

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ И УСТОЙЧИВЫЕ КОНФОРМАЦИИ (1RS,5RS,6SR)-6-МЕТОКСИКАРБОНИЛАМИНО-(5'- МЕТОКСИИНДОЛО[2,3-*b*])БИЦИКЛО[3.2.1]ОКТ-2-ЕНА

© 2019 г. И. Б. Давыдова^{а,*}, В. М. Сенявин^а, О. Н. Зефирова^а, Г. М. Курамшина^а

^а Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия

* e-mail: irine.davydova@gmail.com

Поступила в редакцию 20.12.2018 г.

После доработки 20.12.2018 г.

Принята к публикации 15.01.2019 г.

Исследованы ИК-спектры поглощения и КР (1RS,5RS,6SR)-6-метоксикарбониламино-(5'-метоксииндоло[2,3-*b*])бицикло[3.2.1]окт-2-ена. Выполнены расчеты оптимизированных структур и гармонических силовых полей устойчивых конформеров в рамках теории функционала плотности с использованием функционалов B3LYP и BVP86 с рядом базисных наборов различной полноты. На основе расчетов предложена детальная интерпретация спектров, идентифицированы частоты фундаментальных колебаний наиболее устойчивых форм исследованного соединения. Теоретические спектры проанализированы в сравнении с экспериментальными.

Ключевые слова: конформация, колебательный спектр, частоты колебаний, мелатонин, (1RS,5RS,6SR)-6-метоксикарбониламино-(5'-метоксииндоло[2,3-*b*])бицикло[3.2.1]окт-2-ен

DOI: 10.1134/S0044453719080077

Мелатонин (N-ацетил-5-метокситриптамин-1) представляет собой эндогенный гормон, обладающий иммуностимулирующей, противораковой и др. активностью [1]. Мелатониновые рецепторы – белковые молекулы, встроенные в плазматические мембраны клеток и влияющие на молекулярный сигнал гормона. Нарушения в гормональной передаче с участием мелатонина приводят к возникновению различных расстройств сна (бессоннице, сбоем циркадианных ритмов и пр.), депрессии и другим заболеваниям, поэтому лиганды мелатониновых рецепторов бы-

ли предложены в качестве потенциальных терапевтических средств для лечения указанных заболеваний [2].

Конформационно-ограниченные аналоги мелатонина с жесткими бициклическими каркасами представляют новый перспективный класс лигандов MT1-подтипа мелатониновых рецепторов. Биохимические свойства соединений во многом определяются пространственной ориентацией функциональных групп, и нахождение корреляций между строением, молекулярными спектрами и физико-химическими свойствами конформаци-

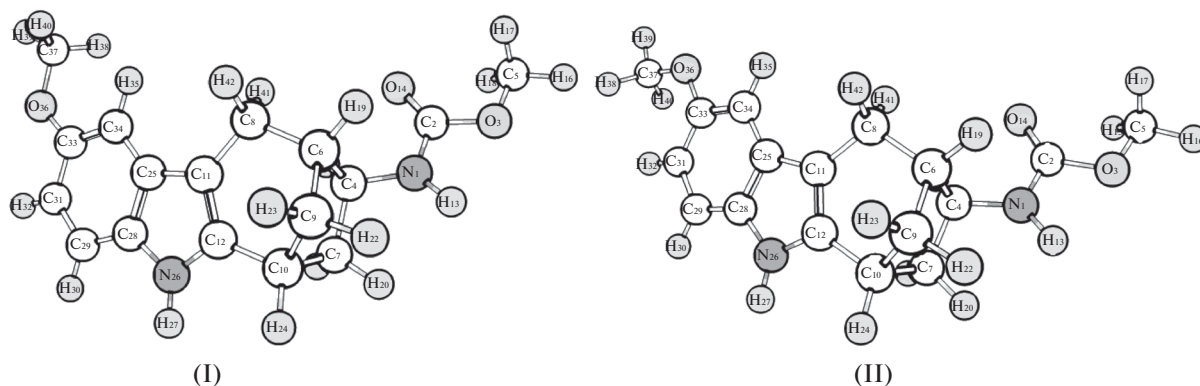


Рис. 1. Структуры анти-анти (I) и син-анти (II) конформаций А.

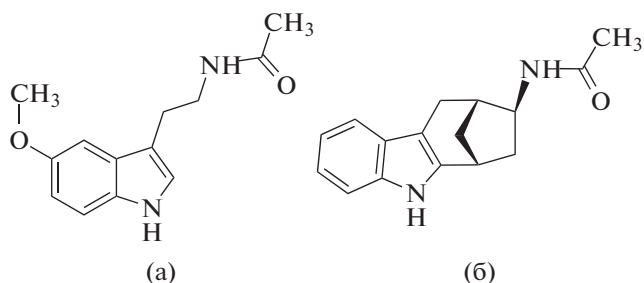


Рис. 2. Структуры мелатонина (а) и 6-ацетиламино(индоло[2,3-*b*])бицикло[3.2.1]окт-2-ена (б).

онно-ограниченных аналогов мелатонина необходимо для создания и изучения структур, обладающих высокой афинностью и селективностью к определенному подтипу рецептора. Для изучения механизмов действия новых соединений в реальных условиях необходимы надежные спектральные методики их идентификации.

В данной работе представлены результаты исследований спектров КР- и ИК-спектров поглощения представителя класса конформационно-ограниченных аналогов мелатонина — 6-метоксикарбониламино-(5'-метоксииндоло[2,3-*b*])бицикло[3.2.1]окт-2-ена (А), в котором конденсация индольного ядра с бициклооктановым каркасом ограничивает конформационную подвижность ацетамидной группы. Структуры конформаций А и мелатонина приведены на рис. 1 и 2. В качестве

базового уровня теории для интерпретации полученных экспериментальных спектров выбран ВРР86/ТЗВР [3–8], показавший достаточно высокую эффективность в сочетании с небольшими вычислительными затратами при расчетах полициклических органических соединений [9, 10]. Теоретические спектры анализировались в сравнении с экспериментальными, полученными в интервале частот 400–3600 см⁻¹ (ИК) и 50–3600 см⁻¹ (КР).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

6-Метоксикарбониламино-(5'-метоксииндоло[2,3-*b*])бицикло[3.2.1]окт-2-ен (А) синтезировали в лаборатории БАОС Химического факультета. Вещество предположительно представляет собой рацемическую смесь экзо-конформеров, при комнатной температуре представляет собой белый кристаллический порошок. Чистота вещества оценена ~95%. Регистрацию спектра ИК-поглощения (для вещества, спрессованного в таблетку с бромидом калия) осуществляли на фурье-спектрометре Tensor-27 (Bruker, Германия) с разрешением 1 см⁻¹. Фурье-спектр КР кристаллического А регистрировали на приставке FRA-106 к спектрометру EQUINOX 55 (Bruker, Германия) при возбуждении линии 1064 нм Nd:YAG лазера мощностью 500 мВт, разрешение 2 см⁻¹. Сигнал усредняли по тысяче сканов. Полученные спектры представлены на рис. 3.

