



ИХР РАН



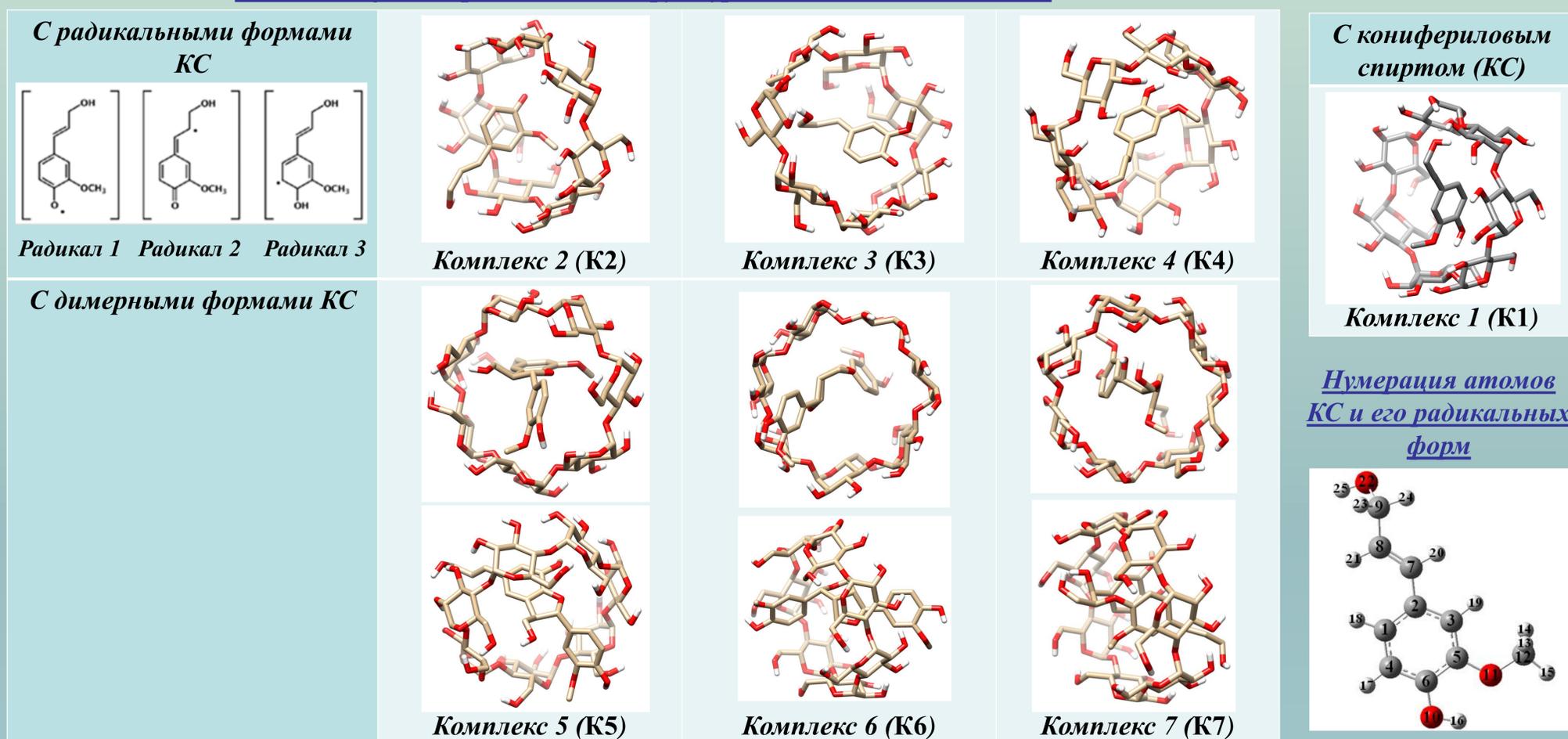
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ВКЛЮЧЕНИЯ β -ЦИКЛОДЕСТРИНА С РАЗЛИЧНЫМИ СТРУКТУРНЫМИ ЕДИНИЦАМИ ЛИГНИНА

Болвинова Д.А.^{1,2}, Одинцова Е.Г.²¹ ФГБОУ ВО Ивановский государственный университет, Иваново, Россия² ФГБУН Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

Одним из популярнейших направлений современной супрамолекулярной химии является изучение циклодекстринов (ЦД). Интерес к ним обусловлен уникальным сочетанием свойств соединений включения с ЦД и широким спектром их применения. ЦД используются для создания препаратов с регулируемым высвобождением активных ингредиентов, улучшения их растворимости и химической стабильности, для контроля процесса полимеризации и т.д.

Цель работы: построение молекулярных моделей комплексов включения β -ЦД с различными структурными единицами лигнина (конифероловым спиртом, его радикальными формами и образуемыми ими димеров).

Комплексы β -ЦД с различными структурными единицами лигнина



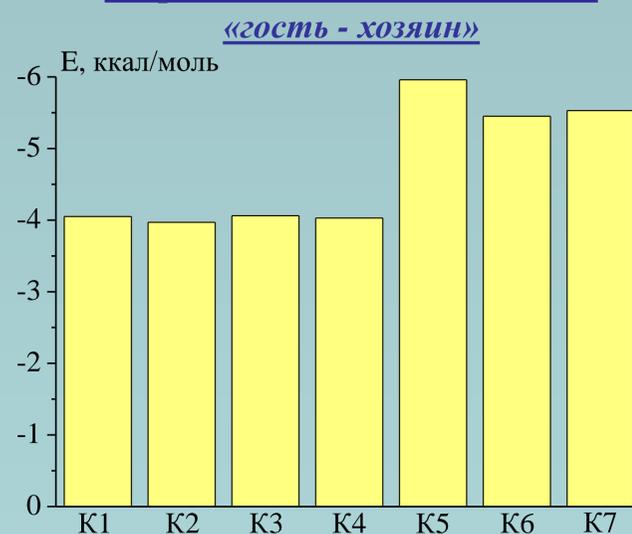
Заряды отдельных атомов исследуемых соединений

	Димер 1	Димер 2	Димер 3
H ₅	0.48	-	0.47
H ₆	0.51	0.49	0.49
O ₁	-0.76	-	-0.75
O ₂	-0.54	-0.51	-0.51
O ₃	-0.56	-0.57	-0.52
O ₄	-0.69	-0.68	-0.68

	КС	Радикал 1	Радикал 2	Радикал 3
H ₁₆	0.51	-	-	0.33
H ₂₅	0.47	0.30	0.30	0.30
O ₁₀	-0.69	-0.49	-0.48	-0.55
O ₁₁	-0.55	-0.48	-0.48	-0.56
O ₂₂	-0.75	-0.53	-0.54	-0.53

	β -ЦД
H	0.50
O	-0.78
O _{мостиковый}	-0.61

Энергии связывания комплексов «гость - хозяин»



	Комплекс 1
H	0.52
O	-0.81
O _{мостиковый}	-0.63
H ₁₆	0.52
H ₂₅	0.52
O ₁₀	-0.73
O ₁₁	-0.79
O ₂₂	-0.80

Научный руководитель: канд. хим. наук, доц. Т. Г. Волкова