

ИССЛЕДОВАНИЕ АДАМАНТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ МЕТОДОМ ИК СПЕКТРОСКОПИИ

Ковалев В.В.,^б Фурер В.Л.,^а Потапова Л.И.,^а Вацуро И.М.^б
Шокова Э.А.,^б Коваленко В.И.^{в,г}

^аКазанский государственный архитектурно-строительный университет,
ул. Зеленая, 1, Казань, 420043, Россия, e-mail: furer@kgasu.ru

^бХимический факультет, Московского государственного университета,
Ленинские горы, 1-3, Москва, 119991, Россия

^вИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, РАН,
ул. Арбузова, 8, Казань, 420088, Россия

^гКазанский национальный исследовательский технологический университет,
ул. Карла Маркса, 68, Казань, 420015, Россия

Введение четырех атомов серы взамен метиленовых связей ведет к изменению размера макроцикла, конформации и способности к химической модификации. В отличие от химии классических каликсаренов, только небольшое число примеров тиакаликсаренов с заместителями по верхнему ободу можно найти в литературе.

Цель этой работы состояла в том, чтобы изучить нормальные колебания, конформации и водородные связи в молекулах тиакаликс[4]аренов с различными типами заместителей по верхнему ободу, на основе экспериментального изучения ИК спектров при различных температурах в твердом состоянии и растворе и квантово-химических расчетов, используя теорию функционала плотности. Важно установить взаимное соответствие между структурой молекул тиакаликсаренов, конформацией, водородным связыванием и инфракрасными спектрами.

Изучены ИК спектры тиакаликс[4]арена (ТС4А), *p*-трет-бутилтиакаликс[4]арена (*t*-BuТС4А) и *p*-(1-адамантил) тиакаликс[4]арена (1-AdТС4А). Сопоставлены рассчитанные энергии и ИК спектры различных конформаций (конус, частичный конус, 1,2-альтернат и 1,3-альтернат). Конформация конус является самой стабильной для всех изученных тиакаликс[4]аренов. Теоретический ИК спектр молекулы адамантилтиакаликс[4]арена в форме конуса согласуется с экспериментом. Выполнена классификация полос в ИК спектре адамантилтиакаликс[4]арена. Сила Н-связывания в тиакаликс[4]аренах зависит от типа заместителя. В конформации конус циклическая система Н-связей реализуется для всех изученных тиакаликс[4]аренов. Введение адамантиловых заместителей ведет к сближению атомов кислорода в молекулах тиакаликс[4]аренов и Н-связи упрочняются.