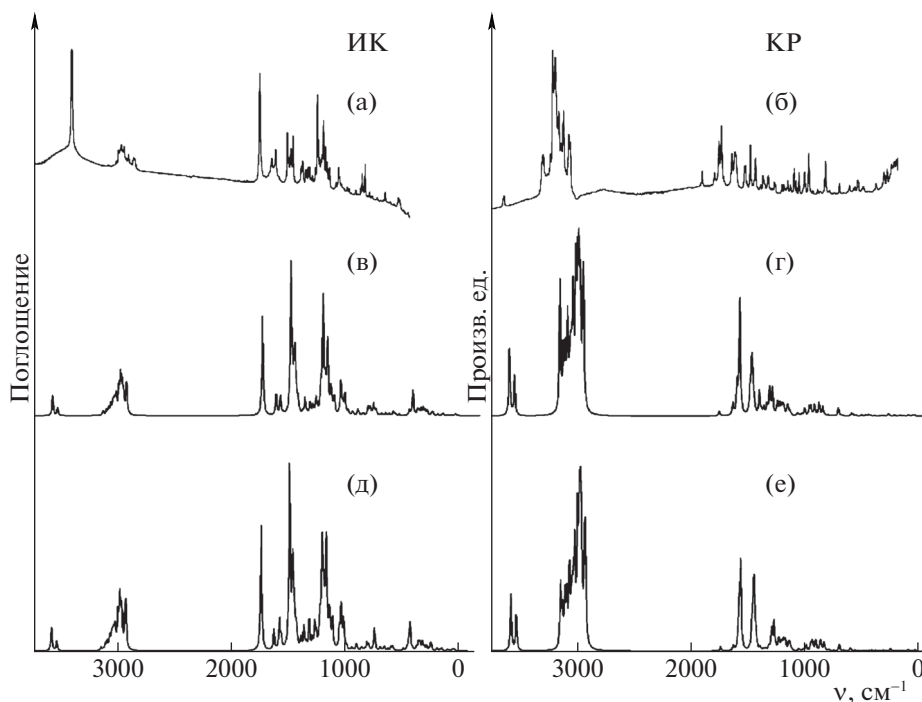


Рис. 3. Экспериментальные (а, б) и теоретические (ВРР86/ТЗВР) спектры ИК-поглощения и КР для *анти-анти* I (в, г) и *син-анти* II (д, е) конформеров А.

Таблица 1. Сравнение рассчитанных для *анти-анти-* (I) и *син-анти-* (II) конформеров A и экспериментальных (III) для B [18] геометрических параметров (длины связей в Å)

Параметр	I	II	III	Параметр	I	II	III	Параметр	I	II	III
R(1,2)	1.3653	1.3658	1.341	A(10,9,22)	110.3122	110.3253	111.5	D(4,6,9,10)	-43.2474	-43.1764	-42.67
R(1,4)	1.4587	1.4584	1.451	A(10,9,23)	113.0084	112.995	111.5	D(4,6,9,22)	73.5538	73.6544	
R(1,13)	1.0156	1.0158	0.9699	A(22,9,23)	108.3264	108.336	109.3	D(4,6,9,23)	-164.259	-164.131	
R(2,3)	1.378	1.3781		A(7,10,9)	101.1422	101.1337	100.88	D(8,6,9,10)	75.4464	75.5284	75.6
R(2,14)	1.2231	1.2229	1.3441	A(7,10,12)	110.3672	110.4205	107.96	D(8,6,9,22)	-167.752	-167.641	
R(3,5)	1.442	1.4421		A(7,10,24)	112.3922	112.3969	113.3	D(8,6,9,23)	-45.5653	-45.4261	
R(4,6)	1.5718	1.5719	1.558	A(9,10,12)	106.5579	106.535	107.24	D(19,6,9,10)	-161.593	-161.562	
R(4,7)	1.559	1.5593	1.548	A(9,10,24)	113.7196	113.73	113.3	D(19,6,9,22)	-44.7914	-44.7308	
R(4,15)	1.0983	1.098	1	A(12,10,24)	112.0241	111.9908	113.3	D(19,6,9,23)	77.3958	77.484	
R(5,16)	1.0952	1.0952	0.98	A(8,11,12)	121.0256	121.1177	120.97	D(4,7,10,9)	-37.326	-37.4699	-37.32
R(5,17)	1.0985	1.0985	0.98	A(8,11,25)	131.921	131.8412	131.85	D(4,7,10,12)	75.1904	75.0361	74.99
R(5,18)	1.0987	1.0987	0.98	A(12,11,25)	107.0519	107.0383	107.05	D(4,7,10,24)	-158.965	-159.119	
R(6,8)	1.5491	1.549	1.537	A(10,12,11)	123.6544	123.6319	124	D(20,7,10,9)	80.6109	80.3534	
R(6,9)	1.5442	1.5444	1.531	A(10,12,26)	126.5577	126.3788	125.33	D(20,7,10,12)	-166.873	-167.141	
R(6,19)	1.0984	1.0985	1	A(11,12,26)	109.721	109.9308	110.23	D(20,7,10,24)	-41.0285	-41.2954	
R(7,10)	1.552	1.5517	1.539	A(11,25,28)	106.8779	106.8123	106.61	D(21,7,10,9)	-159.594	-159.801	
R(7,20)	1.1036	1.1034	0.99	A(11,25,34)	133.7473	134.0713	134.88	D(21,7,10,12)	-47.0774	-47.2952	
R(7,21)	1.0978	1.0979	0.99	A(28,25,34)	119.3748	119.1165	118.41	D(21,7,10,24)	78.7668	78.5499	
R(8,11)	1.5048	1.5045	1.5	A(12,26,27)	125.4204	125.2978	132.5	D(6,8,11,12)	6.7989	6.3795	11.1
R(8,41)	1.1036	1.1036	0.99	A(12,26,28)	108.8741	108.8162	108.71	D(6,8,11,25)	-172.683	-172.939	-164.01
R(8,42)	1.1053	1.1052	0.99	A(27,26,28)	125.4549	125.4333	118.7	D(41,8,11,12)	127.638	127.2975	
R(9,10)	1.5478	1.5478	1.534	A(25,28,26)	107.4619	107.3804	107.41	D(41,8,11,25)	-51.8435	-52.0213	
R(9,22)	1.1021	1.1022	0.99	A(25,28,29)	121.7781	121.7175	121.93	D(42,8,11,12)	-114.5	-114.974	
R(9,23)	1.099	1.0989	0.99	A(26,28,29)	130.76	130.902	130.63	D(42,8,11,25)	66.0186	65.7074	
R(10,12)	1.4999	1.5001	1.496	A(28,29,30)	121.6092	121.6062	120.9	D(6,9,10,7)	50.1084	50.1363	49.95
R(10,24)	1.1008	1.1008	1	A(28,29,31)	118.0558	118.3504	118.19	D(6,9,10,12)	-65.272	-65.291	-62.9
R(11,12)	1.382	1.3802	1.364	A(30,29,31)	120.3347	120.0431	120.9	D(6,9,10,24)	170.8139	170.8472	
R(11,25)	1.4374	1.4392	1.434	A(29,31,32)	120.8645	118.8472	119.4	D(22,9,10,7)	-67.1831	-67.2268	

