

Механизм формирования нанокавитандов семейства кукурбит[*n*]урилов. Квантово-химическое моделирование.

© Гришаева Татьяна Николаевна,¹ Маслий Алексей Николаевич,^{1*}
Баковец Владимир Викторович² и Кузнецов Андрей Михайлович^{1*+}

¹ Кафедра неорганической химии. Казанский государственный технологический университет.
ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия. Тел.: (843) 231-41-22. E-mail: am_kuznetsov@kstu.ru

² пр. Академика Лаврентьева, 3. Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН.
г. Новосибирск, 630090. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нанокавитанды, кукурбит[*n*]урилы, механизм формирования, метод функционала плотности РВЕ.

Аннотация

На основе метода функционал плотности версии РВЕ проведено квантово-химическое исследование механизма формирования кукурбит[*n*]урилов СВ[*n*]. Из анализа термодинамических характеристик отдельных стадий формирования СВ[*n*] сделан вывод о том, что связанные с олигомерами молекулы воды, образующиеся в процессе синтеза, оказывают влияние на преимущественное образование СВ[6] по сравнению с другими нанокавитандами семейства СВ[*n*].