

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ЗАМЕЩЕННЫХ НАФТАЗАРИНА

Е.А. Джалмухамбетова¹⁾, Т.А. Шальнова¹⁾, М.Д. Элькин²⁾

¹⁾*Астраханский государственный университет,*

²⁾*Саратовский государственный технический университет*

К соединениям, содержащим нафтазариновый фрагмент, относятся такие биологически активные соединения как спиназарин, этилспиназарин, эхинохром. Информация об их структуре является основой стандартизации соответствующих лекарственных препаратов кардиологического и офтальмологического действия.

Для расчетов геометрической структуры и колебательных состояний исследуемых соединений предлагается использовать метод функционала плотности DFT/B3LYP, как хорошо зарекомендовавший себя при построении структурно-динамических моделей ряда циклических и полициклических соединений. Достоверность проведенных предсказательных расчетов может быть подтверждена хорошим совпадением экспериментальных и расчетных данных для тех соединений нафтазаринового ряда, для которых имеется надежная интерпретация колебательных спектров, отражающих внутримолекулярную динамику молекул. К числу таких соединений относятся 1,4-нафтохинон и нафтазарин.

Апробированная методика использована для построения структурно-динамических моделей соединений, содержащих нафтазариновый фрагмент. На основании модельных расчетов предложена интерпретация полос в низкочастотном диапазоне колебательного спектра, подтверждено наличие внутримолекулярного взаимодействия (водородная связь) между фрагментом C=O и соседней гидроксильной группой второго сопряженного кольца нафтазарина. Смещение полосы валентного колебания гидроксильного фрагмента $\sim 300 \text{ см}^{-1}$, в зависимости от соединения. Показано, что учет ангармонизма колебаний приводит к лучшему согласию с экспериментом.

Модельные расчеты этил- и гидроксизамещенных нафтазарина выполнены в различных атомных базисах. Сделан вывод, что предпочтение следует отдать базисам 6-311G**, 6-311+G**, 6-311++G**, а для качественной оценки ангармонического смещения частот можно использовать процедуру масштабирования.