Таблица 1. Продолжение

Параметр	I	II	III	Параметр	I	II	III	Параметр	I	II	III
R(12,26)	1.3846	1.386	1.375	A(29,31,33)	121.0544	120.6278	121.17	D(22,9,10,12)	177.4366	177.3459	
R(25,28)	1.4272	1.4324	1.442	A(32,31,33)	118.081	120.5248	119.4	D(22,9,10,24)	53.5224	53.4841	
R(25,34)	1.4122	1.4033	1.403	A(31,33,34)	121.2076	121.0688	120.9	D(23,9,10,7)	171.3878	171.3316	
R(26,27)	1.0129	1.0128	0.9689	A(31,33,36)	114.4536	123.53		D(23,9,10,12)	56.0075	55.9043	
R(26,28)	1.3904	1.3914	1.383	A(34,33,36)	124.3388	115.4011		D(23,9,10,24)	-67.9067	-67.9575	
R(28,29)	1.399	1.3932	1.389	A(25,34,33)	118.527	119.1166	119.38	D(7,10,12,11)	-76.107	-76.4167	-76.8
R(29,30)	1.0919	1.0919	0.95	A(25,34,35)	119.985	121.8301	120.3	D(7,10,12,26)	100.6084	100.5164	94.8
R(29,31)	1.3902	1.399	1.374	A(33,34,35)	121.488	119.0532	120.3	D(9,10,12,11)	32.8843	32.577	31.1
R(31,32)	1.0902	1.0887	0.95	A(33,36,37)	117.2774	117.8158		D(9,10,12,26)	-150.4	-150.49	-157.22
R(31,33)	1.4166	1.4137	1.404	A(36,37,38)	111.6567	111.8414		D(24,10,12,11)	157.8416	157.5098	
R(33,34)	1.3959	1.3982	1.38	A(36,37,39)	105.8482	105.735		D(24,10,12,26)	-25.443	-25.5571	
R(33,36)	1.3799	1.3815		A(36,37,40)	111.6065	111.8371		D(8,11,12,10)	-1.5619	-1.0081	-3.4
R(34,35)	1.0893	1.0907	0.95	A(38,37,39)	109.2738	109.0952		D(8,11,12,26)	-178.76	-178.382	-176.19
R(36,37)	1.4251	1.4246		A(38,37,40)	109.0812	109.1287		D(25,11,12,10)	178.0345	178.4611	172.77
R(37,38)	1.1039	1.104		A(39,37,40)	109.2935	109.0981		D(25,11,12,26)	0.8369	1.0873	
R(37,39)	1.0961	1.0962		D(4,1,2,3)	175.9788	175.4216		D(8,11,25,28)	179.3667	179.1584	175.59
R(37,40)	1.1039	1.104		D(4,1,2,14)	-4.6909	-5.3262		D(8,11,25,34)	-0.6157	-0.8393	-0.6
A(2,1,4)	122.1878	122.2538	122.97	D(13,1,2,3)	4.7832	5.1454		D(12,11,25,28)	-0.1686	-0.2316	-0.05
A(2,1,13)	117.4268	117.3167	114.1	D(13,1,2,14)	-175.887	-175.602	-91.7	D(12,11,25,34)	179.8491	179.7707	-176.27
A(4,1,13)	119.7992	119.7147	122.7	D(2,1,4,6)	-84.4912	-86.7697		D(10,12,26,27)	7.204	8.5538	
A(1,2,3)	109.614	109.5703		D(2,1,4,7)	156.6834	154.3492	149.36	D(10,12,26,28)	-178.302	-178.838	-172.61
A(1,2,14)	125.9495	126.0187		D(2,1,4,15)	35.8718	33.5562		D(11,12,26,27)	-175.7	-174.162	
A(3,2,14)	124.4329	124.4064		D(13,1,4,6)	86.5016	83.2806		D(11,12,26,28)	-1.2059	-1.5536	
A(2,3,5)	114.3107	114.2796		D(13,1,4,7)	-32.3238	-35.6006		D(11,25,28,26)	-0.5491	-0.6912	0.06
A(1,4,6)	114.186	114.25	113.57	D(13,1,4,15)	-153.135	-156.394		D(11,25,28,29)	179.4314	179.4076	-177.98
A(1,4,7)	110.5514	110.6469	110.54	D(1,2,3,5)	178.5481	178.4264		D(34,25,28,26)	179.4363	179.3069	177.02
A(1,4,15)	106.2032	106.0374	108.9	D(14,2,3,5)	-0.7946	-0.8405		D(34,25,28,29)	-0.5832	-0.5943	
A(6,4,7)	105.5455	105.5018	105.93	D(2,3,5,16)	178.3869	178.2844		D(11,25,34,33)	-179.602	-179.539	176.15
A(6,4,15)	109.1757	109.2069	108.9	D(2,3,5,17)	58.9287	58.8144		D(11,25,34,35)	0.3877	0.3814	

Таблица 1. Окончание

Параметр	I	II	III	Параметр	I	II	III	Параметр	I	II	III
A(7,4,15)	111.2605	111.2845	108.9	D(2,3,5,18)	-62.3035	-62.4027	140.31	D(28,25,34,33)	0.4178	0.4633	0.3
A(3,5,16)	105.2733	105.2715		D(1,4,6,8)	140.3426	140.1022	140.31	D(28,25,34,35)	-179.593	-179.616	
A(3,5,17)	110.9455	110.9431		D(1,4,6,9)	-101.483	-101.758	-102.2	D(12,26,28,25)	1.0698	1.3641	-0.04
A(3,5,18)	110.9066	110.9003		D(1,4,6,19)	19.0691	18.8076		D(12,26,28,29)	-178.908	-178.747	177.77
A(16,5,17)	110.4201	110.4319		D(7,4,6,8)	-98.031	-98.1438	-98.18	D(27,26,28,25)	175.5616	173.9601	
A(16,5,18)	110.3129	110.3193		D(7,4,6,9)	20.1439	19.9955	19.31	D(27,26,28,29)	-4.4165	-6.1511	
A(17,5,18)	108.9533	108.9462		D(7,4,6,19)	140.6954	140.5615		D(25,28,29,30)	-179.834	-179.86	
A(4,6,8)	111.1294	111.1371	111.1	D(15,4,6,8)	21.6537	21.561		D(25,28,29,31)	0.3574	0.3233	0.8
A(4,6,9)	102.9574	103.0112	102.57	D(15,4,6,9)	139.8286	139.7003		D(26,28,29,30)	0.1418	0.2645	
A(4,6,19)	109.7864	109.8003	111	D(15,4,6,19)	-99.6198	-99.7337		D(26,28,29,31)	-179.667	-179.552	-176.71
A(8,6,9)	110.3881	110.3288	110	D(1,4,7,10)	134.5991	134.8837	134.66	D(28,29,31,32)	179.885	179.9146	
A(8,6,19)	109.488	109.4933	111	D(1,4,7,20)	17.1398	17.4815		D(28,29,31,33)	0.0182	0.0652	0.1
A(9,6,19)	112.9683	112.9493	111	D(1,4,7,21)	-102.507	-102.129		D(30,29,31,32)	0.0735	0.0953	
A(4,7,10)	104.3289	104.3319	104.25	D(6,4,7,10)	10.6503	10.8286	11.22	D(30,29,31,33)	-179.793	-179.754	
A(4,7,20)	110.1974	110.1031	110.9	D(6,4,7,20)	-106.809	-106.574		D(29,31,33,34)	-0.1696	-0.1847	-0.9
A(4,7,21)	112.218	112.2373	110.9	D(6,4,7,21)	133.5445	133.816		D(29,31,33,36)	179.8291	179.8271	
A(10,7,20)	109.5029	109.4912	110.9	D(15,4,7,10)	-107.649	-107.495		D(32,31,33,34)	179.96	179.9684	
A(10,7,21)	113.1751	113.2409	110.9	D(15,4,7,20)	134.8919	135.1032		D(32,31,33,36)	-0.0413	-0.0198	
A(20,7,21)	107.4102	107.4222	108.9	D(15,4,7,21)	15.2454	15.4929		D(31,33,34,25)	-0.0557	-0.0887	0.7
A(6,8,11)	110.1342	110.1026	109.76	D(4,6,8,11)	68.5976	68.768	64.57	D(31,33,34,35)	179.9552	179.9884	
A(6,8,41)	108.8428	108.9598	109.7	D(4,6,8,41)	-53.7324	-53.5291		D(36,33,34,25)	179.9457	179.9004	
A(6,8,42)	109.5296	109.5927	109.7	D(4,6,8,42)	-169.387	-169.203		D(36,33,34,35)	-0.0434	-0.0225	
A(11,8,41)	111.3479	111.2763	109.7	D(9,6,8,11)	-44.9859	-44.8508	-48.3	D(31,33,36,37)	179.9067	-0.4029	
A(11,8,42)	110.7346	110.7291	109.7	D(9,6,8,41)	-167.316	-167.148		D(34,33,36,37)	-0.0946	179.6082	
A(41,8,42)	106.1532	106.0854	108.2	D(9,6,8,42)	77.0293	77.1783		D(33,36,37,38)	61.4108	61.6361	
A(6,9,10)	100.7123	100.686	101.44	D(19,6,8,11)	-169.954	-169.758		D(33,36,37,39)	-179.779	-179.738	
A(6,9,22)	110.9765	111.0466	111.5	D(19,6,8,41)	67.7159	67.9452		D(33,36,37,40)	-60.9726	-61.1113	
A(6,9,23)	113.3861	113.3342	111.5	D(19,6,8,42)	-47.9391	-47.7287					

