

АНАЛИЗ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ЕСТЕСТВЕННЫХ СВЯЗЫВАЮЩИХ ОРБИТАЛЕЙ КОНФОРМАЦИОННОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ ГИДРОКСИПИПЕРИДИНА



А.Я. Корнейчук, В.М. Сенявин, Г.М. Курамшина
 Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,
 Химический факультет,
 Москва, 119991, Россия



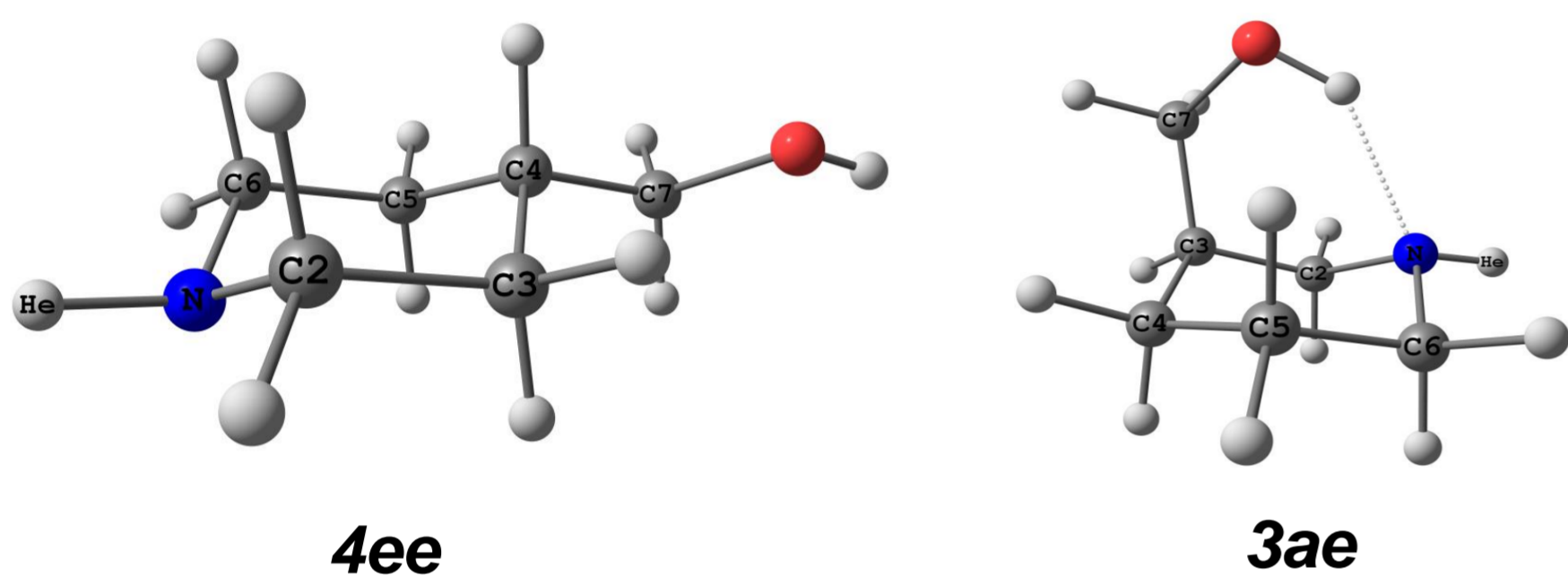
Уровни расчётов

- B3LYP/6-31G*
- B3LYP/6-31G**
- B3LYP/6-31+G**
- B3LYP/aug-cc-pVTZ
- B3LYP/aug-cc-pVDZ
- M062X/6-31+G*

