

**КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ КОНФОРМАЦИЙ  
ГЕТЕРОЦИКЛОВ, ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ И ХИМИЧЕСКИХ  
СДВИГОВ НА ОСНОВЕ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДОВ  
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Аминова Р.М., Гатауллин А.Р.

*Казанский федеральный университет, Кремлевская ул., 16а, Казань 420018  
rtaminova@gmail.com.*

Применение методов классической молекулярной динамики (МД) при разных температурах с целью интерпретации спектров ЯМР сложных гетероциклов позволяет обнаружить появление дополнительных конформационных структур на поверхности потенциальной энергии.

Проведено моделирование МД процессов гетероциклических соединений для разных температур с последующим вычислением методами теории функционала плотности оптимизированной геометрии различных структур и соответствующих им значений химических сдвигов (ХС). Моделирование проведено для молекулы в кристаллической ячейке с использованием программы LAMMPS и пакета программного обеспечения MedeA. Учет влияния температуры производили с использованием алгоритма Нозе-Гувера.

В процессе МД наиболее сильно изменяются значения двугранных углов (на величину  $4,74^\circ - 41,25^\circ$ ), что приводит к существенным изменениям ХС, особенно ядер  $^{13}\text{C}$  (в пределах 1,13 – 131,44 м.д.) в отличие от ХС протонов (0,29 – 2,27 м.д.). Для 2-фенил-5,5-диметил-1,3-диоксана при температуре 448.15К наблюдается переход кресло-конформации - в твист-конфигурацию, между которыми была рассчитана структура переходного состояния с мнимой частотой  $195.46 \text{ см}^{-1}$ . Разница в энергиях кресло-твист перехода составляет 27.7 ккал/моль.