

УДК 535.37+541.65+543.4

Н. Н. Крук, зав. кафедрой физики, д-р физ.-мат. наук;
 Д. В. Кленецкий, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
 В. Маес, проф. (Университет Хассельта, г. Дипенбек, Бельгия)

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕПЛОСКОСТНЫХ ИСКАЖЕНИЙ МАКРОЦИКЛА АЛКИЛИРОВАННЫХ КОРРОЛОВ

Квантово-химическими методами рассчитана молекулярная конформация тетрапиррольного макроцикла для семейства алкилированных производных свободного основания коррола. Количество присоединенных алкильных заместителей и их расположение на периферии макроцикла определяют характер и степень неплоскостных искажений макроцикла.

Степень неплоскостных искажений макроцикла охарактеризована с использованием параметра $\Delta 23$, который представляет собой среднеквадратичное отклонение одного атома от средней плоскости макроцикла 7С. Обнаружено, что по величине параметра $\Delta 23$ все исследованные соединения могут быть разделены на четыре группы:

а) $\Delta 23 = 0,267\text{--}0,294 \text{ \AA}$, у которых стерические взаимодействия локализованы на отдельных пиррольных кольцах;

б) $\Delta 23 = 0,304\text{--}0,326 \text{ \AA}$, у которых формируются стерически напряженные домены из пары пиррольных колец;

в) $\Delta 23 = 0,377\text{--}0,380 \text{ \AA}$, у которых стерически напряженный домен включает все три *мезо*-положения макроцикла;

г) $\Delta 23 = 0,413 \text{ \AA}$ – ундеказамещенный коррол, у которого 11 алкильных групп формируют один стерически напряженный кольцевой домен. Анализ величин отдельных структурных элементов, характеризующих молекулярную конформацию макроцикла, показал, что ряд из них изменяется параллельно изменениям параметра $\Delta 23$.

Вместе с тем обнаружено, что амплитуда других структурных возмущений не зависит от общей степени неплоскостного искажения макроцикла, а определяется локальным взаимодействием нескольких соседних заместителей. К таковым относятся величины двух из четырех двугранных углов между плоскостями пиррольных колец и длина $C_a\text{--}C_a$ связи в дипиррольном фрагменте.