

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
СПЕКТРА КОМБИНАЦИОННОГО  
РАССЕЯНИЯ СВЕТА  
4-[(4-ДЕЦИЛОКСИ)БЕНЗОИЛОКСИ]-3-  
МЕТОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ**

<sup>1</sup>Брусилковский Ю.Э., <sup>1</sup>Новикова Н.С.,  
<sup>1</sup>Килименчук Е.Д., <sup>2</sup>Михайлов Г.П.,  
<sup>2,3</sup>Кузнецов В.В.

<sup>1</sup>Физико-химический институт им. А.В. Богатского  
НАН Украины, Одесса, e-mail: kuzmaggy@mail.ru;

<sup>2</sup>Уфимский государственный авиационный  
технический университет, Уфа;

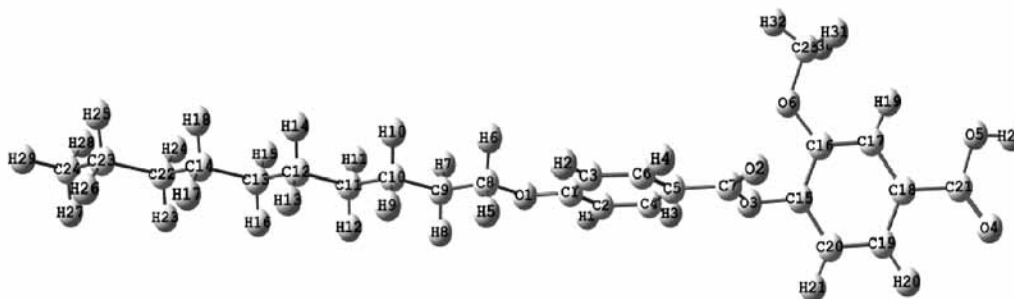
<sup>3</sup>Уфимский государственный нефтяной технический  
университет, Уфа

Замещенные бензоилоксикарбоновые кислоты обладают мезоморфными свойствами и формируют люминесцентные комплексы с редкоземельными элементами [1]. Поэтому эти соединения перспективны для внедрения в качестве активных компонентов жидкокристаллических дисплеев [2-4]. Целью настоящей работы является компьютерное моделирование спектра комбинационного рассеяния света 4-[(4-децилокси)бензоилокси]-3-метоксибензойной кислоты (**I**) с помощью неэмпирического квантово-химического приближения HF/6-31+G(d) (пакет GAUSSIAN 03 [5]).

При определении расчетных колебательных мод использовалась процедура масштабирования с коэффициентом 0.8953, соответствующим уровню теории HF/6-31+G(d) [6].

Анализ распределения потенциальной энергии (РПЭ) по естественным колебательным координатам (валентным связям и углам, двугранным углам и координатам, соответствующим выходу связей из плоскости молекулы), а также анализ формы нормальных колебаний позволяет установить степень участия каждой колебательной координаты в данной полосе КР и показывает, в каком структурном элементе локализована потенциальная энергия данного колебания. В таблице представлены рассчитанные и экспериментальные частоты, интенсивности полос КР и РПЭ (в скобках указан процентный вклад координаты в полную потенциальную энергию колебания). Анализ РПЭ показывает, что большинство колебаний являются существенно смешанными.

Рассмотренные колебательные частоты являются отличительной спектральной характеристикой замещенных 4-бензоилоксикарбоновых кислот и, наряду с ранее опубликованными данными [7, 8] могут быть использованными для идентификации и подтверждения структуры соединений данного класса.



I

Основные колебательные частоты соединения I

Отнесение (вклад в РПЭ, %)	Расч. $\nu$ , $\text{cm}^{-1}$	$\nu$ , $\text{cm}^{-1}$ (эксп.)	I, $\text{\AA}^4/\text{a.e.m}$
$\nu$ C17H19 (71)	3077	3100	121
$\nu$ C19H20 (60) + $\nu$ C20H21 (18)	3059	3080	99
$\nu$ C3H2 (27) + $\nu$ C4H3 (25) + $\nu$ C6H4 (19)	3056	3086	201
$\nu$ C25H30 (35) + $\nu$ C25H31 (34) + $\nu$ C25H32 (16)	2876	2850	114
$\nu$ C14H17 (10) + $\nu$ C14H18 (10)	2849	2886	171
$\nu$ C23H25 (10) + $\nu$ C23H26 (10)	2850	2851	82
$\nu$ C21O4 (20) + $\delta$ C21O5H22(10)	1778	1741	112
$\nu$ C7O2 (18)	1772	1732	102
$\delta$ H27C25H29 (13) + $\delta$ H28C25H29 (13)	1465	1426	12
$\delta$ O4C21O5 (10)	1353	1330	37
$\delta$ O6C25O5H32 (12)	1192	1167	14
$\delta$ O6C25H30 (15) + $\delta$ O6C4C25H31 (13)	1154	1134	4
$\tau$ H20C19C20H21 (16)	985	888	2

