

**ИЗУЧЕНИЕ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В ГОМОЛОГИЧЕСКИХ РЯДАХ
n-НИТРОАЛКАНОВ И *n*-АЛКАНТИОЛОВ – *гош*-ЭФФЕКТ,
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОЛЧКОВ И ПЕРЕНОСИМОСТЬ СВОЙСТВ
В.В. Туровцев., М.Ю. Орлов, Р.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов
Тверской государственной университет**

Изучение конформационного разнообразия соединений, в том числе поиск глобальных и локальных минимумов, происходит в рамках исследования внутреннего вращения. Полученные потенциальные функции $V(\varphi)$ и зависимости вращательной постоянной $F(\varphi)$ позволяют рассчитать свойства конформеров.

Нами было проведено исследование внутреннего вращения в гомологических рядах *n*-нитроалканов и *n*-алкантиолов. Были найдены 38 функций $V(\varphi)$ и $F(\varphi)$ для всех внутренних вращений в молекулах $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{NO}_2$ и $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{SH}$, $n \leq 7$. Для каждой $V(\varphi)$ и $F(\varphi)$ отдельно изучались все возможные минимумы и переходные состояния. Количество слагаемых разложения $V(\varphi)$ определялось малостью невязки - среднеквадратичной разностью между значениями расчетных точек и ординатами аппроксимирующих функций. Для начальных молекул была исследована зависимость значений барьеров и коэффициентов $V(\varphi)$ и $F(\varphi)$ от метода учета электронной корреляции.

Было показано, что в ряде молекул наблюдается «взаимодействие волчков» («взаимодействие движений»). Т.е. при вращении волчка вокруг одинарной связи относительно остова наблюдается согласованное движение внутри составляющих их атомных группировок вокруг иных одинарных связей. Данное вращение должно описываться многомерными потенциальными поверхностями. Было показано, что максимальная размерность функций V равна трем. Наряду с «взаимодействием волчков» в *n*-алкантиолах и в *n*-нитроалканах отмечен *гош*-эффект – равенство энергий *гош*⁺, *гош*⁻ и *транс* конформеров. Таким образом, молекулы указанных рядов представляют собой смесь трех изомеров.

Было обнаружено, что $V(\varphi)$ обладают переносимостью. Т.е. величины барьеров и значения коэффициентов совпадают с таковыми для соответствующих группировок как в *n*-алкантиолах и *n*-нитроалканах, так и в *n*-алканах. Все указанные явления позволяют моделировать данную степень свободы в многоатомных молекулах и определять соответствующие свойства.