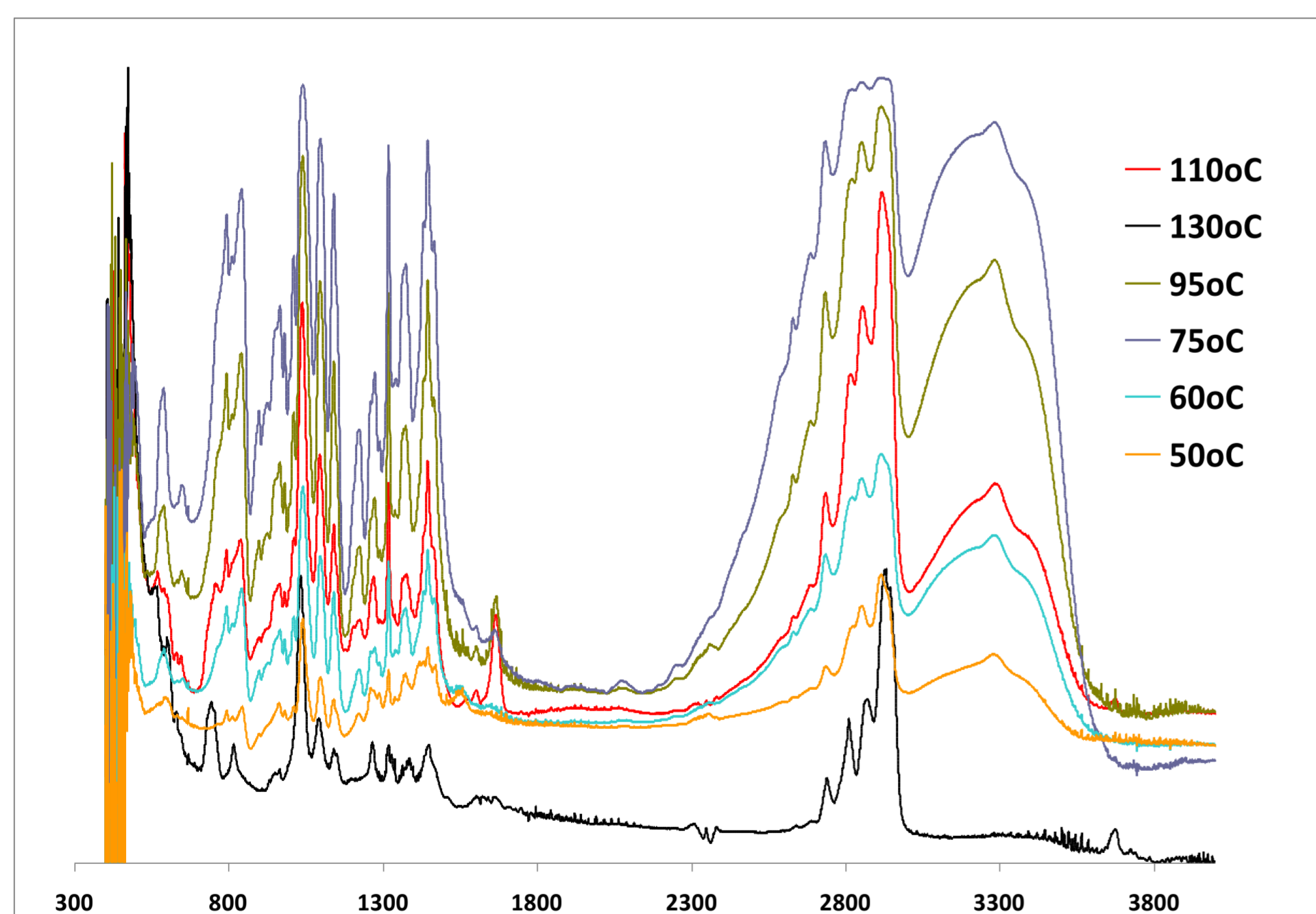
Програмный пакет

- Chemcraft
- Gaussian 03W (Version 6.0)
- Gaussian 09 (Version C. 01)

