

УДК 541.632:541.636:541.49

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ
ТРЕХОСМИЕВЫХ КЛАСТЕРОВ**© 2009 В.А. Потемкин^{1*}, Н.Н. Ившина^{1,3}, В.А. Максаков²¹ГОУ ВПО "Челябинский государственный университет", Челябинск²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск³Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, Екатеринбург

Статья поступила 22 января 2009 г.

Обобщающая статья по результатам исследования конформационных состояний трехосмиевых кластеров с органическими лигандами. Уделено внимание особенностям строения молекулярных карбонильных кластерных комплексов с органическими лигандами $M_n(CO)_mL$. Определено влияние заряда поверхности структуры, растворителей, кристаллического состояния кластера, а также межмолекулярных и внутримолекулярных взаимодействий на конформационное состояние кластера.

Ключевые слова: конформационный анализ, кластерные комплексы, осмий.

ВВЕДЕНИЕ

Систематизация и обобщение конформационных закономерностей строения соединений является важнейшей составляющей структурных исследований. Данной проблеме посвящено достаточно много исследований [1, 2]. Не менее важным является исследование влияния симметрии и хиральности молекулы на структуру и свойства кристаллов [3, 4]. Подобные исследования выполнены для многих рядов органических соединений. Менее исследованными на настоящий момент являются конформационные состояния хиральных неорганических и металлоорганических комплексов, особенно включающих элементы высших периодов (*d*- и *f*-элементы, в частности). Во многом это обусловлено объективными сложностями расчета таких систем неэмпирическими квантовыми методами и отсутствием параметризации данных элементов во многих полуэмпирических методах и методах молекулярной механики. При этом имеются и серьезные сложности при экспериментальном исследовании таких систем. В то же время данные комплексы вызывают серьезный интерес как с точки зрения фундаментального исследования и систематизации закономерностей строения, так и с позиций практического использования.

РЕЗУЛЬТАТЫ

В настоящей статье уделено внимание особенностям строения молекулярных карбонильных кластерных комплексов с органическими лигандами $M_n(CO)_mL$. Стереохимические факторы в таких комплексах играют более существенную роль, чем в моноядерных соединениях, так как каждый из атомов металла в кластерах связан с двумя и более объемными фрагментами. Особо значимы внутримолекулярные межлигандные взаимодействия при координации объемных стереохимически жестких органических лигандов на нескольких атомах металла (μ_n -координация). Высокая поляризуемость *d*- или *f*-элементов и высокая полярность таких систем также обуславливают значительную энергию межмолекулярных взаимодействий с их участием. Ука-

* E-mail: pva@csu.ru

Т а б л и ц а 1

Доли положительно (S_+) и отрицательно (S_-) заряженных поверхностей в различных кластерах

Кластер	Потенциальный лиганд	Формула	S_+ , %	S_- , %
1	2-CH ₃ , 3-NH-пинан	(μ -H)Os ₃ (CO) ₁₀ (μ -NHC ₁₀ H ₁₇)	36,1	63,9
2	Этиловый эфир глицина	(μ -H)Os ₃ (CO) ₁₀ (μ -NHCH ₂ COOC ₂ H ₅)	37,5	62,5
3	Этиловый эфир аланина	(μ -H)Os ₃ (CO) ₁₀ (μ -NHCH(CH ₃)COOC ₂ H ₅)	38,3	61,7
4	3-SH, 4-N=OH-каран	(μ -H)Os ₃ (CO) ₁₀ (μ -SC ₁₀ H ₁₅ NOH)	44,0	56,0
5	2=CH ₂ , 3-NOH-пинен	(μ -H)Os ₃ (CO) ₁₀ (μ -ONC ₁₀ H ₁₄)	41,1	58,9

занные эффекты являются определяющими для осуществления реакций с участием этих комплексов (как правило, хиральных или оптически активных) в стереоселективном или стереоспецифическом процессах [5—7]. Поэтому исследование межлигандных и межмолекулярных взаимодействий, а также конформационных превращений в кластерных комплексах требуют комбинированного подхода с использованием как экспериментальных данных, так и результатов теоретических исследований.

Теоретическое исследование трехосмиевых кластеров с различными лигандами показало, что заряд поверхности в экспериментально наблюдаемой геометрии всех структур является важным фактором для определения конформационного состояния кластера. Доли положительно и отрицательно заряженных поверхностей в различных кластерах приведены в табл. 1.

В этом отношении комплекс с пинановым лигандом [8] (1) (рис. 1) похож на кластеры с аминокислотными лигандами (1 и 2) [9]. Существенная доля отрицательно заряженной поверхности кластера должна приводить к отталкиванию молекул в кристалле. В этом случае конформационные состояния каждого из кластеров будут определять межмолекулярные взаимодействия.

