## УДК 542.8:544.14; 542.8:539.19

## ПРОСТРАНСТВЕННАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ОЛИГОМЕРА ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ ПЭГ5 С ИОННОЙ ПАРОЙ КСІ

Демухамедова Светлана Давидовна<sup>1</sup>, Гаджиев Захид Исмаил оглы<sup>2</sup> <sup>1,2</sup>Институт Проблем физики, Бакинский Государственный Университет *ул. З.Халилова, 23, г. Баку, АZ-1148, Азербайджан* 

Аннотация: В работе методом молекулярной динамики создана модель комплекса олигомера полиэтиленгликоля ПЭГ5 с ионной парой КСІ. Полученная модель исследовалась квантово-химическим ab initio методом Хартри-Фока с базиса 6-31G. Проведен расчет пространственной использованием u электронной структуры, а также расчет теоретического колебательного спектра комплекса олигомера полиэтиленгликоля ПЭГ5 с ионной парой КСІ. структурные перестройки и изменения в Проанализированы основные электронной структуре при образовании комплекса. Проведено сравнение полученного комплекса с ранее исследованными ПЭГ5 и комплексами ПЭГ5+К и  $\Pi \Im \Gamma 5 + Cl.$ 

*Ключевые слова*: полиэтиленгликоль, олигомеры, комплекс, квантово-химические расчеты, пространственная и электронная структура

В последние годы возросла роль молекулярного моделирования в исследовании структуры и свойств многоатомных молекул. Методы молекулярного моделирования позволяют ответить на многие вопросы, недоступные экспериментальным методам исследования. В частности, они используются для исследования свойств комплексов полимеров с катионами или анионами металлов. Полиэтиленгликоль, как известно, образует стабильные комплексы с ионами щелочных металлов, имеющие большое практическое применение [1,2].

Ранее нами методами квантовой химии были исследованы пространственные структуры комплексов олигомеров полиэтиленгликоля ПЭГ4 и ПЭГ5 с атомами натрия, калия и хлора [3-10], а также комплексы ПЭГ4 и ПЭГ5 с ионной парой NaCl и ПЭГ4 с ионной парой KCl. В данной работе проведено теоретическое моделирование и квантовохимический расчет комплекса олигомера ПЭГ5 с ионной парой КСІ. На первом этапе расчета для создания комплекса ПЭГ5+КС1 использовался метод молекулярной динамики. К середине развернутой модели олигомера полиэтиленгликоля из 5 повторяющихся звеньев на расстоянии ван-дер-ваальсовских контактов была размещена ионная пара KCl. В процессе оптимизации методом молекулярной динамики за счет контактов атомов О и Н полиэтиленгликолевой цепочки с ионной парой KCl образуется комплекс ПЭГ5+КСІ. Полученная модель исследована неэмпирическим квантовохимическим методом расчета HF с базисом 6-31G, с использованием программного комплекса Gaussian-09. На основе получены геометрические, энергетические квантовохимических расчетов были И электронные параметры комплекса ПЭГ5+КСІ.



Рис. 1. Пространственные структуры моделей комплекса полиэтиленгликоляПЭГ5+КСІ: (а) после молекулярной динамики ; (b) после оптимизации методом ab initio HF

На рисунке 1 приведена модель исследуемого комплекса ПЭГ5+КСІ. Результаты расчета пространственной структуры комплекса ПЭГ5 с ионной парой КСІ, а также для сравнения соответствующие значения ранее изученных нами структур чистого ПЭГ5 и его комплексов с атомами калия и хлора, приведены в таблицах 1 и 2. Длины валентных связей принимают стандартные значения. Все длины С-С связей в чистом ПЭГ5 и в его комплексах с атомами калия, хлора и с ионной парой КСІ ~ 1.51 Å. Длины С-О связей во всех комплексах, рассчитанных по методу HF ~ 1.40 Å. Расстояние в комплексе ПЭГ5+КСІ между атомами калия и хлора составляет 3.07 Å.

