

УДК 544.183.2

Структура и энергия комплексов включения стироловый краситель - кукурбит[7]урил в присутствии аниона метакриловой кислоты

А.С. Степко, П.В. Лебедев-Степанов, В.Г. Авакян,

Н.А. Лобова, С.П. Громов

Центр фотохимии РАН

С использованием квантово-химического метода РМЗ (стандартные параметры, программа FireFly А. А. Грановского [1, 2]) проведено сравнительное исследование зависимости структуры и энергии комплексов кукурбит[7]урила (СВ[7]) с дикатионами стироловых красителей (СК) [3, 4], различающихся длиной амониоалкильного *N*-заместителя в присутствии аниона метакриловой кислоты. Расчёты были предприняты с целью проверки возможности образования комплекса СК@СВ[7] и влияния аниона метакриловой кислоты на данный процесс. Исследуемые комплексы могут быть использованы в качестве высокоселективных рецепторных центров наноструктурированных матриц оптического хемосенсора.

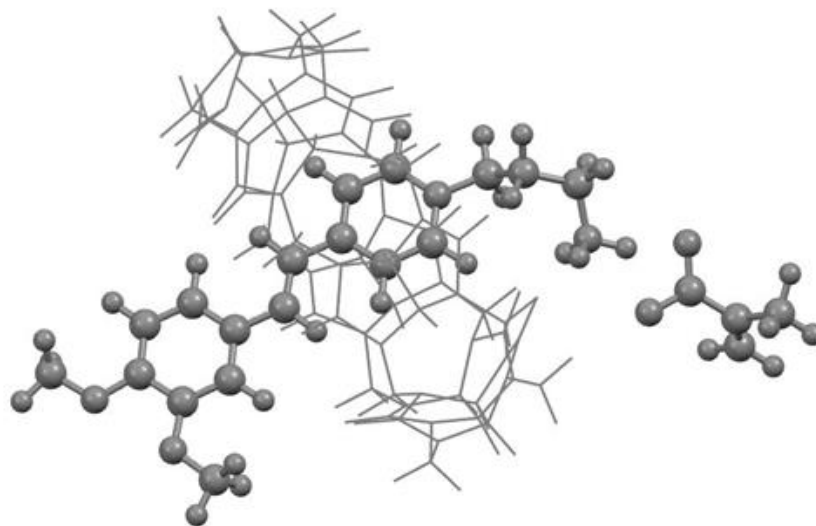


Рис. 1. Полученная путем оптимизации методом РМЗ структура комплекса 1-(3-аммониопропил)-4-[(E)-2-(3,4-диметоксифинил)-этил-]-пиридиний @СВ[7] в присутствии $C_4H_5O_2^-$

За счет положительного заряда на конце аммонийалкильного *N*-заместителя стироловые красители способны связываться с анионом метакриловой кислоты, образуя цвиттерийные структуры, имплементированные в полость СВ[7]. Из этого следует принципиальная возможность сорбции комплексов на частицы, в поверхностном слое которых локализованы полимерные цепи, обогащенные звеньями метакриловой кислоты.

В присутствии метакриловой кислоты наиболее высокой энергией комплексообразования обладает комплекс кукурбит[7]урилы с 1-(2-аммонийэтил)-4-[(Е)-2-(3,4-диметоксифенил)-этил]-пиридинием ($\Delta H = -221,690$ ккал/моль). Длина аммонийалкильного *N*-заместителя сильно влияет на взаимодействие с анионом метакриловой кислоты и положение стиролового красителя в полости кукурбитурилы. Для красителей с аммонийэтильным и аммонийпропильным *N*-заместителем наблюдается значительное смещение положения красителя относительно центра масс (1,407 Å и 1,564 Å соответственно).

Литература

1. Granovsky A.A., Firefly version 8, [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)
2. Schmidt M.W., Baldridge K.K., Boat J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. J.Comput.Chem. 14, 1347-1363 (1993)
3. Vederniko A.I., Lobova N.A., Kuz'mina L.G., Howard J.A., Strelenko Y. A., Alfimov M.V., Gromov S.P. Pseudorotaxane complexes between viologen vinylogues and cucurbit[7]uril: New prototype of photocontrolled molecular machine. Journal of Molecular Structure 989 (2011) 114–121
4. Kuz'mina L.G., Vedernikov A.I., Lobova N.A. Howard J.A., Strelenko Y.A., Fedin V.P., Alfimov M.V., Gromov S.P. Photoinduced and dark complexation of unsaturated viologen analogues containing two ammonium tails with cucurbit[8]urilw. New J. Chem., 2006, 30, 458–466