

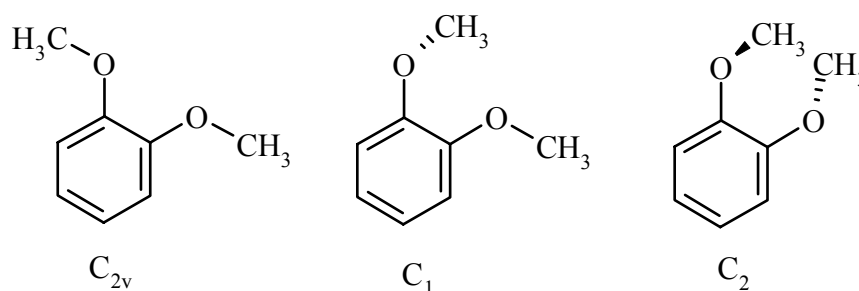
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ ВЕРАТРОЛА МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ЭЛЕКТРОНОГРАФИИ СОВМЕСТНО С КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ РАСЧЕТАМИ

Зверев В.Г., Карасев Н.М., Рыков А.Н., Вилков Л.В, Оберхаммер Х..

*Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, кафедра физической химии,
Институт физической и теоретической химии, университет Тюбинген, Германия.*

Молекула орто-диметоксибензола (вератрола) представляет собой уникальный случай для исследования внутреннего вращения метокси-групп и поворотных изомеров. Папаверин, денопамин, верапамил и глауцин содержат в своей структуре целый фрагмент молекулы вератрола и находят свое применение в медицине.

Квантово-химические расчеты, проведенные двумя методами (B3LYP/6-31G(d) и MP2/6-31G*), предсказали три устойчивых конформера, названных в соответствии с их группой симметрии.



Методы расчета дают различный мольный состав (%) при температуре эксперимента (333 К): B3LYP – C_{2v} (42.9), C₁ (42.4) и C₂ (14.7), MP2 - C₁ (45.0), C₂ (45.0) и C_{2v} (10.0). В ходе электронографического анализа также были определены структурные параметры конформеров (средние значения) (C_{2v}/C₁/C₂): $r_g(C_{sp2}-C_{sp2})=1.401(3)^*/1.400(3)/1.396(3)$, $r_g(C_{sp2}-O)=1.366(3)/1.375(3)/1.377(3)$, $r_g(C_{sp3}-O)=1.366(3)/1.368(3)/1.377(3)$, $r_g(C-H)=1.128(10)/1.124(8)/1.132(9)$ Å. Все три конформера хорошо согласуются с данными электронографии, но лучшее согласие имеет конформер C₁.

Устойчивость конформера C_{2v} определено обусловлена сопряжением электронных пар атомов О с бензольным кольцом. Существование конформеров C₁ и C₂, вероятно, вызвано наличием одной (C₁) и двумя (C₂) водородными связями между атомом Н одной метокси-группы и атомом О другой.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ-ННИО 05-03-04000.