

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ И СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОДУКТОВ ГИДРОЛИЗА G-АГЕНТОВ

А.С. Кладиева¹⁾, Е.Ю. Степанович¹⁾, М.Д. Элькин²⁾

¹⁾*Астраханский государственный университет,*

²⁾*Саратовский государственный технический университет*

Гидролиз является одной из технологий ликвидации зарина, зомана и циклозарина (GB, GD, GF-агентов) – известных химически и биологически активных соединений. На первой стадии этого технологического процесса атом фтора токсичного фрагмента $OP(F)CH_3$ в исходных соединениях замещается на гидроксильную группу OH . На второй стадии фрагмент $OP(OH)CH_3$ замещается атомом водорода. G-агент превращается в метилфосфовую кислоту.

Использование методов колебательной спектроскопии для контроля указанного технологического процесса требует надежной интерпретации колебательных спектров продуктов гидролиза G-агентов. Для решения этой задачи и построения структурно-динамических моделей соединений предлагается использовать результаты неэмпирических квантовых расчётов параметров адиабатического потенциала и конформационных свойств соединений методами DFT/B3LYP/311G**(+,++).

Исходные конформационные модели молекул исследуемых соединений задавались различными значениями двугранных углов между парафиновым и токсичным фрагментами, соединёнными мостиком $CO-P$.

Для идентификации фосфорсодержащего фрагмента G-агентов и продуктов их гидролиза следует использовать интенсивные полосы ИК спектра в диапазоне $700-1300\text{см}^{-1}$, интерпретированные как валентные колебания связей Q_{PO} и Q_{PC} , двойной связи $Q_{P=O}$, а также сильную по интенсивности в ИК и КР спектрах полосу $\sim 3600\text{см}^{-1}$, интерпретированную как валентное колебание q_{OH} . Однако наличие межмолекулярного взаимодействия, проявляющегося в эксперименте для конденсированных состояний вещества, смещает эту полосу в низкочастотную область на величину $\sim 300\text{см}^{-1}$. Идентификация конформеров соединений по положению и интенсивностям колебательных полос затруднена.