Таблица 2. Экспериментальные и рассчитанные частоты нормальных колебаний (в см⁻¹) двух наиболее устойчивых конформеров А

Эксперимент		анти-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %	син-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %	
ИК	КР					
3390 (оч. сильн.)	3384 (8%) 3057 (34%) 2977 (100%)	3575 (50.4); (131)	100(qNH-1)	3576 (48.3); (129.1)	100(qNH-1)	
3385 (оч. сильн.)		3531 (20.8); (80.5)	100(qNH-2)	3529 (20.2); (81.2)	100(qNH-2)	
		3132 (6); (46.7)	99(qCH-1)	3140 (7.6); (145)	96(qCH-1) 4(qCH-3)	
		3130 (5.8); (219)	92(qCH-2) 8(qCH-3)	3123 (2.9); (77.3)	100(qCH-2)	
		3102 (12.5); (110)	92(qCH-3) 8(qCH-2)	3102 (13.1); (111.4)	96(qCH-3) 4(qCH-1)	
		3085 (17.4); (106.9)	82(qCH-4) 10(qCH-9) 8(qCH-10)	3085 (17.5); (107.3)	82(qCH-4) 10(qCH-8) 8(qCH-10)	
		3065 (27.7); (180.6)	93(qCH-5) 4(qCH-16) 4(qCH-17)	3063 (26.1); (166.4)	93(qCH-5) 4(qCH-16) 3(qCH-17)	
		3047 (23.4); (52.3)	51(qCH-9) 49(qCH-10)	3047 (23.3); (52.8)	51(qCH-8) 49(qCH-10)	
		3038 (23.2); (82.1)	81(qCH-6) 10(qCH-7) 7(qCH-14)	3038 (23.5); (81.7)	77(qCH-6) 14(qCH-7) 8(qCH-14)	
		3028 (27.5); (78.3)	83(qCH-11) 15(qCH-13)	3028 (27.2); (78.1)	83(qCH-11) 15(qCH-13)	
		3016 (38.3); (102.3)	76(qCH-8) 21(qCH-7)	3019 (2.6); (33.7)	85(qCH-7) 14(qCH-6)	
		3015 (5.4); (104.8)	69(qCH-7) 22(qCH-8) 8(qCH-6)	3016 (41.4); (181.2)	97(qCH-9)	
2949 (оч. слаб.)		2956 (95%)	2992 (64); (260.9)	93(qCH-12) 4(qCH-13)	2992 (64.3); (262.6)	93(qCH-12) 3(qCH-13)
2925 (слаб.)		2926 (62%)	2979 (42.5); (51.9)	51(qCH-16) 49(qCH-17)	2977 (45.8); (88.4)	51(qCH-16) 49(qCH-17)
		2976 (48.2); (171.5)	43(qCH-10) 40(qCH-9) 18(qCH-4)	2976 (48.4); (172.9)	43(qCH-10) 39(qCH-8) 18(qCH-4)	
	2907 (42%)	2966 (45.5); (169.9)	76(qCH-13) 15(qCH-11) 5(qCH-12)	2966 (24.4); (70.7)	74(qCH-15) 13(qCH-18) 10(qCH-13)	
		2964 (11.9); (63.4)	83(qCH-15) 15(qCH-18)	2965 (35); (183.5)	68(qCH-13) 13(qCH-11) 11(qCH-15) 4(qCH-12)	
2886 (слаб.)	2886 (62%)	2953 (49.8); (206.4)	89(qCH-14) 7(qCH-6)	2956 (45.3); (184.5)	87(qCH-14) 8(qCH-6)	
2843 (слаб.)	2843 (47%)	2929 (44); (170.1)	84(qCH-18) 15(qCH-15)	2931 (36.8); (162.2)	85(qCH-18) 15(qCH-15)	
		2924 (49.7); (150.4)	47(qCH-17) 45(qCH-16) 7(qCH-5)	2922 (88); (216.7)	48(qCH-17) 46(qCH-16) 7(qCH-5)	
1728 (оч. сильн.)	1727 (24%)	1732 (253); (10)	79(qCO-1) 10(qCN-1)	1733 (257.6); (10.2)	79(qCO-1) 10(qCN-1)	
1622 (слаб.)	1623 (23%)	1612 (53.5); (23.7)	22(qCC-4) 14(qCC-3) 11(qCC-5) 10(qCC-2)	1622 (43.2); (10.6)	23(qCC-2) 15(qCC-3) 13(qCC-5) 8(qCC-4)	
1588 (слаб.)	1586 (43%)	1575 (48.5); (60.4)	12(qCC-1) 12(qCC-2) 12(qCC-6) 9(qCC-5)	1572 (61.3); (96.5)	21(qCC-1) 8(qCC-5) 7(qCC-4) 7(qCC-6)	
	1566 (52%)	1551 (3.3); (229.4)	24(qCC-1) 14(qCC-4) 7(qCC-6) 6(qCC-9)	1556 (22.6); (192.4)	16(qCC-1) 16(qCC-2) 9(qCC-6) 8(qCC-5)	
1484 (сильн.)	1478 (35%)	1482 (381.8); (1.8)	24(a1) 22(a2) 20(qCN-1) 6(a17)	1483 (379); (1.8)	24(a1) 23(a2) 20(qCN-1) 6(a8)	
		1470 (64.2); (4.6)	14(qCC-3) 7(a69) 7(qCC-8) 6(qCC-5)	1471 (15.1); (0.7)	23(a81) 12(qCC-3) 7(a69) 5(qCC-5)	
		1461 (2.3); (26.2)	38(a81) 17(a38) 5(a26) 4(a78)	1459 (22.3); (19.5)	27(a38) 15(a26) 9(a81) 9(a32)	

