**Заряды групп конформеров пропанола-1**

**Шебеченкова А.Н.**

*Студент. 4 курс специалитета*

*Тверской государственный университет*

*химико-технологический факультет, Тверь, Россия*

1. *mail: anshebechenkova@gmail.com*

Описание свойств поворотных изомеров – одна из сложнейших химических задач, свойства распределения электронной плотности получают в методах квантовой химии. В связи с этим целью работы стало квантово-химическое изучение зарядов групп *q*(R) конформационных изомеров пропанола-1 (Рис.1).

Девять конформеров пропанола-1 получены внутренним вращением вокруг связи βC-αC фрагмента (-H2βC-αCH2-) и αC-O образованной группой αCH2 и гидроксилом (Рис.1, 2). Ротамеры с взаимным расположением групп OH и CH3, H и C2H5 (Рис.2) в *trans* (*tr*), *gosh+* (*g+*), *gosh*– (*g*–) позициях: *tr-tr*, *tr-g+*, *tr-g*–, *g+-tr*, *g*–*-tr*, *g*–-*g*–, *g+-g+*, *g*–-*g+*, *g+-g*– оптимизированы методом B3LYP/6-311++G(3df.3pd) в программе GAUSSIAN 03 [1]. Заряды групп атомов *q*(*R*) вычислены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» - QTAIM [2] при помощи пакета программ AIMALL [3] и снесены в таблицу. Погрешность вычисления *q*(*R*) составила не более 0,001 а.е. (1 а.е. заряда = 1,6·10-19 Кл).

|  |  |
| --- | --- |
|  | а) б) |
| Рис. 1: Пропанол-1 (*tt*); стрелочками показаны внутренние вращения | Рис. 2: Проекции Ньюмена пропанола-1 с взаимным *trans* расположением а) групп OH и CH3 вдоль связи βС-αС и б) H и C2H5 относительно связи αC-O. |

Квантово-химические вычисления показали идентичность полных электронных энергий равновесных геометрий *tr-tr*, *tr-g+*, *tr-g*–, *g+-tr*, *g*–*-tr*, *g*–-*g*–, *g+-g+*, *g*–-*g+*, *g+-g*– (*Etotal* = -194,438 а.е.). На величину *q*(*R*) метила и двух метиленов заметное влияние оказывает пространственное положение гидроксила и водорода гидроксогруппы, изменение *q*(OH) происходит рамках вычислительной погрешности (Таблица). В симметричных положениях ОН и Н (*tr-g+* и *tr-g*–, *g+-tr* и *g*–*-tr*, *g*–-*g*– и *g+-g+*, *g*–-*g+* и *g+-g*–) значения *q*(CH3), *q*(αCH2) и *q*(βCH2) одинаковы. Наибольший отток электронной плотности с αCH2 в сторону ОН отмечен в случаях *gosh±* взаимоположений H и C2H5, что сопровождается увеличением *q*(αCH2) более, чем на 0,030 а.е. (строки №: 2, 4, 5) по сравнению с *tr-*расположением (строки №: 1, 3). Наименьшая величина *q*(CH3) получена для *g±* ориентацией OH и CH3, с одновременным *g±* нахождением H и C2H5 (строка № 5).

|  |
| --- |
| Таблица. Заряды групп *q*(*R*) конформеров пропанола-1 |
| № | Конформеры | CH3 | βCH2 | αCH2 | OH |
| 1 | *tr-tr* | -0,005 | 0,062 | 0,494 | -0,551 |
| 2 | *tr-g+*, *tr-g–* | -0,001 | 0,025 | 0,529 | -0,553 |
| 3 | *g+-tr, g–-tr* | 0,009 | 0,049 | 0,492 | -0,551 |
| 4 | *g–-g–, g+-g+* | 0,010 | 0,015 | 0,528 | -0,552 |
| 5 | *g–-g+, g+-g–* | -0,015 | 0,038 | 0,529 | -0,552 |

**Литература**

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Pople et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1, SMP). Gaussian Inc. Pittsburgh PA. 2007.
2. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001. С. 532.
3. Todd A. Keith. AIMAll (Version 11.09.18, Professional). 2011 (<http://aim.tkgristmill.com>).