

Зависимость спектров поглощения комплексов кукурбит[7]урил-Стириловый краситель от длины *N*-Аммиоалкильного заместителя.

А.С. Степко, В.Г. Авакян, А.И. Ведерников, Е.Ю. Грушников, Е.Ю. Грушников,
П.В. Лебедев-Степанов, В.Г. Плотников, Н.А. Лобова, С.П. Громов.

Центр фотохимии РАН

С использованием квантово-химического метода РМЗ (стандартные параметры, программа FireFly А. А. Грановского [3, 4]) были рассчитаны оптимизированные структуры комплексов включения кукурбит[7]урил (СВ7) – стириловый краситель [1, 2] (СК) Рис. 1. Длина *N*-заместителя красителя была проварьирована. Константы устойчивости комплексов СК@СВ[7] в воде были оценены экспериментально методом спектрофотометрического титрования.

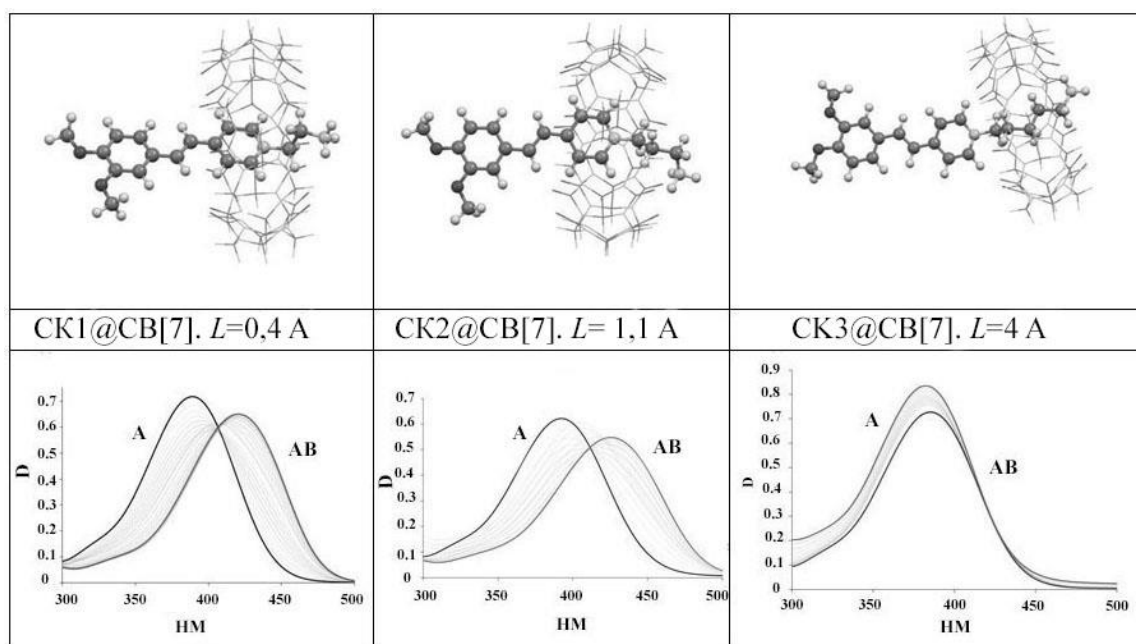


Рис. 1. Сравнение спектров поглощения комплексов СК@СВ[7] в зависимости от структуры комплекса включения, где *L* – расстояние от центра масс кукурбит[7]урила до хромофора стирилового красителя. (А – краситель, АВ - комплекс)

Обнаружена корреляция между сдвигом максимума ДПП красителя при комплексообразовании и положением его хромофора относительно молекулы-кавитанда СВ7. В случае частичного погружения хромофора красителя в полость кукурбитурила (СК1, СК2) батохромный сдвиг максимума ДПП красителя при образовании комплекса достигает 30 нм. Для комплексов включения красителя с *N*-аммиопентильным заместителем (СК3) сдвига максимума ДПП не наблюдается. В оптимизированных структурах комплексов включения расстояние от центра масс СВ7 для красителей с *N*-аммиоалкильным (СК1) и *N*-аммиопропильным (СК2) заместителями составляют 0.4Å и 1.1Å соответственно, и СВ7 расположен над винилпиридиновым фрагментом красителя, а для красителя СК3 - 4Å, при этом винилпиридиновый фрагмент красителя расположен вне полости СВ7.

Проведенное исследование представляет интерес для хемосенсорики. Работы выполнялись при поддержке гранта Президиума РАН.

Литература

1. Vedernikov A.I., Lobova N.A., Kuz'mina L.G., Howard Judith A.K., Strelenko Y.A., Alfimov M.V., Gromov S.P.// Pseudorotaxane complexes between viologen vinylogues and cucurbit[7]uril: New

- prototype of photocontrolled molecular machine. *Journal of Molecular Structure* 989 (2011) 114–121
2. *Kuz'mina L.G., Vedernikov A.I., Lobova N.A., Howard Judith A.K., Strelenko Y.A., Fedin V.P., Alfimov M.V., Gromov S.P.* // Photoinduced and dark complexation of unsaturated viologen analogues containing two ammonium tails with cucurbit[8]urilw. *New J. Chem.*, 2006, 30, 458–466
 3. *Alex A. Granovsky*, Firefly version 8, www <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
 4. *Schmid M.W., Baldrige K.K, Boatz J.A, Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A.* *J.Comput.Chem.* 14, 1347-1363 (1993)