В кластере с аминокислотными лигандами большая часть структуры "покрыта" отрицательно заряженными атомами кислорода (на рис. 2 комплекс *a* — комплекс с аланиновым лигандом, *b* — с глициновым лигандом). Площадь отрицательно заряженной поверхности весьма

Рис. 1. Структура трехосмиевого кластерного комплекса с пинановым лигандом (*a*) и зарядовое распределение по его поверхности (*b*)

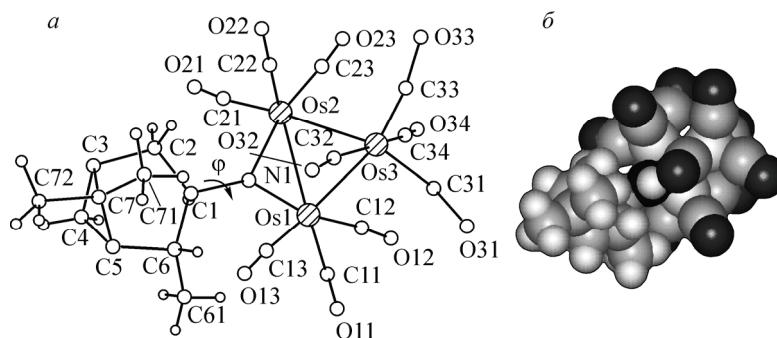
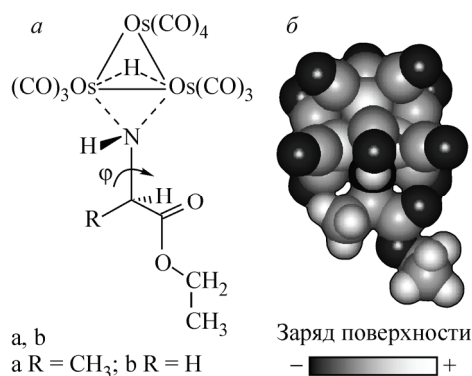


Рис. 2. Структура трехосмиевого кластерного комплекса с аланиновым лигандом (*a*) и глициновым лигандом (*b*) и зарядовое распределение по поверхности



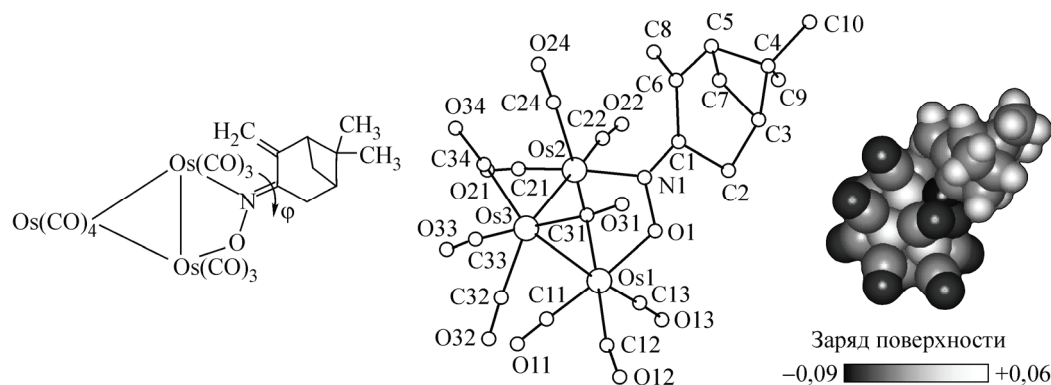


Рис. 3. Структура трехосмиевого кластерного комплекса с пиненовым лигандом и зарядовое распределение по поверхности

велика. Положительно заряженными атомами на поверхности могут быть лишь атомы водорода алкильной части комплекса и амидный атом водорода (мостиковый атом водорода — μ -H в любой конформации находится глубоко внутри соединения). Возможность межмолекулярного взаимодействия отрицательно заряженной части кластера с алкильными или амидной группами соседней молекулы, их стерическая доступность во многом может определять конформационное состояние системы в целом.

В отличие от кластера с аминокислотными (2, 3) и пинановым лигандом (1) в системе гидридокарбонильного трехосмиевого кластерного комплекса 5 с производным пинена (на рис. 3 изображен комплекс с производным пинена в качестве лиганда, а на рис. 4 — с карановым лигандом) в качестве мостиковых лигандов ($-\text{ONC}_{10}\text{H}_{14}$) [10], так же как и в кластере с карановым лигандом 4, отрицательно и положительно заряженные фрагменты поверхности кластера имеют примерно равную площадь, что показано в табл. 1. При этом положительно и отрицательно заряженные фрагменты поверхности разделены в пространстве: положительно заряженная поверхность характерна для органического лиганда, отрицательный заряд обеспечивается атомами кислорода групп C=O. Сбалансированность и пространственная разделенность положительных и отрицательных зарядов должна обеспечивать выгодность взаимодействия по типу "голова к хвосту". Аналогичные взаимодействия должны наблюдаться у кластера с карановым лигандом [11], который имеет максимальный дисбаланс положительного и отрицательного заряда на поверхности структуры (см. рис. 4). У рассматриваемых кластеров имеются потенциальные возможности таких взаимодействий, поскольку они содержат в своем составе карбонильные атомы кислорода и оксимную группу, способную к образованию как внутри-, так и межмолекулярных водородных связей.

