

**КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ
МОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛАСТЕРОВ ФОСФОРСОДЕЖАЩИХ МОЛЕКУЛ
С МОЛЕКУЛАМИ АЦЕТОНА. РАСЧЕТЫ КОНСТАНТ МАГНИТНОГО
ЭКРАНИРОВАНИЯ ЯДЕР ФОСФОРА ^{31}P В РАСТВОРАХ**

Р. М. Аминова, Э. Р. Мартыничук, А. В. Аганов, Д. В. Чачков

Казанский (Приволжский) федеральный университет

В настоящее время, в силу необычайно широких экспериментальных возможностей, спектроскопия ЯМР стала одним из основных методов изучения структуры и динамики вещества в растворе и в твердой фазе. В связи с этим в последние годы вновь резко возрос интерес к теоретическим вычислениям констант ядерного магнитного экранирования на неэмпирическом уровне. Параметры ЯМР отражают малейшие изменения в электронной и пространственной структуре молекулярной системы и зависят от многих факторов, включая внутри- и межмолекулярные взаимодействия.

Целью данной работы является, с одной стороны, анализ возможностей современных методов квантовой химии и молекулярной динамики для моделирования структуры молекулярных кластеров из молекул растворенного вещества и сольватной оболочки растворителя. Другое важное направление исследований – проведение расчетов констант ядерного магнитного экранирования σ и проблема предсказания химических сдвигов ядер фосфора ^{31}P в сольватированных молекулярных системах. Такая задача непосредственно связана с трудной проблемой интерпретации экспериментальных значений химических сдвигов и особенно актуальна в свете современных исследований взаимосвязи «структура-свойство» в супрамолекулярных системах и наноструктурах, а также при изучении биофизических и биохимических процессов в биологии и медицине.

В работе проведены расчеты констант σ фосфора ^{31}P в молекулярных кластерах из производных фосфина и бетаина с разным числом молекул ацетона, используя смешанные дискретно-континуальные описания с применением методов квантовой механики и молекулярной механики, различные варианты поляризованной континуальной модели. Изучается возможность использования для этих целей методов молекулярной динамики. Вычисления проведены в рамках теории функционала плотности DFT с использованием калибровочно-инвариантных атомных орбиталей и базисных наборов 6-31G(d,p) и 6-31++G(d,p).

Работа поддержана грантом НШ-6267.2010.2.