

# КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ МОНО-, ДИ- И ТРИМЕТИЛНАФТАЛИНОВ С ИОНОМ СЕРЕБРА

*Левандовский И.А., Шубина Т.Е.*

Национальный Технический Университет Украины "Киевский Политехнический Институт"  
vnr@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Взаимодействие между катионами и  $\pi$ -электронными системами долгие годы привлекает как химиков-экспериментаторов, так и теоретиков. Как было показано недавно [1] для ароматических  $\pi$ -систем, подобные взаимодействия играют большую роль в биологических процессах. Поэтому, понимание механизма взаимодействия между ионом серебра  $Ag^+$  и ароматическими системами представляется исключительно важным.

В настоящее время, расчетные методы успешно применяются для определения таких величин как энергии взаимодействия,  $\Delta H$ ,  $\Delta G$  реакций и их сравнения с имеющимися экспериментальными данными.

Настоящая работа посвящена изучению взаимодействия комплексов моно-, ди- и триметилнафталинов с ионом серебра как в газовой, так и в конденсированной среде. Все расчеты были проведены с использованием параметризованного DFT-функционала B3LYP в рамках программы Gaussian98. Влияние среды учитывалось путем использования PCM модели (растворитель – гептан).

Результаты расчетов сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными.

На рисунке приведен один из рассчитанных комплексов 1,7-диметилнафталина с ионом серебра.

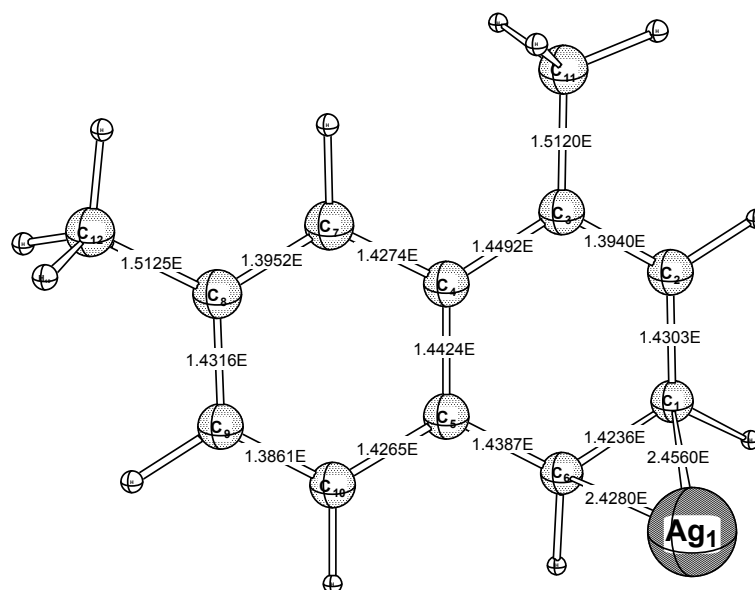


Рис.1 Оптимизированная геометрия (B3LYP/LANL2DZ) комплекса 1,7-диметилнафталина с ионом серебра с учетом влияния растворителя (PCM-модель, растворитель – гептан).



1. Ma, J. C., Dougherty, D. A. *Chem. Rev.*, **97**, 1303 (1997).