



Тверской государственный университет
Тверской государственный медицинский университет
**КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
КОНФОРМЕРОВ ДИВИНИЛА**

Е.М. Чернова, В.Н. Ситников, Ю.Д. Орлов, В.В. Туровцев

Актуальность

Электронная плотность ($\rho(r)$) относится к уникальным параметрам соединения, или системы ядер и электронов, в которой сосредоточена информация обо всех его (ее) свойствах. Детальное исследование распределения электронной плотности (электронного строения) конформеров химического соединения позволяет провести оценку и сравнение внутримолекулярных взаимодействий. Кроме того дает возможность выявления причин различия энергетических свойств этих конформаций.

Цель:

Анализ электронного строения конформеров дивинила в рамках квантовой теории атомов в молекулах

Методы исследования:

- Равновесное строение цис- и транс- дивинилов определено с помощью пакета прикладных программ Gaussian'03 методом B3LYP в базисе 6-311++g(3df,3pd) 6d 10f
- Разбиение полученной электронной плотности молекул на атомы осуществлялось с использованием программы AIMALL, основанной на теории атомов в молекуле (QTAIM).

Результаты исследования

Транс-дивинил				
Интегральные параметры,				
	CH2	CH	CH	CH2
Q, а.е.	-0,010	0,010	0,010	-0,010
E, а.е.	-39,307	-38,721	-38,721	-39,307
V, Å ³	29,59	19,77	19,77	29,59
Параметры связевых путей				
	CH2=CH	CH-CH	CH=CH2	
L, Å	1,334	1,453	1,334	
ρ	0,352	0,284	0,352	
$\nabla^2\rho$	-1,120	-0,787	-1,120	
ϵ	0,314	0,086	0,314	

Цис-дивинил				
Интегральные параметры				
	CH2	CH	CH	CH2
Q, а.е.	-0,001	0,001	0,001	-0,001
E, а.е.	-39,306	-38,719	-38,719	-39,307
V, Å ³	29,35	19,85	19,85	29,35
Параметры связевых путей				
	CH2=CH	CH-CH	CH=CH2	
L, Å	1,332	1,466	1,332	
ρ	0,352	0,277	0,352	
$\nabla^2\rho$	-1,119	-0,750	-1,119	
ϵ	0,324	0,073	0,324	

Выводы:

1. Полная энергия транс-конформации ниже полной энергии цис-конформации. (на 15,75 кДж.моль)
2. Объем молекулы транс-дивинила больше объема цис-дивинила (на 0,32 Å³)
3. Параметры длины двойной связи в обеих конформациях совпадают с экспериментальными данными.
4. Длина рассчитанной одинарной связи зависит от конформации молекулы и меньше экспериментальных данных на 0,090 Å (для транс-конформера) и на 0,077 Å (для цис-конформера)