Исходя из распределения заряда на поверхности молекул можно предположить, что в структурах кластеров 1, 2 и 3 конформационное состояние систем определяет межмолекулярное вза-

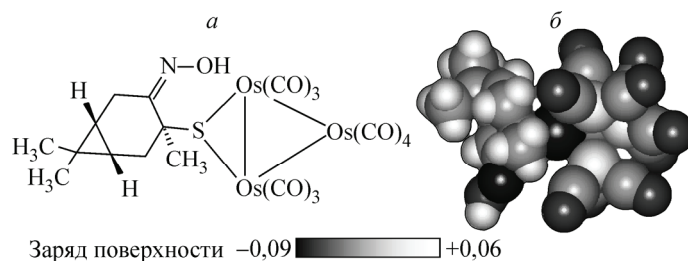
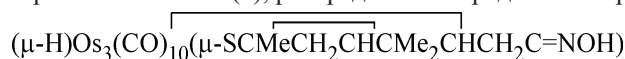


Рис. 4. Строение кластерного комплекса (а), распределение заряда по поверхности в кластере (б)



имодействие, а в кластерах 4 и 5 — внутримолекулярное. Однако оценки заряда поверхности не достаточно для выяснения причин конформационного состояния системы, поскольку стерическая доступность того или иного потенциального центра образования сокращенного внутримолекулярного или межмолекулярного контакта может приводить к различным результатам. Так, амидный водород кластера 1, который может вступать в межмолекулярное взаимодействие, достаточно сильно экранирован терпеноидом, что препятствует его участию в водородных связях. То есть в лиганде отсутствуют группы, способные обеспечить специфические межмолекулярные контакты. Поэтому конформационное состояние данного комплекса должно определяться по большей части внутримолекулярными взаимодействиями, прежде всего, наличием или отсутствием напряжений в структуре в целом и во взаимодействиях между органическим лигандом и неорганической частью. Это же предполагает и большая конформационная жесткость карбобицикла.

В кластере с аминокислотными лигандами положительно заряженными атомами на поверхности могут быть лишь атомы водорода алкильной части и амидный водород, который в любой конформации находится глубоко внутри соединения. В рассматриваемой системе образование межмолекулярного контакта возможно только за счет взаимодействия отрицательно заряженного фрагмента одной молекулы с положительно заряженным атомом водорода алкильной части, что приводило бы к отталкиванию отрицательно заряженных поверхностей кластера, которые имеют большую площадь поверхности. Таким образом, возможность межмолекулярного взаимодействия отрицательно заряженной части кластера с алкильной или амидной группой соседней молекулы крайне маловероятна.

В отличие от кластера с карановым лигандом, содержащим некоординированную оксимную группу, пиненовый ($-\text{ONC}_{10}\text{H}_{14}$) карбобицикл не имеет потенциальных возможностей образования водородных связей $\text{O}-\text{H}\dots\text{O}$, поскольку не имеет аналогичных групп. Вследствие этого на конформационное состояние кластера в кристалле в большей степени должны влиять внутримолекулярные стерические препятствия, нежели эффекты межмолекулярных специфических взаимодействий. Это же предполагает и большая конформационная жесткость каранового ($-\text{ONC}_{10}\text{H}_{14}$) карбобицикла по сравнению с карановым лигандом.

Для изучения влияния внутри- и межмолекулярных взаимодействий на строение комплексов для рассматриваемых систем был выполнен следующий конформационный анализ: поворот относительно связи $\text{N}-\text{C}$ с шагом 15° . Затем для каждого из вариантов полученных конформеров проводился конформационный поиск по поворотам относительно всех остальных связей по алгоритму, описанному в [12, 13] с целью нахождения конформера, отвечающего минимуму потенциальной энергии для данного торсионного угла φ (торсионный угол $\text{H}-\text{N}-\text{C}-\text{H}$) (см. рис. 1). Расчет энергий во всех случаях выполнялся в силовом поле MERA [14—18] с континуальным учетом влияния среды в веществе. Он показал следующие результаты.