Как видно из таблицы 1, образование комплекса ПЭГ5+Cl практически не приводит к изменению в значениях валентных углов по сравнению с чистым олигомером ПЭГ5. При образовании комплекса ПЭГ5+К наблюдается незначительное изменение валентных углов - уменьшение углов  $O_1C_2C_3$  на  $5.1^\circ$ ,  $C_{12}O_{13}C_{14}$  на  $2.4^\circ$  и  $O_4C_5C_6$  и  $C_{14}C_{15}O_{16}$  на 1.8 и  $1.6^\circ$  соответственно и увеличение углов  $O_{13}C_{14}C_{15}$  на  $2.7^\circ$  и  $C_{11}C_{12}O_{13}$  на  $1.3^\circ$ . При образовании комплекса ПЭГ5 с ионной парой КCl угол  $C_{12}O_{13}C_{14}$  уменьшается на  $3.5^\circ$ , а углы  $C_2C_3O_4$  и  $O_{13}C_{14}C_{15}$  увеличиваются соответственно на  $3.9^\circ$  и  $2.5^\circ$ . Углы  $C_3O_4C_5$ ,  $O_{10}C_{11}C_{12}$  и  $C_{11}C_{12}O_{13}$  увеличиваются на  $1.9^\circ$ ,  $1.5^\circ$  и  $1.1^\circ$ , а углы  $O_1C_2C_3$  и  $C_{14}C_{15}O_{16}$  уменьшается на  $1.8^\circ$  и  $1.2^\circ$ .

Угол	ПЭГ5	ПЭГ5+К	ПЭГ5+С1	ПЭГ5+КС1	Угол	ПЭГ5	ПЭГ5+К	ПЭГ5+С1	ПЭГ5+КС1
$O_1C_2C_3$	112.6	107.5	112.2	110.4	$C_{8}C_{9}O_{10}$	109.5	109.0	109.6	109.5
$C_2C_3O_4$	108.8	108.3	108.2	113.1	$C_9O_{10}C_{11}$	114.9	114.5	114.7	114.3
$C_3O_4C_5$	114.2	115.1	114.7	16.6	$O_{10}C_{11}C_{12}$	108.1	109.1	108.1	109.6
$O_4C_5C_6$	110.2	108.4	109.9	109.3	$C_{11}C_{12}O_{13}$	107.8	109.1	108.0	109.1
$C_5C_6O_7$	110.4	109.6	110.3	110.2	$C_{12}O_{13}C_{14}$	118.1	114.9	118.6	115.1
$C_6O_7C_8$	113.6	113.9	113.6	114.1	$O_{13}C_{14}C_{15}$	106.5	109.2	106.8	109.3
$O_7C_8C_9$	109.8	109.8	109.8	109.8	$C_{14}C_{15}O_{16}$	110.8	109.2	110.9	109.7

Таблица 1. Валентные углы (град) в ПЭГ5 с атомом натрия, хлора и ионной парой КСІ

Сравнивая значения двугранных углов в комплексе ПЭГ5+КС1 с чистым олигомером ПЭГ5 и его комплексами с калием и хлором (табл.2) видим, что главное отличие в углах внутреннего вращения этого комплекса наблюдается с левого края цепочки. Так двугранный угол  $O_1C_2C_3O_4$  также поворачивается в гош конформацию (~60°), но в сторону, противоположную, чем в других моделях, следующий за ним угол  $C_2C_3O_4C_5$  в отличие транс-конфигураций в других моделях сворачивается в цис-конфигурацию (~90°), а угол  $C_3O_4C_5C_6$ , отличается от чистого транс-расположения в других моделях на ~20°. Углы внутреннего вращения  $C_{11}C_{12}O_{13}C_{14}$  и  $C_{12}O_{13}C_{14}C_{15}$  как и в комплексе ПЭГ5+К оказываются в чистой транс конфигурации, отличие от чистого ПЭГ5 и комплекса ПЭГ5+С1 составляет 25° и 35° соответственно.

