

Особенности проведения конформационного анализа молекул в возбужденных электронных состояниях: для чего нужно определять сечения поверхностей потенциальной энергии и как это делать?

Д.х.н., профессор Годунов И.А.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

Химический факультет

Молекулы, существующие в виде нескольких конформеров, называются конформационно нежесткими. Особенности конформационного строения молекул могут сильно влиять на ряд важнейших свойств молекул и веществ: электрические, оптические, термодинамические свойства, реакционную способность (в том числе биологическую активность), механизмы химических (в том числе фотохимических) реакций и другие.

Для прогнозирования свойств молекул и веществ, зависящих от конформационного строения молекул, необходимы такие данные, как:

- число и тип конформеров,
- относительное содержание конформеров;
- геометрические параметры конформеров,
- колебательные частоты конформеров,
- если рассматривается строение молекул в возбужденных электронных состояниях, то энергии этих электронных состояний,
- разности энергий конформеров и потенциальные барьеры конформационных переходов.

Такие данные могут быть получены в результате проведения конформационного анализа теоретическими и экспериментальными методами, которые, как правило, взаимно дополняют друг друга.

Проведение конформационного анализа молекул в возбужденных электронных состояниях является задачей повышенной сложности как в теоретической, так и в экспериментальной частях.

Рассматриваются особенности проведения теоретических и экспериментальных исследований строения и конформационной динамики молекул в возбужденных электронных состояниях, цель и методы определения сечений поверхности потенциальной энергии.

Приводятся примеры на основе собственных исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 16-03-00794).