Для кристаллического состояния кластера с пиненовым лигандом ($\mu\text{-ONC}_{10}\text{H}_{14}$) возможен свободный конформационный переход между двумя минимумами: $\varphi = 345^\circ$ (глобальный) и $\varphi = 30^\circ$ (локальный минимум), поскольку барьер вращения между минимумами составляет $-22,7$ кДж/моль. В конформациях $\varphi = 345$ и 30° практически не наблюдается напряжений во взаимодействиях органической и неорганической частей кластера. Структура, полученная по результатам РСА данного кластера, не соответствует глобальному минимуму потенциальной энергии. В процессе реакции первоначально образуется не самый выгодный для кристаллической фазы конформер с $\varphi = 180^\circ$. При этом в условиях синтеза его существование достаточно выгодно. Потенциальная кривая внутреннего вращения для комплекса в диоксане при 80°C приведена на рис. 5. Минимум при $\varphi = 180^\circ$ достаточно глубокий, однако более выгодна конформация с $\varphi = 345^\circ$. Отличие по энергии конформации с $\varphi = 180$ от $\varphi = 345^\circ$ составляет всего $14,1$ кДж/моль. То есть эффекты сольватации во многом сглаживают конформационные различия, возникающие в кристалле. Барьер конформационного перехода составляет $49,8$ кДж/моль. Первоначально получающийся конформер с $\varphi = 180^\circ$ способен переходить в конформер с $\varphi = 345^\circ$. Аналогичная картина наблюдается для раствора в гексане, из которого был получен мо-

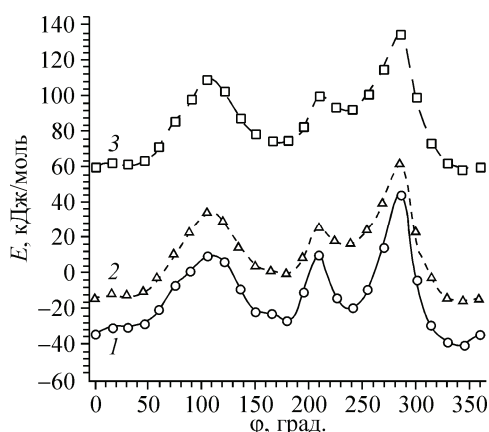


Рис. 5. Потенциальная функция внутреннего вращения относительно связи ON=CC в различных растворителях ($4 \cdot 10^{-4}$ М раствор): 1 — кластер в диоксане, 2 — кластер в гексане, 3 — кластер в смеси гексан—дихлорметан (5:1)

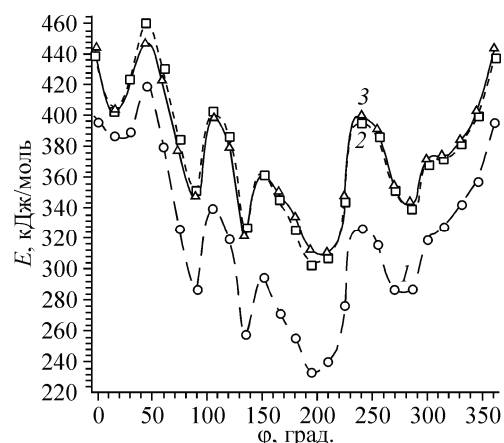


Рис. 6. Потенциальная кривая внутреннего вращения кластерного комплекса 1: 1 — в кристаллическом состоянии, 2 — в диоксане, $t = 80$ °С, 3 — в смеси гексан—хлористый метилен (4:1)

нокристалл. Отличие по энергии конформации с $\varphi = 180$ от $\varphi = 345^\circ$ составляет 15,4 кДж/моль. Барьер перехода составляет 49,9 кДж/моль.

На потенциальной кривой внутреннего вращения (рис. 6) для кристаллического состояния комплекса с пинановым лигандом ($\mu\text{-NHC}_{10}\text{H}_{17}$) наблюдается глобальный минимум при $\varphi = 195^\circ$. Локальные минимумы при $\varphi = 15, 90, 135$ и 270° существенно отличаются по энергии от глобального — на 153,5, 53,4, 24,6 и 53,0 кДж/моль соответственно. Барьер перехода в ближайший локальный минимум (конформационный переход $195^\circ \rightarrow 135^\circ$) составляет 60,1 кДж/моль, что допускает возможность образования альтернативной структуры с $\varphi = 135^\circ$, так же как в случае кластера с пиненовым лигандом, в котором возможен свободный переход между глобальным и локальным минимумами.

