

2. Ямсков, И. А. Гидрофильные носители на основе поливинилового спирта для иммобилизации ферментов / И. А. Ямсков, М. В. Буданов, В. А. Даванков // Биоорг. химия. – 1979. – Т. 5. – № 11. – С. 1728-1734.
3. Груздева, А. Н. Сорбционное разделение электролитов на поперечно сшитом поливиниловом спирте / А. Н. Груздева [и др.] // Журн. физ. химии. – 2005. – Т. 79. – № 7. – С. 1325-1327.

УДК 547.244

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХОЛЕСТЕРИНОВЫХ ЭФИРОВ КАРБОРАНКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

*К.х.н., с.н.с. Дикусар Е.А., к.х.н., с.н.с. Пушкарчук А.Л.,
к.х.н., в.н.с. Зеленковский В.М., д.х.н., проф. Поткин В.И.,
к.х.н., н.с. Рудаков Д.А.*

*Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси;
к.х.н., доц. Степин С.Г.*

Витебский государственный технологический университет

Производные карборанов могут найти практическое применение для получения самоорганизующихся монослойных покрытий, что открывает возможность для суб-наноразмерного дизайна свойств макроскопической поверхности. Они проявляют физиологическую активность и являются перспективными высокоэффективными агентами для бор-нейтронозахватной диагностики и терапии онкологических заболеваний.

Целью настоящей работы является квантово-химическое моделирование холестеринových эфиров *o*-, *m*- и *p*-карборан-*S*-карбонových кислот (I-III).

Ранее нами были синтезированы холестеринových эфиры *o*-карборан-*S*-карбоновой кислоты (I) [1] и *m*-карборан-*S*-карбоновой кислоты (II) [2], имевших природное содержание изотопов бора. Важными параметрами, характеризующими поведение этих веществ, являются характеристики их электронной структуры и относительной устойчивости.

С целью оценки устойчивости изомерных холестеринových эфиров *o*-, *m*- и *p*-карборан-*S*-карбонových кислот (I-III), изучения их электронной структуры и строения, нами были проведены неэмпирические квантово-химические расчеты этих соединений с использованием метода теории функционала плотности (density functional theory) DFT с применением уровня теории B3LYP/6-31++(d, p) по программе GAMESS [3]. Рассчитаны полные энергии систем (*E*), энергии верхней занятой молекулярной орбитали (*E_{ВЗМО}*), энергии нижней вакантной молекулярной орбитали (*E_{НВМО}*) и дипольные моменты (таблица). Значения энергий приведены в атомных единицах энергии (хартри, а.е.).

Таблица – Данные неэмпирических квантово-химических расчетов соединений (I-III), вычисленных методом DFT

№	I	II	III
<i>E</i> , а.е	-1576,225195	-1576,248146	-1576,252709
<i>E_{ВЗМО}</i> , эВ	-6,683	-6,533	-6,432
<i>E_{НВМО}</i> , эВ	-0,242	0,816	-1,067
Дипольн. момент, Дб	7,11	5,23	2,58

Геометрические параметры *m*-карборан-*S*-карбонového фрагмента холестеринového эфира (II), полученные путем расчетов, хорошо согласуются с данными рентгено-

структурного анализа, полученными для имеющего аналогичный фрагмент соединения 3-метил-3-[1,7-дикарба-клозо-додекаборан(12)-1-оилперокси]бут-1-ина (IV) [4] приведены на рисунке.

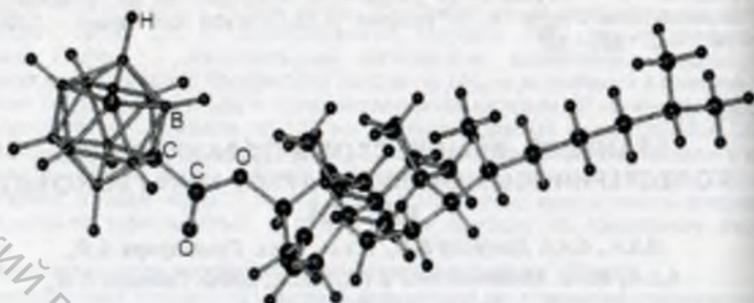


Рисунок – Строение холестеринowego эфира (II)

Как видно из данных таблицы в ряду холестеринowych эфиров(I-III) наиболее энергетически выгодным является соединение (III), оно на 12,1 кДж/моль более устойчиво, чем (II) и на 72,4 кДж/моль – чем (I).

Электрические дипольные моменты, характеризующие асимметрию распределения положительных и отрицательных зарядов в электрически нейтральных молекулах холестеринowych эфиров (I-III), равномерно убывают от *o*- (I) к *p*-изомеру (III). Из этих данных следует, что соединение (I) наиболее полярно, а (III) – наименее. Анализ энергий верхних занятых и нижних вакантных орбиталей указывает на несущественную разницу в реакционной способности соединений (I-III) по отношению к нуклеофильным и электрофильным реагентам. Наибольшей химической устойчивостью обладает соединение (II).

Список использованных источников

1. Синтез эфиров *o*-карборан-*C*-карбоновой кислоты и некоторых природных терпеновых спиртов, стеринов, фенолов и оксима камфары / Е. А. Дикусар [и др.] // Химия природных соединений. – 2006 – № 5. – С. 434-436.
2. Сложные эфиры *m*-карборан-*C*-карбоновой кислоты и некоторых терпенолов, растительных фенолов и оксимов природных карбонильных соединений / Е. А. Дикусар [и др.] // ЖОрХ. – 2008 – Т. 44 – Вып. 9. – С. 1321-1326.
3. General Atomic and Molecular Electronic Structure System / M.W. Shmidt [at al.] // J. Comput. Chem. – 1993. – Vol. 14, No. 7. – P. 1347-1363.
4. Молекулярная и кристаллическая структура 3-метил-3-[1,7-дикарба-клозо-додекаборан(12)-1-оилперокси]бут-1-ина / А.С. Ляхов [и др.] // Кристаллография. – 2001. – Т. 46. – № 6. – С. 1054-1056.

УДК 691

ИЗГОТОВЛЕНИЕ КЕРАМИЧЕСКОГО КИРПИЧА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ

Асс. Трутнёв А.А., к.х.н., доц. Платонов А.П., д.т.н., проф. Ковчур С.Г.

Витебский государственный технологический университет

Бережное и рациональное использование природных ресурсов в настоящее время приобретает особое значение. Решение этой актуальной проблемы предполагает разработку эффективных безотходных технологий за счёт комплексного использования