Таблица 2. Продолжение

Эксперимент		анти-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %	син-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %
ИК	КР				
1453 (слаб.)	1453 (36%)	1460 (4); (6.7)	25(a38) 25(a81) 6(a26) 4(a32)	1456 (23.9); (8.3)	42(a17) 15(a81) 5(a15) 5(a78)
		1455 (70.5); (8.4)	66(a17) 9(a15) 6(a18) 6(a14)	1455 (117.5); (18.6)	24(a17) 20(a81) 8(a78) 6(a79)
		1447 (23.5); (72.2)	13(qCN-2) 11(a32) 10(a38) 9(a60)	1448 (19.9); (50.5)	15(a32) 13(qCN-2) 10(a60) 7(a38)
		1446 (109.7); (19.8)	10(qCC-2) 10(a66) 7(a32) 7(a81)	1445 (37.9); (13.9)	35(a32) 16(a26) 4(qCC-4) 4(a65)
		1438 (9.7); (27.4)	47(a32) 13(a26) 3(a34)	1440 (12); (51.1)	23(a78) 23(a26) 8(a79) 4(qCC-4)
1434 (сильн.)		1438 (7.4); (17.2)	48(a78) 45(a79) 3(a82)	1439 (10.6); (33.8)	39(a79) 25(a78) 11(a26) 4(a38)
		1436 (7); (11.9)	49(a26) 19(a38) 8(a32) 5(a30)	1437 (6.1); (41)	31(a38) 19(a32) 7(a26) 3(qCC-4)
		1433 (8.7); (18.3)	49(a15) 43(a14) 5(a19)	1433 (8.4); (18.4)	51(a15) 41(a14) 5(a19)
		1421 (24.9); (6.5)	20(a79) 16(a78) 15(a80) 11(a83)	1423 (36.8); (32.8)	16(a79) 14(a80) 11(a78) 9(a83)
		1419 (9.2); (4.7)	27(a14) 20(a16) 17(a15) 11(a18)	1419 (8.5); (4.9)	29(a14) 21(a16) 16(a15) 11(a18)
1362 (оч. слаб.)	1363 (27%)	1378 (6.1); (46.8)	17(qCC-6) 10(qCC-5) 9(qCC-7) 8(qCC-3)	1384 (22.6); (7.2)	17(qCC-6) 10(qCC-5) 8(qCC-3) 7(a68)
1350 (оч. слаб.)		1359 (41.9); (9.1)	24(a8) 18(a10) 9(a21) 3(a22)	1357 (47); (4)	21(a8) 16(a10) 11(a21) 4(qCC-10)
1325 (слаб.)	1324 (40%)	1339 (5); (15.5)	18(a8) 9(a10) 7(a44) 6(qCC-10)	1337 (10.5); (4.4)	21(a8) 10(a10) 6(qCC-10) 6(a44)
1314 (оч. слаб.)		1314 (29.7); (18.9)	7(qCN-3) 6(a34) 6(qCC-7) 6(a59)	1311 (59.4); (4.5)	7(a44) 6(a59) 6(qCC-7) 6(qCN-3)
1302 (оч. слаб.)		1305 (1.5); (5.1)	16(a20) 8(a30) 8(a10) 7(a22)	1306 (2.1); (5.8)	16(a20) 8(a10) 7(a22) 7(a30)
1290 (оч. слаб.)	1280 (32%)	1289 (21.9); (50.4)	11(qCC-8) 11(a74) 7(a21) 4(qCO-3)	1284 (18.1); (48.1)	11(qCC-8) 9(a74) 8(a21) 5(qCO-3)
		1281 (0.4); (3)	18(a41) 16(a42) 9(a21) 7(a22)	1280 (0.5); (0.9)	17(a41) 15(a42) 9(a21) 8(a22)
1265 (оч. слаб.)		1265 (5.4); (46.1)	11(qCN-3) 10(a40) 9(a39) 5(a46)	1264 (0.3); (39.4)	11(qCN-3) 8(a40) 8(a29) 7(a46)
		1262 (34.7); (7.8)	15(a9) 13(a28) 11(a27) 8(a29)	1261 (48.4); (27.7)	17(a9) 15(a28) 12(a27) 5(a29)
		1249 (9.4); (1.7)	8(a22) 7(a45) 6(a66) 5(a65)	1249 (24.6); (5.1)	9(a22) 7(a45) 7(a39) 6(a34)
1238 (оч. слаб.)		1225 (6.1); (7.2)	11(a34) 10(qCN-3) 8(a44) 7(a30)	1223 (10.8); (19.3)	12(a30) 8(a34) 7(qCN-3) 7(a44)
		1219 (64.5); (22.2)	9(a30) 7(a66) 6(a46) 6(a75)	1216 (54.7); (14.2)	11(a65) 6(a75) 5(qCC-2) 4(a36)
1220 (оч. сильн.)	1219 (21%)	1200 (116.3); (15.4)	15(qCN-1) 10(a2) 7(a1) 7(a35)	1199 (112.8); (15)	16(qCN-1) 11(a2) 8(a1) 6(a35)
1201 (слаб.)		1200 (172.1); (5.9)	25(qCO-3) 15(a75) 6(qCO-4) 4(a74)	1194 (138.4); (4.8)	18(qCO-3) 16(a75) 7(a74) 6(a80)

Таблица 2. Продолжение

Эксперимент		анти-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %	син-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %	
ИК	КР					
1166 (оч. сильн.)	1173 (21%)	1184 (17.7); (9.9)	12(a35) 10(a46) 8(a22) 8(a36)	1183 (19.9); (11.9)	14(a35) 9(a36) 9(a46) 8(a22)	
		1180 (50.8); (10.9)	13(a59) 10(qCN-2) 8(a60) 6(a80)	1179 (76.9); (11.6)	14(a59) 10(qCN-2) 9(a60) 5(a80)	
		1167 (18.7); (15.7)	18(a16) 6(qCN-4) 5(a45) 5(a20)	1168 (20.6); (15.9)	16(a16) 6(qCN-4) 5(a20) 5(a45)	
		1164 (35); (2)	37(a80) 7(a83) 7(a82) 6(a16)	1163 (37.5); (5.3)	22(a80) 14(a16) 6(qCO-2) 5(a18)	
		1160 (145.8); (4.3)	14(a16) 13(qCO-2) 7(a18) 6(a9)	1159 (181); (8.2)	16(a80) 10(a16) 9(qCO-2) 5(a18)	
1148 (сильн.)		1135 (1); (7)	46(a19) 43(a18) 3(a14) 3(a15)	1136 (0.6); (6.6)	47(a19) 44(a18) 4(a14) 3(a15)	
1132 (слаб.)		1134 (45); (7.2)	8(qCN-4) 8(a45) 8(a39) 7(a44)	1134 (59.3); (6.3)	9(qCN-4) 8(a45) 8(a44) 7(a39)	
1112 (слаб.)	1110 (18%)	1128 (0.2); (4.7)	47(a82) 47(a83)	1127 (6.7); (5.5)	37(a82) 28(a83) 4(a66)	
		1126 (37.6); (10.4)	7(a28) 7(a44) 6(a46) 6(a21)	1127 (13); (5.3)	21(a83) 9(a82) 7(a66) 5(a68)	
		1112 (0.8); (4.6)	14(a68) 11(a65) 9(a69) 8(a33)	1122 (8.2); (7.9)	13(a66) 10(a68) 8(qCC-4) 7(a69)	
		1109 (8.9); (1)	14(a33) 10(qCN-4) 6(a20) 6(qCO-5)	1109 (2.7); (2.2)	22(a33) 12(a41) 10(a42) 6(a20)	
		1101 (39.2); (2.9)	6(qCN-4) 5(qCC-9) 5(qCO-5) 4(a68)	1105 (56.7); (2.1)	13(qCN-4) 8(qCO-5) 7(a29) 5(qCO-2)	
1056 (оч. слаб.)		1047 (20.8); (3.1)	9(qCC-15) 9(qCC-16) 9(a40) 7(a27)	1047 (14.7); (3.5)	10(qCC-15) 9(qCC-16) 9(a40) 7(a27)	
1032 (слаб.)		1043 (67.1); (3.4)	14(qCO-5) 11(a35) 6(qCO-4) 5(a39)	1044 (28.1); (2.8)	14(qCO-5) 10(a35) 9(qCO-4) 5(a39)	
956	957 (25%)	1026 (23.5); (1.9)	65(qCO-4) 7(qCC-6)	1029 (86.3); (1.7)	52(qCO-4) 5(qCC-3) 4(a74) 4(qCC-6)	
		1009 (50.9); (1.5)	20(qCO-5) 12(qCN-4) 9(a20) 6(qCC-11)	1008 (59); (1.6)	21(qCO-5) 13(qCN-4) 9(a20) 6(qCC-11)	
		1003 (4.1); (2.5)	6(a41) 6(a56) 6(a74) 5(a40)	1001 (1.8); (3.2)	7(a74) 6(a56) 6(a41) 5(a40)	
		981 (11.5); (15.1)	14(qCC-13) 9(qCO-5) 8(qCC-15) 5(a37)	980 (7.8); (14.2)	16(qCC-13) 9(qCO-5) 7(qCC-15) 6(a37)	
		944 (6.1); (4.3)	6(qCC-12) 5(qCC-16) 5(qCC-13) 5(a70)	941 (2.2); (5.9)	10(qCC-12) 5(a45) 5(a33) 5(a28)	
883 (слаб.)	940 (18%)	938 (5); (14.5)	14(qCO-5) 14(qCC-14) 8(qCO-2) 5(a42)	937 (3.8); (12.3)	14(qCC-14) 13(qCO-5) 7(a42) 7(qCO-2)	
		915 (23%)	925 (0.5); (17.4)	12(a36) 8(qCC-14) 8(a49) 7(a39)	924 (1.3); (21.8)	10(a36) 9(a39) 7(a49) 7(qCC-14)
		895 (14.7); (20.6)	21(qCC-14) 15(qCC-12) 5(qCO-2)	897 (12); (22.5)	21(qCC-14) 17(qCC-12) 4(qCO-2)	
		870 (23%)	886 (4.3); (3.7)	12(qCC-12) 9(a30) 8(a27) 6(qCC-11)	887 (3.8); (3)	10(qCC-12) 8(a30) 7(a27) 7(qCC-11)
		855 (2); (21)	11(qCC-15) 9(T4a) 8(a43) 4(qCO-2)	855 (4.3); (20.7)	10(qCC-15) 9(a43) 6(qCO-2) 5(qCC-14)	

