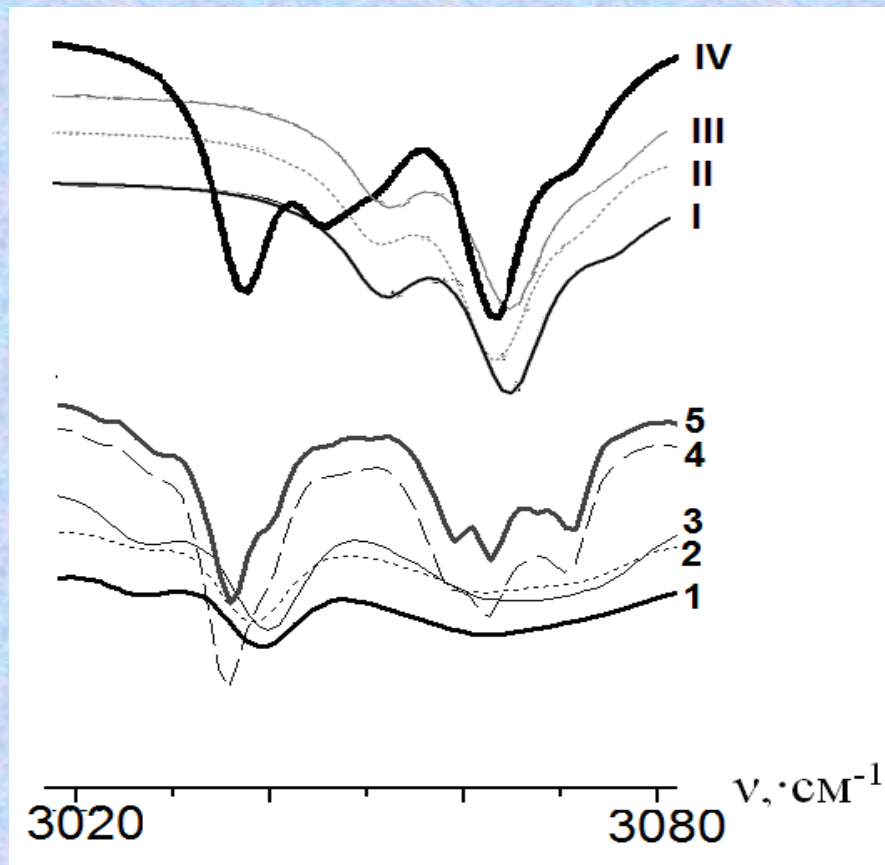
Молекула трифенилфосфита



Димер трифенилфосфита

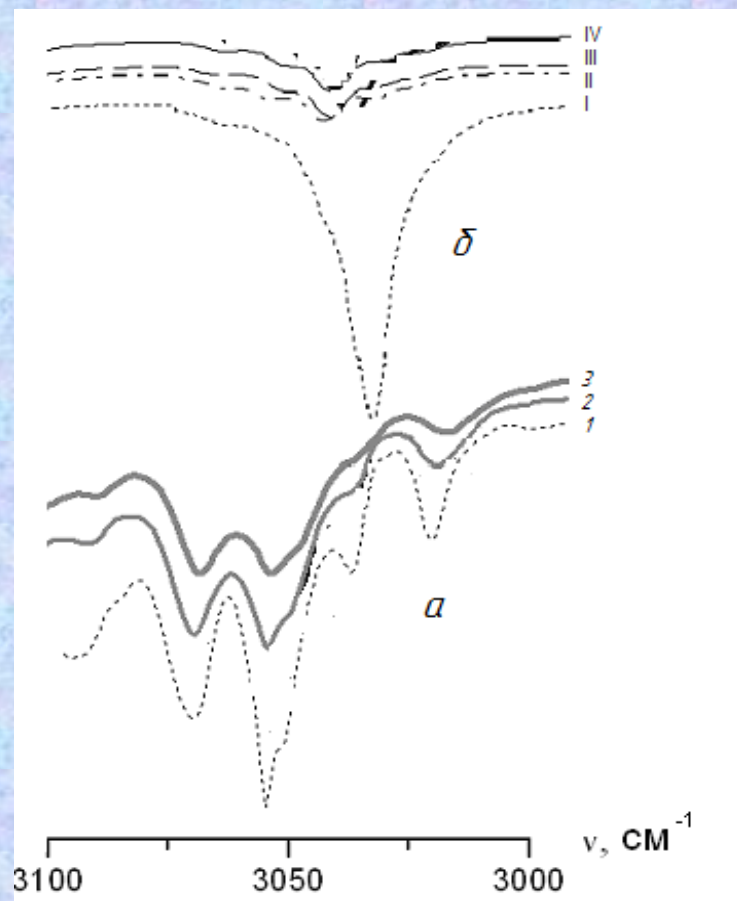


Рассчитанные и измеренные ИК спектры трифенилфосфита



(1-жидкость, 2-стекло, 3-кварц, 4-металлоадсорбционная фаза, 5-адсорбционная фаза) и теоретические спектры конформеров I, II, III и H-комплекса (IV) ТФФ

Рассчитанные и измеренные ИК спектры трифенилфосфита



ИКС салола: измеренные (а) при 1 К (1), 230 К (2), 298 К (3); рассчитанные (б) для конформеров I-IV

Заключение

- С помощью метода ТФП ВЗLYP/6-31G(d) построены структурно-динамические модели молекул исследуемых соединений и их Н-комплексов.
- Дана интерпретация ИК спектров замещённых салола, трифенилфосфита
- Установлено и оценено влияние водородной связи на их структуру и ИК спектры.
- Установлено строение образцов исследуемых соединений.

Благодарю за
внимание!!
