

НОВЫЕ МОДЕЛИ СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

Курамшина Г. М.

*Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва
kuramshi@phys.chem.msu.ru*

Супрамолекулярная химия — «химия за пределами молекулы» [1], изучающая структуру и функции ассоциаций двух и более химических частиц, удерживаемых вместе межмолекулярными силами». В качестве супрамолекул принято рассматривать олигомерные структуры, которые возникают при межмолекулярной ассоциации нескольких компонентов и имеют четко обозначенную структуру. Супрамолекулы могут быть охарактеризованы пространственным расположением фрагментов (в качестве которых могут выступать отдельные молекулы), то есть иметь определенную конформацию, в которой можно выделить различные типы взаимодействий, характеризующиеся силой и направленностью и зависящие от расстояний и углов. Образование сложных систем может происходить за счет координационных взаимодействий с ионами металлов, межмолекулярных водородных связей, ван-дер-ваальсовых взаимодействий и т.д. При анализе спектральных свойств супрамолекулярных систем, в частности, относящихся к биологическим объектам, необходимо полное знание о геометрической структуре и колебательных спектрах отдельных фрагментов молекулы. В докладе рассматривается подход для определения матриц потенциальной энергии сложных молекулярных образований, основанный на совместном использовании современных квантово-химических методов в сочетании с устойчивыми численными алгоритмами решения обратных задач спектроскопии в рамках теории регуляризации нелинейных некорректных задач [2, 3]. В рамках предложенного приближения возможно использование различных систем обобщенных координат для описания силовых полей сложных молекулярных систем [4].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Лен Ж.-М.* Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. // Новосибирск: Наука, 1998.-334 с.
2. *Yagola A.G., Kochikov I.V., Kuramshina G.M., Pentin Yu.A.* Inverse Problems of Vibrational Spectroscopy. // Walter de Gruyter GmbH Berlin, Boston, 2014.
3. *Kuramshina G.M., Weinhold F.A., Kochikov I.V., Pentin Yu.A., Yagola A.G.* Joint treatment of ab initio and experimental data in molecular force field calculations with tikhonov's method of regularization. // J. Chem. Phys. -1994, vol. 100, N 2. P. 1414.
4. *Kochikov I., Stepanova A., Kuramshina G.* Scaled in cartesian coordinates ab initio molecular force fields of dna bases: Application to canonical pairs. // Molecules. -2022. vol. 27, N 2. P. 427.