Таблица 2. Продолжение

Эксперимент		анти-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %	син-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %
ИК	КР				
826 (оч. слаб.)	834 (35%)	854 (0.2); (4.2)	33(Т4а) 22(Х2а) 19(Х3а) 10(Т5а)	847 (4.5); (9.1)	13(qCC-13) 10(qCC-11) 7(a41) 5(qCC-14)
816 (слаб.)		845 (5.2); (3.7)	14(qCC-11) 12(qCC-13) 7(qCC-14) 6(a41)	831 (2.7); (0.8)	35(Т4а) 24(Х3а) 21(Х2а) 11(Т5а)
800 (оч. слаб.)	694 (30%)	821 (0.5); (18.5)	7(qCC-15) 7(qCC-16) 6(qCN-3) 4(a28)	822 (2.2); (19)	8(qCC-16) 6(qCC-15) 5(a28) 4(qCC-2)
		805 (23.3); (0.8)	15(qCO-3) 9(a64) 7(a63) 6(qCC-10)	803 (16.2); (0.6)	53(Х1а) 18(Т2а) 15(Т1а) 6(Т4а)
		787 (18.6); (0.3)	68(Х1а) 16(Т1а) 8(Т2а) 4(Хm)	788 (10.4); (2.7)	13(qCO-3) 9(a64) 7(qCO-4) 6(qCC-10)
759 (оч. слаб.)	694 (30%)	777 (3.8); (2.6)	15(qCC-16) 6(a43) 6(qCC-13) 5(qCC-11)	778 (1.8); (2.8)	15(qCC-16) 6(a43) 6(qCC-13) 5(qCC-11)
		757 (30.6); (0.3)	45(Х2а) 42(Х3а) 9(Хm) 6(Т5а)	740 (5.3); (0.7)	80(ХCO)
		740 (9.4); (0.6)	86(ХCO)	739 (35.6); (0.4)	48(Х2а) 36(Х3а) 8(Хm) 5(Т5а)
		733 (9.3); (1)	16(a48) 11(a31) 8(ХCO) 5(a13)	733 (10.3); (1.2)	15(a48) 11(ХCO) 9(a31) 5(a13)
623 (оч. слаб.)	578 (16%)	686 (5.1); (1.8)	23(a5) 13(a7) 12(qCO-2) 10(a4)	689 (2.3); (14.7)	9(a67) 8(qCC-6) 7(qCO-3) 7(qCC-10)
		685 (0.5); (15.4)	7(a67) 7(qCC-10) 6(a70) 4(qCO-3)	686 (5.7); (1.4)	27(a5) 15(qCO-2) 15(a7) 13(a4)
		664 (0.6); (0.7)	36(Т2а) 19(Т2с) 11(Т3а) 10(Х3а)	665 (1.9); (0.7)	31(Т2а) 20(Т2с) 17(Т3а) 10(Х3а)
		649 (7.2); (1.7)	16(Т3b) 12(Т2b) 11(Т1с) 8(XNb)	649 (8.8); (1.7)	15(Т3b) 12(Т1с) 12(Т2b) 10(XNb)
		620 (5.9); (0.4)	12(a43) 8(a24) 7(a51) 6(a37)	618 (5.1); (0.4)	12(a43) 8(a51) 7(a24) 6(qCC-9)
		584 (10.8); (0.6)	60(Хm) 21(Т3а) 6(Х3а) 6(Т1а)	591 (7.9); (8.1)	14(a72) 7(a77) 6(a73) 6(a58)
507 (оч. слаб.)	427 (18%)	569 (5); (5.3)	8(qCC-9) 6(a73) 5(a70) 4(qCC-4)	576 (9.4); (0.9)	67(Хm) 15(Т3а) 7(Х3а) 6(Т1а)
		554 (1); (2.7)	9(a12) 7(a62) 6(a6) 5(a4)	551 (0.6); (2.1)	11(a12) 6(qCC-16) 5(a6) 5(a4)
		532 (3.2); (2.2)	14(a77) 9(a62) 7(a71) 5(a64)	529 (0.5); (1.7)	12(a77) 5(a70) 5(a6) 4(a57)
		481 (0.3); (2.9)	15(a77) 6(a52) 5(qCC-5) 5(qCC-10)	484 (4.2); (0.7)	14(a62) 11(a77) 7(a55) 6(a64)
		447 (2.6); (1.6)	15(Т2cd) 12(Т1cd) 9(a23) 4(a6)	455 (4.1); (2)	12(Т2cd) 9(a23) 6(a6) 5(Т1cd)
507 (оч. слаб.)	427 (18%)	440 (12.2); (1.8)	21(Т3b) 7(Т2а) 7(Т1b) 5(a48)	437 (19.5); (0.4)	24(Т3b) 9(Т1b) 9(Т2а) 8(a48)
		420 (3.2); (2.3)	11(a77) 10(a72) 6(a73) 4(a76)	424 (54.7); (1.9)	60(TCN2) 22(XNH)
		411 (62.9); (1.4)	70(TCN2) 20(XNH) 3(XCO)	403 (1.3); (1.4)	11(Х2а) 8(Т4а) 8(a77) 6(Т1cd)
401 (0.8); (1.1)	21(Х2а) 15(Т4а) 13(Хm) 11(Т5а)	401 (2.1); (1.4)	11(Х2а) 8(Т4а) 7(a77) 5(Т1cd)		