Для конформации, соответствующей глобальному минимуму потенциальной энергии (рис. 7, а), характерно отсутствие напряжений во взаимодействии органического лиганда с системой $\text{Os}_3(\text{CO})_{10}$. Благодаря этому практически отсутствуют искажения структуры карбобипцикла. Таким образом, выгодность данной конформации во многом определяется не столько наличием выгодных внутримолекулярных контактов, сколько отсутствием напряжений. Тем не менее наблюдается достаточно короткий контакт атома водорода при C2 карбобипцикла с атомом кислорода O21 (расстояние H...O21 составляет 2,49 Å). Такой контакт отсутствует в, казалось бы, "удобной" конформации с $\varphi = 180^\circ$, что и определяет ее более высокую энергию.

Конформация, соответствующая локальному минимуму с $\varphi = 135^\circ$, характеризуется несколькими сокращенными контактами (см. рис. 7, б), которые должны были бы сделать данную конформацию весьма выгодной, однако в данной конформации возникает серьезное напряжение при взаимодействии атома водорода метильной группы C71 с атомом водорода амидной

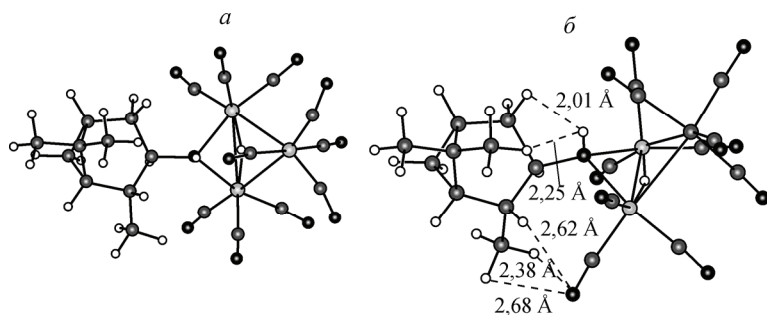


Рис. 7. Кластерный комплекс: а — конформация $\varphi = 195^\circ$, б — конформация $\varphi = 135^\circ$

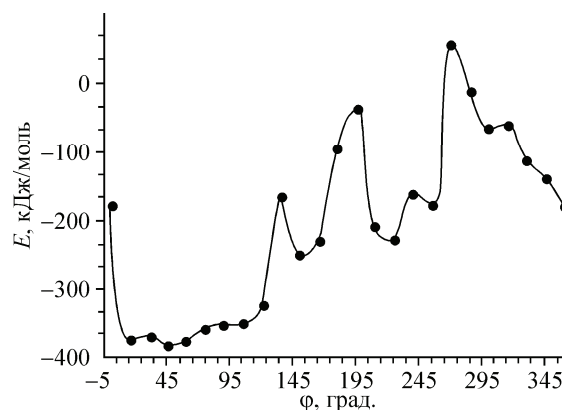
группы (2,25 Å). Существенную долю взаимодействия составляет кулоновское отталкивание. При этом метильная группа C71 не может изменить конформацию и избежать напряжений вследствие высокой жесткости карбобицикла, а также ограниченной возможности внутреннего вращения относительно связи C7—C3 вследствие наличия соседней метильной группы C72. Еще большее напряжение наблюдается для взаимодействия атома водорода при C2 с атомом водорода амидной группы (2,01 Å). Отталкивание атомов водорода при C71 и C2 от атома водорода амидной группы обеспечивает барьер между локальным минимумом при $\varphi = 135^\circ$ и глобальным минимумом.

Моделирование конформационного состояния кластера в условиях синтеза (диоксан, 80 °C) показало следующее. Сольватация кластера не изменяет принципиальный вид потенциальной кривой внутреннего вращения (см. рис. 6). Сохраняются минимумы и максимумы, характерные для индивидуального соединения в кристалле. Слегка смещается положение локального минимума с $\varphi = 270^\circ$. В диоксане данный локальный минимум наблюдается при $\varphi = 285^\circ$. Также происходит некоторое сглаживание потенциальной функции внутреннего вращения, как и в кластере с пиненовым лигандом. Наиболее эффективная сольватация наблюдается при $\varphi = 15^\circ$ вследствие того, что в данной конформации атом водорода аминогруппы слегка приоткрывается для межмолекулярных взаимодействий. Это обеспечивает довольно существенное "углубление" данного локального минимума. В кластере 5 с лигандом $\mu\text{-ONC}_{10}\text{H}_{14}$, в отличие от структуры с лигандом $\mu\text{-NHC}_{10}\text{H}_{17}$, не наблюдается смещения максимумов и минимумов, что определяется различной сольватацией групп комплекса.