Угол	ПЭГ5	ПЭГ5+К	ПЭГ5+С1	ПЭГ5+КС1	Угол	ПЭГ5	ПЭГ5+К	ПЭГ5+С1	ПЭГ5+КС1
$O_1 C_2 C_3 O_4$	-67.3	-61.8	-65.6	61.5	$O_{13}C_{14}C_{15}O_{16}$	-62.4	-65.6	-62.4	-66.2
$C_2C_3O_4C_5$	179.9	173.5	179.0	93.1	$C_{3}C_{2}O_{1}H17$		-177.1	63.3	130.7
$C_3O_4C_5C_6$	175.9	175.3	177.1	158.4	$C_{14}C_{15}O_{16}H_{38}$		158.9	53.5	143.5
$O_4C_5C_6O_7$	74.8	63.4	74.5	68.6	$C_3C_2O_1K$		58.5		-
$C_5C_6O_7C_8$	175.2	-174.3	176.5	-176.1	C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> O <sub>16</sub> K				53.2
$C_6O_7C_8C_9$	-175.9	177.6	-174.9	-176.2	C <sub>15</sub> O <sub>16</sub> KCl				100.1
$O_7 C_8 C_9 O_{10}$	-71.6	-63.0	-71.9	-64.0	H <sub>38</sub> O <sub>16</sub> KCl				-7.9
$C_8 C_9 O_{10} C_{11}$	176.8	-167.6	179.5	-173.7	C <sub>15</sub> O <sub>16</sub> KO <sub>7</sub>				-78.9
$C_9O_{10}C_{11}C_{12}$	-174.6	-179.6	-177.7	-178.7	$C_6O_7KO_{16}$				-102.5
$O_{10}C_{11}C_{12}O_{13}$	65.5	68.1	65.2	65.8	C <sub>8</sub> O <sub>7</sub> KO16				42.6
$C_{11}C_{12}O_{13}C_{14}$	-154.8	175.2	-148.9	173.9	C <sub>8</sub> O <sub>7</sub> KCl				-136.4
C <sub>12</sub> O <sub>13</sub> C <sub>14</sub> C <sub>15</sub>	149.6	-168.8	144.0	-175.8	C <sub>6</sub> O <sub>7</sub> KCl				78.5

Таблица 2. Двугранные углы (град) в ПЭГ5 и его комплексах с К, СІ и КСІ

Для более наглядной картины изменений, происходящих в пространственной структуре ПЭГ5 при образовании различных комплексов в табл.3 приведены межатомные расстояния между несвязанными атомами кислорода и атомами калия и хлора с кислородами и близлежащими водородами в комплексах ПЭГ5+КС1 и ранее нами исследованных чистого ПЭГ5 и его комплексов с атомами калия и хлора. После молекулярной динамики длина связи в ионной паре КСl составляет 3.02 Å, а после оптимизации методом HF она немного удлиняется (3.07 Å) (табл.3). После молекулярной динамики расстояние между практически всеми несвязанными атомами кислорода увеличивается. Больше всего эти изменения отражаются на расстоянии между концевыми атомами полости кислорода O<sub>1</sub>-O<sub>16</sub>, которое увеличивается на 2.37 Å. И если это расстояние после оптимизации методом молекулярной динамики составляло 2.88 Å, то после оптимизации методом HF оно становится равным 5.25 Å. На 1.70Å отдаляются друг от друга атомы O<sub>16</sub>-O<sub>7</sub>, на 1.45Å атомы O<sub>1</sub>-O<sub>13</sub> и O<sub>16</sub>-O<sub>4</sub> и на 1.16Å атомы O<sub>16</sub>-O<sub>10</sub>. Приближаются друг к другу на 0.3Å только атомы кислорода О<sub>1</sub>-О<sub>7</sub> и О<sub>4</sub>-О<sub>10</sub>.