Таблица 2. Окончание

Эксперимент		анти-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %	син-анти/(ИК), (КР)	РПЭ, %
ИК	КР				
		371 (14.6); (1.2)	23(T2c) 10(XNb) 9(Tab) 8(a11)	368 (7.1); (2.3)	14(T2c) 11(a11) 8(a12) 6(a25)
		356 (11.9); (0.8)	9(XNb) 8(a25) 8(Tab) 6(T1cd)	350 (16.8); (0.9)	13(T2c) 13(Tab) 11(XNb) 5(T3c)
		338 (17.8); (0.3)	12(a12) 12(a7) 10(T2b) 6(a4)	338 (15.9); (0.3)	17(a7) 9(T2b) 9(a23) 8(a4)
		319 (18.7); (1)	30(T2b) 15(T3a) 12(a7) 11(T1b)	316 (18.5); (1)	27(T2b) 18(a7) 12(T1b) 11(T3a)
		301 (12.9); (1.5)	18(a7) 10(a25) 9(a12) 6(T2cd)	299 (7.8); (2.4)	11(a12) 10(a25) 7(a7) 6(T2cd)
		283 (11.4); (1.2)	16(T2c) 13(XNb) 12(a7) 12(T3b)	279 (9.9); (1.4)	16(a7) 10(T2b) 9(T2c) 7(T3b)
		250 (0.5); (1.8)	18(a77) 10(a71) 6(a12) 6(a72)	255 (3.3); (0.6)	21(Tmox) 18(a77) 10(a72) 9(a71)
		244 (7.2); (2.5)	22(Tmox) 10(a77) 6(T3b) 5(a71)	242 (11.4); (1.7)	59(Tmox) 12(XNb) 6(T2b) 4(T5a)
		236 (7.2); (1.7)	56(Tmox) 7(Tab) 6(T3c) 6(XNb)	236 (8.9); (4.7)	10(a77) 6(qCN-4) 5(XNb) 5(T3b)
	205 (23%)	193 (4.1); (2)	24(XNb) 13(T3a) 7(Tab) 6(TCO)	187 (6.8); (1.3)	23(XNb) 9(T3a) 8(a3) 8(T3c)
	180 (25%)	174 (0.7); (1)	9(a3) 6(T2d) 6(T2a) 6(T3d)	181 (0.1); (1.3)	14(Tbc) 10(T3a) 9(TCO) 6(T1c)
		156 (2.2); (0.6)	14(T1a) 7(Tbc) 6(XNb) 6(T2c)	158 (2.5); (0.5)	20(XNb) 10(T1a) 8(TCO1) 7(T2c)
		145 (5.2); (1.1)	45(TCO1) 32(TCO2)	147 (5); (0.8)	47(TCO1) 30(TCO2) 4(a3)
		129 (0.2); (1.1)	11(a57) 8(a52) 8(a72) 7(a71)	138 (0.3); (0.7)	13(a57) 9(a52) 7(a72) 7(a62)
	100 (31%)	110 (1.6); (1.7)	46(TCO) 9(T1b) 8(T3c) 7(Tbc)	96 (2.7); (0.3)	50(TCO2) 23(TCO1) 5(T1b) 4(TCO)
		95 (1.7); (0.6)	55(TCO2) 41(TCO1)	90 (0.7); (1.1)	27(TCO) 13(TCO1) 12(Tbc) 11(T1b)
		70 (2.1); (2.8)	18(TCO) 15(T3c) 14(T1c) 8(XNH)	82 (1.5); (3.5)	20(TCO) 15(T3c) 15(T1c) 6(T1b)
		59 (1.3); (0.3)	20(TCO) 9(T5a) 8(T1b) 8(T1c)	56 (1.9); (0.4)	40(TCO) 7(T5a) 6(T1d) 6(T2d)
		39 (3.2); (1.1)	70(XNH) 16(TCN2) 5(a3) 4(a11)	42 (4.8); (0.9)	66(XNH) 21(TCN2) 4(a3) 4(a11)
		27 (2.3); (1.3)	37(TCN1) 14(T1c) 9(T1d) 6(T2d)	31 (1.7); (0.9)	70(TCN1) 5(T1c)
		15 (0.8); (2.4)	58(TCN1) 11(T1d) 10(T2d) 6(T1c)	21 (0.3); (3.3)	19(T1d) 17(TCN1) 15(T2d) 13(T1c)

МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Квантово-механические расчеты в рамках теории функционала плотности выполняли с использованием пакета программ Gaussian 03 (Версия E. 01) [9]. Квантово-химические расчеты устойчивых

конформаций молекулы, выполненные с использованием двух гибридных функционалов B3LYP [11, 12] и BVP86 [3–6] с базисными наборами 6-31G**, 6-31+G** [13–15] и TZVP [7, 8] соответственно. Для всех возможных конформеров получены оптимизированные (без ограничений по

Таблица 3. Список внутренних координат, введенных для молекулы А

№	Координата	Атомы	№	Координата	Атомы	№	Координата	Атомы	№	Координата	Атомы
1	qNH-1	26 27	41	qCC-12	9 10	81	a36	8 42 6	121	a76	34 33 25
2	qNH-2	1 13	42	qCC-13	6 8	82	a37	8 11 6	122	a77	36 33 37
3	qCH-1	34 35	43	qCC-14	7 10	83	a38	9 23 22	123	a78	37 39 38
4	qCH-2	31 32	44	qCC-15	4 7	84	a39	9 23 6	124	a79	37 39 40
5	qCH-3	29 30	45	qCC-16	4 6	85	a40	9 23 10	125	a80	37 39 36
6	qCH-4	5 16	46	a1	1 13 2	86	a41	9 22 6	126	a81	37 38 40
7	qCH-5	37 39	47	a2	1 13 4	87	a42	9 22 10	127	a82	37 38 36
8	qCH-6	7 21	48	a3	1 2 4	88	a43	9 6 10	128	a83	37 40 36
9	qCH-7	4 15	49	a4	2 14 1	89	a44	10 24 12	129	Xm	36 33 34 31
10	qCH-8	6 19	50	a5	2 14 3	90	a45	10 24 9	130	X1a	35 34 33 25
11	qCH-9	5 17	51	a6	2 1 3	91	a46	10 24 7	131	X2a	32 31 33 29
12	qCH-10	5 18	52	a7	3 2 5	92	a47	10 12 9	132	X3a	30 29 31 28
13	qCH-11	9 23	53	a8	4 15 1	93	a48	10 12 7	133	XNb	27 26 28 12
14	qCH-12	10 24	54	a9	4 15 7	94	a49	10 9 7	134	XNH	13 1 4 2
15	qCH-13	9 22	55	a10	4 15 6	95	a50	11 12 25	135	XCO	14 2 1 3
16	qCH-14	7 20	56	a11	4 1 7	96	a51	11 12 8	136	Tmox	38 39 40 33 0 0 37 36
17	qCH-15	8 41	57	a12	4 1 6	97	a52	11 25 8	137	TCO	37 0 0 34 31 0 36 33
18	qCH-16	37 38	58	a13	4 7 6	98	a53	12 11 26	138	T1a	11 28 0 33 35 0 25 34
19	qCH-17	37 40	59	a14	5 16 17	99	a54	12 11 10	139	T2a	36 31 0 35 25 0 33 34
20	qCH-18	8 42	60	a15	5 16 18	100	a55	12 26 10	140	T3a	36 34 0 32 29 0 33 31
21	qCO-1	2 14	61	a16	5 16 3	101	a56	25 34 28	141	T4a	33 32 0 30 28 0 31 29
22	qCN-1	1 2	62	a17	5 17 18	102	a57	25 34 11	142	T5a	31 30 0 25 26 0 29 28
23	qCO-2	2 3	63	a18	5 17 3	103	a58	25 28 11	143	Tab	34 11 0 26 29 0 25 28
24	qCO-3	33 36	64	a19	5 18 3	104	a59	26 27 12	144	T1b	34 28 0 8 12 0 25 11
25	qCC-1	11 12	65	a20	6 19 9	105	a60	26 27 28	145	T2b	27 12 0 25 29 0 26 28
26	qCN-2	12 26	66	a21	6 19 8	106	a61	26 12 28	146	T3b	27 28 0 11 10 0 26 12
27	qCC-2	29 31	67	a22	6 19 4	107	a62	28 26 29	147	Tbc	25 8 0 26 10 0 11 12
28	qCN-3	26 28	68	a23	6 9 8	108	a63	28 26 25	148	T1c	25 12 0 41 42 6 11 8
29	qCC-3	33 34	69	a24	6 9 4	109	a64	28 29 25	149	T2c	11 41 42 4 19 9 8 6
30	qCC-4	28 29	70	a25	6 8 4	110	a65	29 30 31	150	T1cd	19 8 4 22 23 10 6 9
31	qCC-5	25 34	71	a26	7 21 20	111	a66	29 30 28	151	T2cd	22 23 6 24 12 7 9 10
32	qCC-6	31 33	72	a27	7 21 10	112	a67	29 31 28	152	T3c	24 7 9 11 26 0 10 12
33	qCO-4	36 37	73	a28	7 21 4	113	a68	31 32 29	153	T1d	19 8 9 15 7 1 6 4
34	qCC-7	25 28	74	a29	7 20 10	114	a69	31 32 33	154	T2d	15 6 1 10 20 21 4 7
35	qCC-8	11 25	75	a30	7 20 4	115	a70	31 29 33	155	T3d	4 20 21 12 9 24 7 10
36	qCO-5	3 5	76	a31	7 10 4	116	a71	33 36 34	156	TCN1	15 6 7 13 2 0 4 1
37	qCN-4	1 4	77	a32	8 41 42	117	a72	33 36 31	157	TCN2	13 4 0 14 3 0 1 2
38	qCC-9	10 12	78	a33	8 41 11	118	a73	33 34 31	158	TCO1	14 1 0 5 0 0 2 3
39	qCC-10	8 11	79	a34	8 41 6	119	a74	34 35 33	159	TCO2	2 0 0 16 17 18 3 5
40	qCC-11	6 9	80	a35	8 42 11	120	a75	34 35 25			