Более серьезные изменения потенциальной кривой внутреннего вращения наблюдаются в условиях получения монокристалла в смеси гексан—хлористый метилен (4:1) (см. рис. 6). Положения минимумов и максимумов в общем соответствуют наблюдаемым в индивидуальном веществе. Наличие в смешанном растворителе хлористого метилена с достаточно кислыми атомами водорода приводит к серьезному сглаживанию потенциальной кривой внутреннего вращения. Энергетическое отличие конформеров с $\varphi = 15, 90, 135$ и 285° от глобального минимума составляет 91,7, 35,4, 11,2 и 31,9 кДж/моль соответственно. При этом барьер конформационного перехода $210^\circ \rightarrow 135^\circ$ в смеси гексан—хлористый метилен составляет 51,6 кДж/моль. Такая величина барьера, а также различие энергий конформеров всего на 11,2 кДж/моль допускает возможность возникновения кристаллической фазы с минимумом при $\varphi = 135^\circ$. При этом получаемый кристалл вряд ли может быть достаточно устойчивым, поскольку после его образования обратный переход $135^\circ \rightarrow 195^\circ$ требует преодоления энергетического барьера всего в 35,5 кДж/моль. В случае образования альтернативной кристаллической структуры или смешанного кристалла в условиях перекристаллизации в принципе может произойти самопроизвольный переход к более стабильному конформационному состоянию.

В отличие от кластера с лигандом $\mu\text{-ONC}_{10}\text{H}_{14}$ у кластера с карановым лигандом (структура с приблизительно одинаковым значением положительного и отрицательного заряда поверхности) на потенциальной кривой внутреннего вращения (рис. 8) наблюдается глобальный минимум при $\varphi = 45^\circ$. Другие (локальные) минимумы вряд ли могут реализовываться, поскольку отличие по энергии самого низкого из них ($\varphi = 150^\circ$) от глобального минимума составляет 134,4 кДж/моль. Отличие по энергии двух других ($\varphi = 225$ и 255°) от глобального минимума составляют 155,9 и 206,1 кДж/моль соответственно. Барьер вращения относительно связи Os2S1—C3C10 составляет 439,8 кДж/моль.

Рис. 8. Потенциальная функция внутреннего вращения относительно связи Os2S1—C3C10 в кластерном комплексе 4



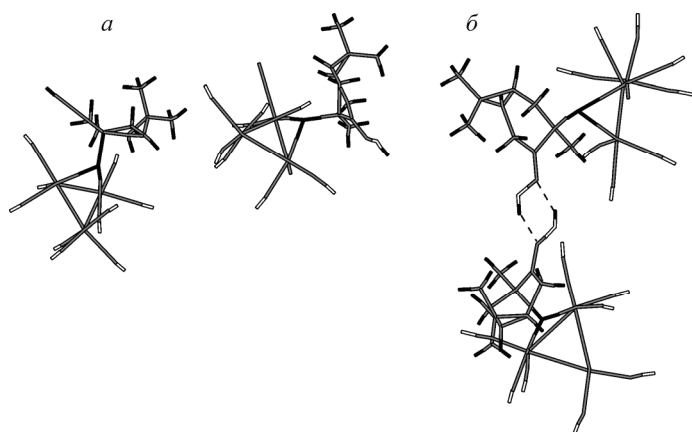


Рис. 9. Фрагменты структуры кластерного комплекса $(\mu\text{-H})\text{Os}_3(\text{CO})_{10}(\mu\text{-SCMeCH}_2\text{CHCMe}_2\text{CHCH}_2\text{C}=\text{NOH})$ в кристаллической ячейке: *a* — упаковка "голова к хвосту" пары молекул в симметрически независимых позициях, *б* — пары молекул, связанные водородными связями

Конформация, соответствующая глобальному минимуму, характеризуется двумя сокращенными контактами, что согласуется с данными РСА. Напряжение бициклической системы органического лиганда минимально. Поверхность органического лиганда не прикрыта карбонильными группами и свободна для образования межмолекулярных контактов. В данной конформации оксимная группа не образует внутримолекулярной водородной связи, что обеспечивает ей возможность образования прочных межмолекулярных контактов. Минимум достаточно широкий, что допускает возможность существования нескольких конформационных состояний вблизи $\varphi = 45^\circ$. Действительно, в кристаллической решетке данного кластерного комплекса, в соответствии с данными рентгеноструктурных исследований, реализуется явление контактной конформации с расположением двух конформаций соединения в симметрически независимых позициях с углом, близким к 45° . Пары молекул в симметрически независимых позициях упаковываются по типу "голова к хвосту" (рис. 9, *a*), взаимодействие между соседними парами обеспечивается водородными связями между оксимными группами (см. рис. 9, *б*).

В отличие от кластера с пиненовым лигандом ($\mu\text{-ONC}_{10}\text{H}_{14}$), для которого конформация глобального минимума не отвечает данным РСА, в структуре с карановым лигандом глобальный минимум соответствует конформации глобального минимума, что связано с возможным вращением в комплексе с пиненовым лигандом ($\mu\text{-ONC}_{10}\text{H}_{14}$) относительно связи $\text{Os}2\text{S}1\text{—C}3\text{C}10$ и затруднительным вращением в структуре с карановым лигандом.