	ПЭГ5 +К	Cl	ПЭГ5	ПЭГ5 +К	ПЭГ5 +С1
Молекулярная динамика			Мет	год HF	
Атомы	Расстояние	Расстояние	Расстояние	Расстояние	Расстояние
O <sub>1</sub> -O <sub>4</sub>	2.89	2.89	2.69	2.74	2.85
O <sub>4</sub> -O <sub>7</sub>	2.94	2.88	2.83	2.79	2.93
O <sub>7</sub> -O <sub>10</sub>	2.89	2.83	2.82	2.80	2.89
O <sub>10</sub> -O <sub>13</sub>	2.77	2.83	2.85	2.84	2.77
O <sub>13</sub> -O <sub>16</sub>	2.77	2.84	3.60	2.82	2.78
<b>O</b> <sub>1</sub> - <b>O</b> <sub>7</sub>	5.08	4.82	5.06	4.61	4.99
O <sub>1</sub> -O <sub>10</sub>	6.16	6.66	5.65	5.10	6.02
O <sub>1</sub> -O <sub>13</sub>	5.30	6.74	5.70	4.43	5.30
O <sub>1</sub> -O <sub>16</sub>	2.88	5.25	2.99	2.86	2.90
O <sub>16</sub> -O <sub>10</sub>	3.75	4.91	5.01	4.97	3.55
O <sub>16</sub> -O <sub>7</sub>	3.96	5.66	5.97	5.84	3.81
O <sub>16</sub> -O <sub>4</sub>	3.58	5.03	4.73	5.15	3.56
O <sub>4</sub> -O <sub>13</sub>	5.73	5.72	5.91	5.54	5.84
$0_{7}-0_{12}$	4.70	4.86	5.32	4.93	4.78

Таблица 3. Межатомные расстояния (Å)

O <sub>4</sub> -O <sub>10</sub>	5.16	4.88	5.16	4.64	5.15
К-О1	4.33	4.03		2.74	
К-О4	3.15	2.93		3.16	
К-О7	2.20	2.82		2.96	
К-О <sub>10</sub>	2.51	2.94		2.97	
К-О <sub>13</sub>	3.57	2.90		2.96	
К-О <sub>16</sub>	2.35	2.85		3.01	
$Cl - O_1$	2.32	3.28			4.58
$Cl - O_{16}$	2.29	3.20			2.94
Cl-H <sub>17</sub>	1.82	2.38			3.83
Cl-H <sub>38</sub>	2.07	2.35			3.36
K-Cl	3.02	3.07			-

Атом калия после оптимизации методом HF отдаляется от атомов кислорода O<sub>7</sub>, O<sub>16</sub> и O<sub>10</sub> на 0.62, 0.5 и 0.43Å соответственно, приближаясь к атомам O<sub>13</sub>, O<sub>1</sub> и O<sub>4</sub> на 0.7, 0.3 и 0.22Å. При этом расстояние К-О варьируется в пределах 2.82÷2.93Å. Ближе всего он располагается относительно кислородов  $O_7$  (2.82Å) и  $O_{16}$  (2.85Å), образуя координационные связи.

Атом хлора после оптимизации методом молекулярной динамики ближе всего располагается к концевым атомам водорода ПЭГ5 H<sub>17</sub>(1.82Å) и H<sub>38</sub>(2.07Å). Оптимизация HF удаляет эти атомы соответственно на 0.56 и 0.28Å, и атом хлора располагается практически



а о Рис. 2. Модели ПЭГ5+КСІ в профиль

на одинаковом расстоянии 2.38 и 2.35Å от H<sub>17</sub> и H<sub>38</sub>.

рис.2 приведены модели комплекса Ha ПЭГ5+КСІ после молекулярной динамики (a) и после оптимизации методом HF (б) при их повороте перпендикулярно плоскости рисунка. Как видно, после молекулярной динамики, ионная пара КСІ

располагается практически посередине комплекса так, что атомы калия и хлора оказываются по разные стороны от плоскости полости (рис.2, а). Дальнейшая оптимизация структуры методом НF поднимает ионную пару так, что атом калия располагается в плоскости полости ближе к концевым атомам, а атом хлора поднят над полостью комплекса. Благодаря взаимодействию хлора с концевыми водородами цепочки ПЭГ5 концевая группа O<sub>1</sub>H<sub>17</sub> также приподнимается вверх, выходя из плоскости полости (рис.2, b).

