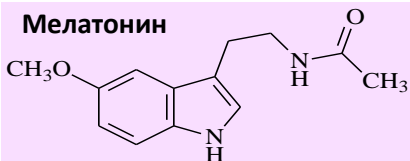


Влияние поворотной изомерии на колебательные спектры ряда конформационно-ограниченных аналогов мелатонина

Давыдова И.Б., Зефирова О.Н., Сенявин В.М., Курамшина Г.М.

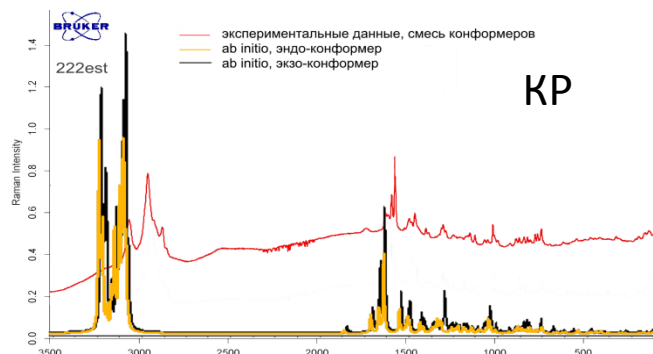
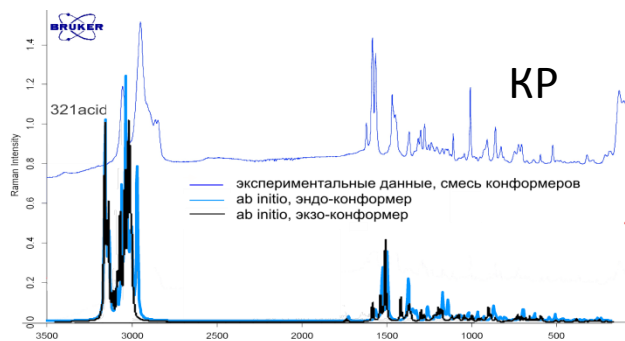
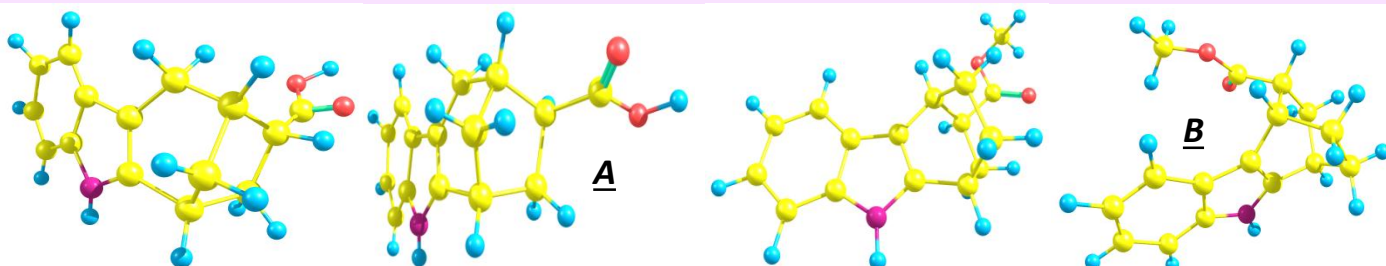
Химический факультет МГУ им. Ломоносова.

Мелатонин



Цель работы: исследование строения и колебательных спектров ряда конформационно ограниченных аналогов мелатонина методами колебательной спектроскопии и квантовой химии, нахождение областей аналитических частот для идентификации спектральными методами.

Строение, ИК и КР спектры наиболее устойчивых конформеров 6-карбокси (индоло[2,3-*b*])бицикло[3.2.1]окт-2-ена (**A**) и 5-метоксикарбонил-(индоло[2,3-*b*])бицикло[2.2.2]окт-2-ена (**B**).



Результаты работы:

- Исследованы спектры ИК поглощения и КР 6-карбокси(индоло[2,3-*b*])бицикло[3.2.1]окт-2-ена **A** и 5-метоксикарбонил-(индоло[2,3-*b*])бицикло[2.2.2]окт-2-ена **B**.
- Получены оптимизированные структуры и рассчитаны гармонические силовые поля и частоты колебаний устойчивых конформеров **A** и **B**. В качестве базового уровня теории для интерпретации полученных экспериментальных спектров выбран VVP86/TZVP.
- Предложена детальная интерпретация спектров и области аналитических частот.