

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ.

Актуальность работы. Методы молекулярной спектроскопии, давно и успешно применяются при исследовании уретановых соединений и полиуретанов. Полимерные композиции на основе различных по структуре полиуретанов находят широкое применение в различных отраслях промышленности. К настоящему времени накоплен обширный экспериментальный материал по колебательным спектрам полиуретанов и модельных уретанов, входящих в состав полимерной цепи. Физико-химические свойства полиуретанов определяются как составом цепи, так и конформацией составляющих фрагментов и системой водородных связей, которая практически всегда в них присутствует. До сих пор нет полного анализа колебательного спектра уретановой группы, ее структурных и конформационных особенностей, а также специфики межмолекулярного водородного связывания. Для восполнения некоторых пробелов могут быть использованы современные квантово-химические методы. Практически нет теоретического анализа уретановых комплексов, образованных водородными связями. В полимерных соединениях образуется сложная система Н-связей, которая может привести к образованию кооперативных водородных связей разных по длине размеров. Вопросы проявления кооперативности в уретановых соединениях до настоящего времени не изучены. При использовании ИК-спектроскопии в качестве аналитического метода исследования уретанов особую важность имеет достоверное отнесение полос поглощения в колебательных спектрах. Большинство работ, посвященных уретанам, достаточно единообразно описывают отнесение хорошо известных высокочастотных «амидных» характеристических частот, тогда как поведение полос в области ниже 1500 см^{-1} и особенно в далеком ИК диапазоне спектра практически не изучалась. Перечисленные проблемы рассматриваются в данной работе, что и определяет ее **актуальность**.

Целью настоящей работы является установление закономерностей поведения характеристических частот уретановой группы, обусловленных изменением молекулярной структуры, конформационного состояния и влиянием межмолекулярной водородной связи, с использованием квантово-химического метода функционала плотности.

Выбор в качестве **объектов исследования** уретановых соединений определяется их практической важностью и недостаточной изученностью современными квантово-химическими методами спектральных и структурных особенностей при водородном связывании и конформационных изменениях.

Конкретные задачи включают в себя:

1. Установление оптимальных методов расчета частот и форм характеристических колебаний уретановой группы на основе обработки результатов расчетов и эксперимента.
2. Проведение квантово-химических расчетов структуры и колебательных частот ряда модельных уретанов, определение спектральных особенностей,