В таблице 4 приведены заряды на атомах комплекса ПЭГ5 с ионной парой КСІ и для сравнения – заряды на атомах чистого ПЭГ5 и его комплексов с калием и хлором.

ruotingu 1. suprigir nu urotinur i bontininishpobunnisht kommeneur 1161 b									
Атом	ПЭГ5	ПЭГ5+К	ПЭГ5+С1	ПЭГ5+КСІ	Атом	ПЭГ5	ПЭГ5+К	ПЭГ5+С1	ПЭГ5+КСІ
01	-0.687	-0.660	-0.686	-0.787	O <sub>10</sub>	-0.639	-0.659	-0.642	-0.488
<b>C</b> <sub>2</sub>	0.113	0.099	0.112	-0.179	C <sub>11</sub>	0.116	0.095	0.116	-0.097
<b>C</b> <sub>3</sub>	0.107	0.096	0.106	-0.010	C <sub>12</sub>	0.118	0.111	0.116	-0.163
<b>O</b> <sub>4</sub>	-0.643	-0.650	-0.644	-0.457	O <sub>13</sub>	-0.654	-0.654	-0.656	-0.483
C <sub>5</sub>	0.126	0.091	0.126	-0.259	C <sub>14</sub>	0.101	0.110	0.098	-0.001
C <sub>6</sub>	0.116	0.115	0.115	-0.109	C <sub>15</sub>	0.107	0.087	0.104	-0.268
<b>O</b> <sub>7</sub>	-0.637	-0.654	-0.638	-0.498	O <sub>16</sub>	-0.675	-0.668	-0.681	-0.798
C <sub>8</sub>	0.117	0.118	0.116	-0.133	К		-0.186		0.795
C9	0.119	0.087	0.118	-0.147	Cl			-0.017	-0.826

Габлица 4.	. Заряды на атомах	в оптимизированных	комплексах ПЭГ5
------------	--------------------	--------------------	-----------------

Наибольшее перераспределение зарядов при образовании комплекса ПЭГ5+К наблюдается на атомах углеродов C<sub>5</sub> (~0,04), C<sub>9</sub> и C<sub>3</sub> (~0,03) и кислородов O<sub>7</sub> и O<sub>10</sub> (~0,02). При образовании комплекса ПЭГ5+Cl изменения в зарядовом распределении практически отсутствуют, что объясняется расположением атома хлора не в полости ПЭГ5, а над полостью на определенном расстоянии от полиэтиленгликолевой цепочки. Наибольшие изменения связаны с понижением заряда на атоме кислорода O<sub>16</sub> (~0,006) и атомах кислорода O<sub>10</sub> и углеродов C<sub>14</sub> и C<sub>15</sub> (~0,003).

Образование комплекса ПЭГ5 с ионной парой КСІ приводит к очень существенному зарядовому перераспределению – заряды на всех атомах углерода поменяли знак на противоположный и стали электроотрицательными. Наибольшие изменения наблюдаются на атомах углерода С<sub>5</sub>, С<sub>15</sub>, С<sub>2</sub> и С<sub>12</sub>, на которых заряды понизились соответственно на 0.385, 0.375, 0.292 и 0.281 единиц заряда. На атомах С<sub>9</sub>, С<sub>8</sub>, С<sub>6</sub> и С<sub>11</sub> заряды понизились ~0.2 единиц заряда. Также понизились заряды на концевых атомах кислорода О<sub>1</sub> и О<sub>16</sub> ~ 0.1 ед.заряда. Эти атомы приобрели большой отрицательный заряд – O<sub>1</sub> (-0.787), O<sub>16</sub> (-0.798). У других атомов кислорода заряды повысились (на O<sub>4</sub> на 0.186, на O<sub>13</sub> на 0.171, на O<sub>7</sub> на 0.139 и на О<sub>10</sub> на 0.151 единиц заряда). Все эти зарядовые изменения произошли благодаря взаимодействию атомов полиэтиленгликолевой цепочки с ионной парой KCl. Надо отметить, что в комплексах ПЭГ5+К у калия был небольшой отрицательный заряд (-0.186), а в комплексе ПЭГ5+Сl у хлора величина заряда составляла всего лишь (-0.017). При образовании ионной пары KCl атом калия отдает электронную плотность атому хлора и между образовавшимися ионами K<sup>+</sup> и Cl<sup>-</sup> возникают силы электростатического притяжения, в результате чего образуется ионная связь. Поэтому в комплексе ПЭГ5+КСl у калия большой положительный заряд (0.795), а у хлора - большой отрицательный заряд (-0.826).