Примечание.  $\nu$  – валентное,  $\delta$  – деформационное,  $\tau$  – торсионное колебания.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках базовой части госзадания образовательным организациям высшего образования.*

**Список литературы**

1. Деркач Л.Г., Теслюк О.И., Новикова Н.С., Дога П.Г., Яркова М.Ю., Мешкова С.Б. // ЖОХ. 2014. Т.84, вып. 7. С.1095.
2. Binnemans K., Görlle-Walrand Ch. // Chem. Rev. 2002. V.102. P.2303.
3. Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Кондратьева Р.В., Мешкова С.Б., Тополева З.М. // ЖПХ. 2011. Т.84, вып.6. С.954.
4. Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Яркова М.Ю., Мешкова С.Б., Тополева З.М. // ЖПХ. 2008. Т.81, вып.8. С.1528.
5. Gaussian 03, Revision B 03. Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
6. Scott P.A., Radom L. // J. Phys. Chem., 1996. V.100. N 41. P.16502.
7. Брусиловский Ю.Э., Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Михайлов Г.П., Кузнецов В.В. // Международный журнал экспериментального образования. 2015. № 2, часть 1. С.42.
8. Брусиловский Ю.Э., Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Михайлов Г.П., Кузнецов В.В. // Международный журнал экспериментального образования. – 2015. – № 4, часть 2. С.401.

**ВЛИЯНИЕ НАНОТРУБКИ НА КОНФОРМАЦИОННУЮ ПРЕДПОЧТИТЕЛЬНОСТЬ МОЛЕКУЛ СО СВЯЗЬЮ БОР-БОР. ДИБОРАН,  $B_2H_4$**

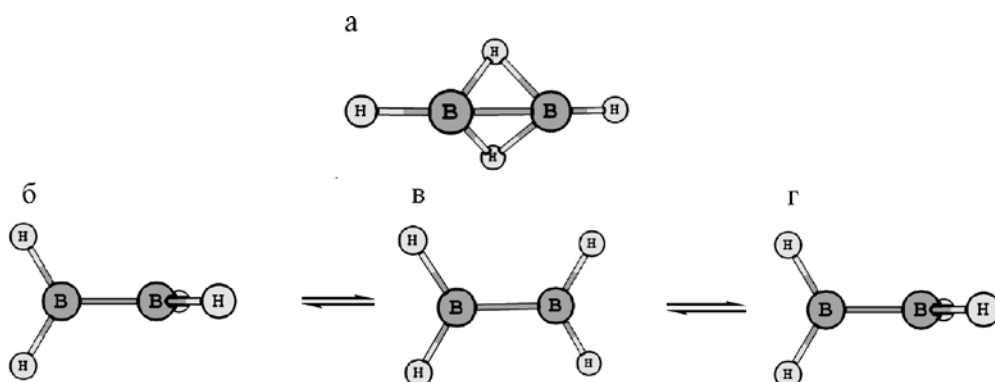
Кузнецов В.В.

*Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа,  
e-mail: kuzmaggy@mail.ru;*

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа*

Нанообъекты, в частности, фуллерены и нанотрубки оказывают влияние на конформационные характеристики инкапсулированных молекул и существенно меняют свойства последних [1]. В частности, недавно было показано, что молекула этана в нанотрубках пребывает в заслоненной конформации [2]. В настоящей работе с помощью приближения РВЕ/3ζ в рамках программного обеспечения ПРИРОДА [3] впервые исследовано конформационное поведение молекулы диборана,  $B_2H_4$  (I) помещенной во внутреннюю полость модельной нанотрубки  $C_{96}H_8$ .

Для самого диборана возможна реализация трех форм: неклассической (а, главный минимум), ортогональной (б, локальный минимум) и планарной (в, переходное состояние между двумя минимумами б, табл.).



Данные литературы подтверждают полученные расчетные результаты [4]. Однако для инкапсулированной молекулы диборана I в нанотрубке положение меняется.