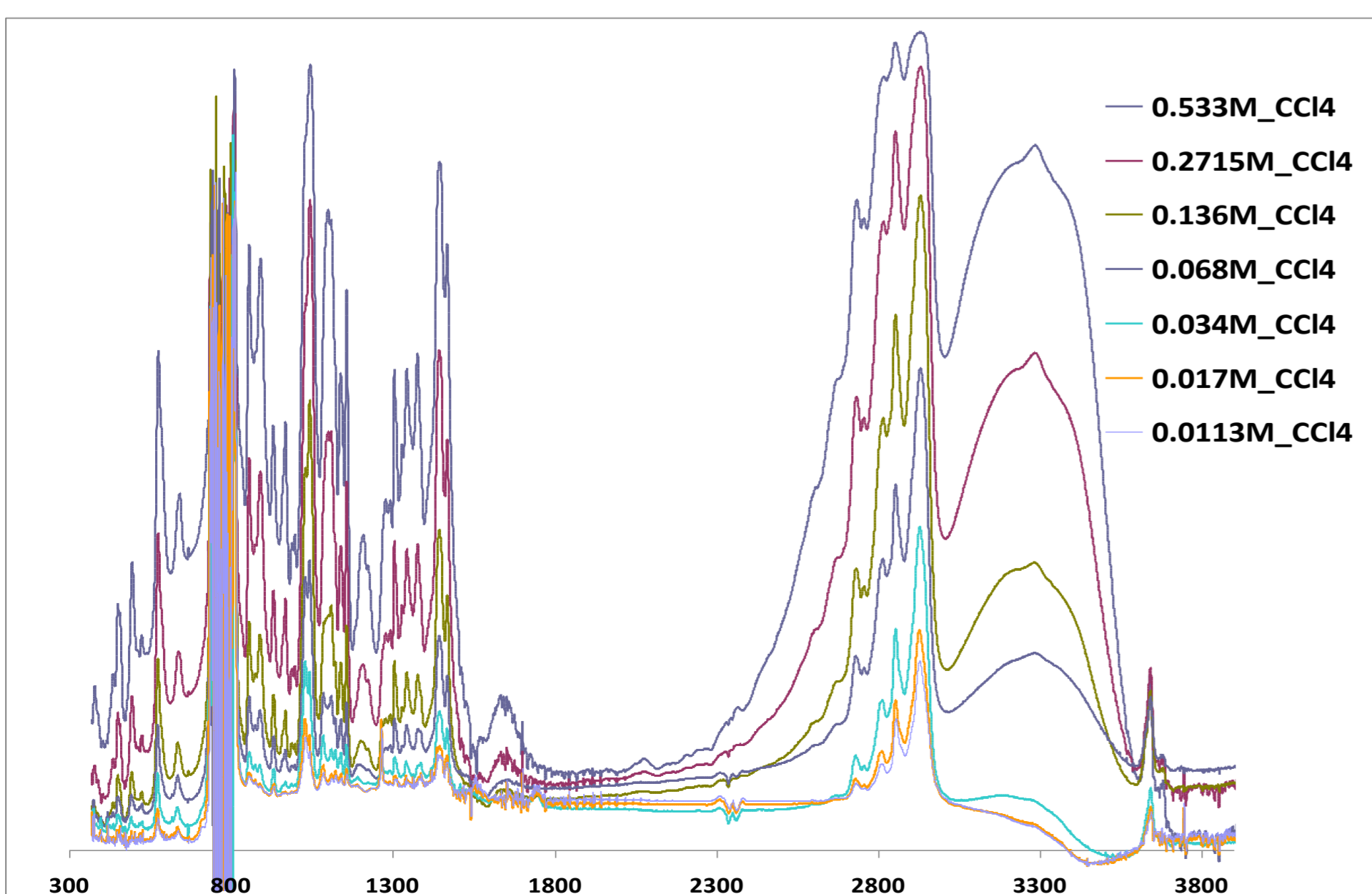
Строение наиболее стабильных конформеров 3-пиперидинметанола и 4-пиперидин метанола