симметрии) геометрические структуры и рассчитаны гармонические силовые поля, частоты колебаний, интенсивности ИК-полос поглощения в газовой фазе, а также активности в спектрах КР. Кроме того, для всех конформеров выполнен расчет частот колебаний в ангармоническом приближении. Величины основных оптимизированных геометрических параметров конформеров приведены в табл. 1. Все величины разностей энергий, приведенные далее, рассчитаны с учетом поправки на нулевой колебательный уровень. Для визуализации

результатов квантово-механического расчета использована программа Chemcraft [16]. Преобразование квантово-химических матриц силовых постоянных из декартовых координат в зависимую систему внутренних координат, анализ нормальных колебаний (табл. 2) и расчет распределения потенциальной энергии по колебаниям рассмотренных конформеров выполнены с помощью комплекса программ СПЕКТР [17]. Введенные внутренние координаты приведены в табл. 3.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для исследуемого соединения возможен ряд конформаций, различающихся, как ориентацией метоксикарбониламиногруппы, так и разворотом метоксигруппы. Нами рассмотрены восемь возможных конформаций, которые возникают для *анти*- или *син*-ориентации метоксигруппы при фиксированных *анти*- и *син*-ориентациях метоксикарбониламиногруппы относительно пятичленного цикла. На уровнях B3LYP/6-31G**, B3LYP/6-31+G** и RBVP86/TZVP получены оптимизированные структуры и рассчитаны гармонические силовые поля и частоты колебаний восьми устойчивых структур.

Сравнение оптимизированных на различных уровнях теории структурных параметров **A** с экспериментальными данными для сходной структуры — 6-ацетиламино(индоло[2,3-*b*])бицикло[3.2.1]окт-2-ена (**B**) (рис. 2б), полученными методом рентгеноструктурного анализа [18] (табл. 1) и теоретических частот колебаний с экспериментальными (рис. 3, табл. 2) показывает, что уровень BVP86/TZVP удовлетворительно воспроизводит как структурные, так и спектральные данные для исследуемого соединения, что подтверждает возможность использования данного приближения.

Согласно результатам расчетов, наиболее устойчива *анти-анти*-конфигурация (**I**), приведенная на рис. 1б. Разность энергий конфигураций **I** и следующей по устойчивости *син-анти* (**II**) (рис. 1) составляет ~0.85 ккал/моль (RBVP86/TZVP), что соответствует относительному содержанию ~4 : 1. Сравнение величин оптимизированных геометрических параметров двух наиболее устойчивых по результатам расчетов конформаций приведено в табл. 1. Экспериментальные спектры ИК-поглощения и КР соединения **B** и визуализированные колебательные спектры ИК-поглощения и КР наиболее устойчивых конформаций приведены на рис. 3. Для данных конформаций предложена детальная интерпретация колебательного спектра на основе анализа нормальных колебаний (табл. 2).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта № 18-33-00826).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jones M.P., Melan M.A., Witt-Enderby P.A. // *Cancer Lett.* 2000. V. 151. P. 133.

2. Li P.K., Witt-Enderby P.A. // *Drugs of the Future.* 2000. V. 25(9). P. 945.
3. Becke A.D. // *Phys. Rev. A.* 1988. V. 38. P. 3098.
4. Becke A.D. // *J. Chem. Phys.* 1993. V. 98. P. 5648.
5. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. GAUSSIAN 03, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, 2003.
6. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. GAUSSIAN 09, Revision A.1 Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2009.
7. Schaefer A., Horn H., Ahlrichs R. // *J. Chem. Phys.* 1992. V. 97. P. 2571–2577.
8. Schaefer A., Huber C., Ahlrichs R. // *Ibid.* 1994. V. 100. P. 5829.
9. Pomogaev V., Pomogaeva A., Avramov P. et al. // *Theor. Chem. Acc.* 2011. V. 130. P. 609.
10. Kosenkov D., Kholod Y., Gorb L. et al. // *J. Phys. Chem. A.* 2009. V. 113. P. 9386.
11. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Montgomery J.A., Vreven T., Kudin K.N., Burant J.C., Millam J.M., Iyengar S.S., Tomasi J., Barone V., Mennucci B., Cossi M., Scalman G., Rega N., Petersson G.A., Nakatsuji H., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Klene M., Li X., Knox J.E., Hratchian H.P., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A. J., Cammi R., Pomell C., Ochtersk J.W., Ayala P.Y., Morokuma K., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Zakrzewski V.G., Dapprich S., Daniels A.D., Strain M.C., Farkas O., Malick D.K., Rabuck A.D., Raghavachar K., Foresman B., Ortiz J.V., Cui Q., Baboul A.G., Clifford S., Cioslowski J., Stefanov B.B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Martin R.L., Fox D.J., Keith T., Al-Laham M.A., Peng C.Y., Nanayakkara A., Challacombe M., Gill P.M.W., Johnson B., Chen W., Wong M.W., Gonzalez C., Pople J.A. *Gaussian 03, Revision E.01, Gaussian, Inc. Wallingford CT.* 2004.
12. Bekke A.D. // *J. Chem. Phys.* 1992. V. 96. P. 2155.
13. Petersson G.A., Bennett A., Tensfeldt T.G. et al. // *Ibid.* 1988. V. 89. P. 2193.
14. Petersson G.A., Al-Laham M.A. // *Ibid.* 1991. V. 94. P. 6081.
15. Rassolov V.A., Ratner M.A., Pople J.A. et al. // *J. Comp. Chem.* 2001. V. 22. P. 976.
16. ChemCraft (Version 1.5). <http://www.chemcraft-prog.com>
17. Yagola A.G., Kochikov I.V., Kuramshina G.M., Pentin Yu.A. // *Inverse Problems of Vibrational Spectroscopy. VSP. Zeist. The Netherlands,* 1999.
18. Baranova T., Averina N., Zyk N. et al. // *Mendeleev Commun.* 2009. V. 19. P. 10.