На потенциальной кривой внутреннего вращения кластера с аланиновым производным глобальный минимум наблюдается при 180° (аналогичная ситуация наблюдается у кластера с глициновым лигандом) (рис. 10). Минимум очень узкий, что обусловлено возможностью образования сокращенных контактов водородов метильной группы аланинового радикала с экваториальной и аксиальной группами $\text{C}=\text{O}$ только в очень узком угловом интервале. Одновременно наблюдается сокращенный контакт атома водорода при α -атоме углерода аланинового радикала с двумя экваториальными группами $\text{C}=\text{O}$. При такой конформации значительно ослабляются силы отталкивания атомов кислорода сложноэфирной группы от атомов кислорода

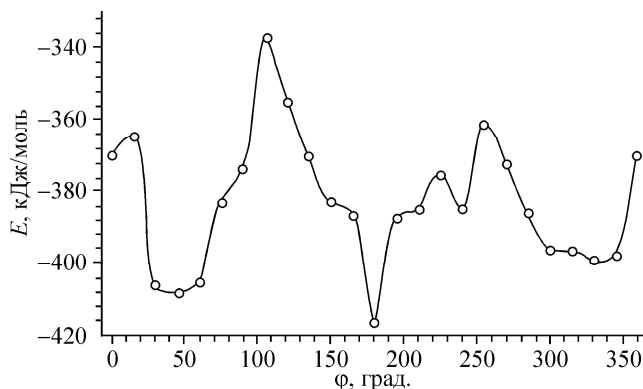


Рис. 10. Потенциальная функция внутреннего вращения относительно связи HC—NH в кластере с аланиновым лигандом. Расчет для индивидуального вещества

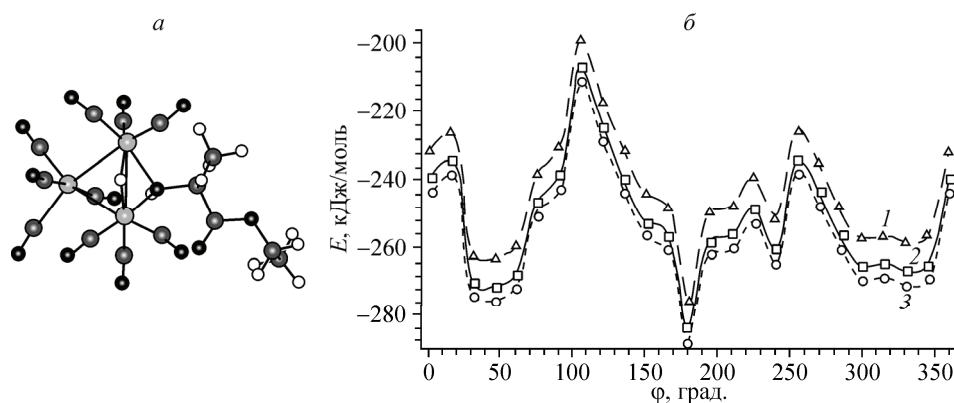


Рис. 11. Кластер с аминокислотным лигандом: *a* — структура кластера с аланиновым лигандом, $\varphi = 180^\circ$; *б* — потенциальная функция внутреннего вращения относительно связи HC—NH кластера с аминокислотным лигандом в растворителях ($1, 1,1 \cdot 10^{-2}$ М раствор): 1 — октан (80°C), 2 — толуол (20°C), 3 — гексан—хлористый метилен (2:1) (20°C)

экваториальных групп C=O кластера. При этом вся сложноэфирная группа освобождается для межмолекулярных взаимодействий, что приводит к дополнительному выигрышу в энергии данной конформации в веществе. Минимум сопровождаются два плеча, соответствующие образованию одного из сокращенных контактов водорода метильной группы аланинового фрагмента с экваториальной группой C=O (рис. 11, *a*).

Также произведен расчет потенциальных кривых внутреннего вращения аланинового фрагмента относительно связи C—N в растворителях, в которых производилось получение, перекристаллизация кластера с аланиновым лигандом и регистрация ЯМР спектров, т.е.: в октане, гексане—хлористом метиле (2:1), толуоле (см. рис. 11, *б*). Следует отметить отсутствие принципиального отличия кривых в индивидуальном веществе и в растворителях, что свидетельствует об отсутствии специфической сольватации групп. Наблюдается лишь незначительное изменение в барьерах вращения и относительных глубинах минимумов. Аналогичная ситуация наблюдается у кластера с глициновым производным. Растворители приводят к некоторому понижению барьеров, но повышают энергию локальных минимумов по отношению к глобальному, т.е. сольватация конформеров, соответствующих локальным минимумам, менее выгодна, нежели основного. Величина энергии барьера вращения достаточно высока и лежит в пределах $76,8\text{—}78,7$ кДж/моль во всех рассмотренных условиях, что препятствует свободному вращению относительно связи HC—NH в кластере.