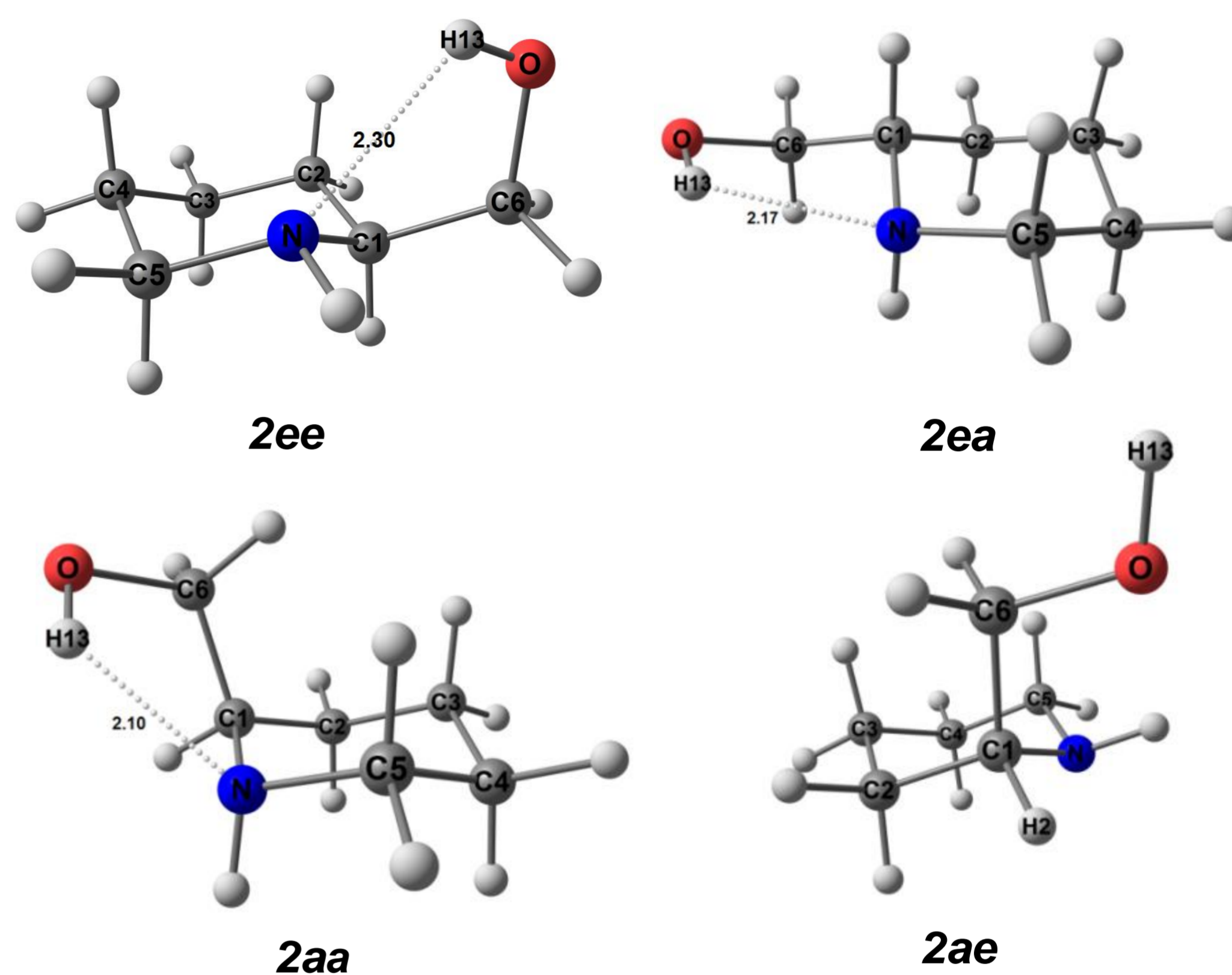
ИК-спектры 4-пиперидинметанола в газообразном состоянии при разных температурах



ИК-спектры 3-пиперидинметанола в CCl₄



Оптимизированные структуры конформеров 2-пиперидинметанола (B3LYP/6-31+G**)



Относительные энергии 4 конформеров 2-пиперидинметанола

Уровень	2aa	2ae	2ee	2ea
B3LYP/6-31+G**	1,8	3,2	0,1	(0)
M062X/6-31+G**	1,4	3,4	(0)	0,1

ППЭ конформера 2ee