ВЫВОДЫ

Таким образом, в кристалле, несмотря на различные значения доли положительных и отрицательных поверхностей, а также барьера вращения (табл. 2), конформационное состояние

Т а б л и ц а 2

Значение барьера вращения в различных кластерах

Кластер	Потенциальный лиганд	Формула	Барьер вращения, кДж/моль	S ₊ , %	S ₋ , %
1	2-CH ₃ , 3-NH-пинан	($\mu\text{-H}$)Os ₃ (CO) ₁₀ ($\mu\text{-NH}$ C ₁₀ H ₁₇)	60,1	36,1	63,9
2	Этиловый эфир глицина	($\mu\text{-H}$)Os ₃ (CO) ₁₀ ($\mu\text{-NHCH}_2\text{COOC}_2\text{H}_5$)	43,8	37,5	62,5
3	Этиловый эфир аланина	($\mu\text{-H}$)Os ₃ (CO) ₁₀ ($\mu\text{-NHCH}(\text{CH}_3)\text{COOC}_2\text{H}_5$)	78,6	38,3	61,7
4	3-SH, 4-N=OH-каран	($\mu\text{-H}$)Os ₃ (CO) ₁₀ ($\mu\text{-SC}_{10}\text{H}_{15}\text{NOH}$)	439,8	44,0	56,0
5	2=CH ₂ , 3-NOH- пинен	($\mu\text{-H}$)Os ₃ (CO) ₁₀ ($\mu\text{-ONC}_{10}\text{H}_{14}$)	22,7	41,1	58,9

кластера определяется внутримолекулярными взаимодействиями. В среде растворителя конформационное состояние кластера определяется межмолекулярными взаимодействиями с растворителем, приводящим к понижению барьеров вращения. Произведены количественные оценки барьеров вращения в различных средах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Matsumoto T., Shishido A., Morita H. et al.* // *Tetrahedron*. – 2002. – **58**. – P. 5135.
2. *Tahtinen P., Bagno A., Klika K.D. et al.* // *J. Amer. Chem. Soc.* – 2003. – **125**. – P. 4609.
3. *Zorky P.M., Potekhin K.A., Dashevskaya E.E.* // *Acta Chim. Hung.* – 1993. – **130**. – P. 221.
4. *Zorky P.M.* // *J. Mol. Struct.* – 1996. – **374**. – P. 9.
5. *Süss-Fink G., Jenke T., Heitz H.* // *J. Organomet. Chem.* – 1989. – **379**. – P. 311.
6. *Максаков В.А., Кирич В.П., Головин А.В.* // *Изв. АН. Сер. хим.* – 1995. – № 10. – С. 2021.
7. *Максаков В.А., Подберезская Н.В., Голубовская Е.В. и др.* // *Журн. неорганической химии*. – 1996. – **41**. – С. 64.
8. *Потемкин В.А., Максаков В.А., Корень В.С.* // *Журн. структур. химии*. – 2005. – **46**, № 1. – С. 100.
9. *Потемкин В.А., Максаков В.А., Кирич В.П.* // Там же. – 2003. – **44**, № 5. – С. 810.
10. *Потемкин В.А., Максаков В.А., Корень В.С.* // Там же. – 2007. – **48**, № 2. – С. 230.
11. *Потемкин В.А., Максаков В.А., Кирич В.П.* // Там же. – 2004. – **45**, № 3. – С. 430.
12. *Nakamura S., Hirose H., Ikeguchi M., Doi J.* // *J. Phys. Chem.* – 1995. – **99**. – P. 8374.
13. *Ponder J.W., Richards F.M.* // *J. Comp. Chem.* – 1987. – **8**. – P. 1016.
14. *Потемкин В.А., Барташевич Е.В., Белик А.В.* // *Журн. физ. химии*. – 1998. – **72**, № 4. – С. 650.
15. *Потемкин В.А., Барташевич Е.В., Белик А.В.* // Там же. – 1996. – **70**, № 3. – С. 448.
16. *Потемкин В.А., Белик А.В., Красильников В.Б.* // *Журн. структур. химии*. – 1995. – **36**, № 3. – С. 564.
17. *Sukharev Y.I., Potemkin V.A., Markov B.A.* // *Colloids and Surfaces, A*. – 2001. – **194**. – P. 75.
18. *Сухарев Ю.И., Потемкин В.А., Марков Б.А. и др.* // *Мат. моделир.* – 1999. – **1**, № 12. – С. 77.