В таблице 5 приведены энергетические параметры и дипольные моменты ПЭГ5 и его комплексов по результатам расчета метода HF.

ruosinių 5. Shepretii iečkie napamerpis ir giniosibilise momentis r 1965 ir ero komis								
Energy and dipole moment	ПЭГ5	ПЭГ5+К	ПЭГ5+С1	ПЭГ5+КС1				
Total energy (RHF, au)	-840.636	-1439.773	-1300.087	-1899.358				
Dipole moment (Debye)	4.298	11.864	4.272	12.491				

Таблица 5. Энергетические параметры и дипольные моменты PEG5 и его комплексов

Как следует из результатов расчета, при захвате олигомером ПЭГ5 атома калия энергия образованного комплекса ПЭГ5+К по сравнению с чистым олигомером ПЭГ5 уменьшается на 599 ат.ед., а дипольный момент возрастает на 7.6 D. При связывании атома хлора энергия образованного комплекса ПЭГ5+Cl уменьшается по сравнению с чистым ПЭГ5 на 459 ат.ед., а дипольный момент уменьшается на 0.026 D. При образовании комплекса ПЭГ5 с ионной парой КCl полная энергия комплекса уменьшается по сравнению с чистым олигомером ПЭГ5 на 1059 ат.ед., по сравнению с комплексом ПЭГ5+К на 460 ат.ед, а с комплексом ПЭГ5+Cl на 599 ат.ед. Комплекс ПЭГ5+КCl оказывается энергетически более выгодным, чем чистый олигомер ПЭГ5 и его комплексы с изолированными атомами калия или хлора. Дипольный момент при образовании комплекса ПЭГ5+КCl увеличивается на 8.2 D по сравнению с чистым ПЭГ5 и его комплексом с хлором и всего на 0.6 D по сравнению с комплексом ПЭГ5+К.

Особо важное значение приобретает энергетическая разность между орбиталями основного (НОМО) и возбужденного (LUMO) состояний. Очевидно, что чем меньше энергетическая щель между этими орбиталями, тем легче диссоциировать молекулу. В табл. 6 приведены значения энергии НОМО и LUMO орбиталей чистого олигомера полиэтиленгликоля ПЭГ5 и его комплексов с атомами калия, хлора и с ионной парой КСІ по методу HF/6-31G.

Complexes	ПЭГ-5		ПЭГ	5+К		ΠЭΓ5+Cl			ПЭГ5+КС1
		α-	орбитали	сали β-орбита		α-0	орбитали	β-орбитали	
HOMO	-0.40532	74	-0.43589	74	-0.43580	74	-0.40727	74 -0.00059	-0.33415
LUMO	0.23095	75	-0.07861	75	0.05045	75	0.22926	75 0.22970	0.00209

Таблица 6. НОМО и LUMO обитали в PEG5 и его комплексах

Как видно, энергетическая щель между орбиталями НОМО и LUMO при образовании комплексов ПЭГ5 с атомом хлора практически не меняется, при образовании комплекса с калием уменьшается на 0.27899, при образовании комплекса с ионной парой КСІ уменьшается на 0.30003.

Таким образом, олигомеры полиэтиленгликоля ПЭГ5 предрасположены к связыванию атомов калия или хлора, но особенно, к связыванию ионной пары KCl, поскольку такое комплексообразование приводит к энергетической стабилизации структуры и наибольшему количеству связывающих взаимодействий атомов кислорода с катионом калия и аниона хлора с концевыми атомами водорода.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Chen J., Spear S.K., Huddleston J.G., Rogers R.D. Polyethylene glycol and solutions of polyethylene glycol as green reaction media. Green Chem., 2005, vol. 7, No. 2, pp. 64-82.
- Chen J., Spear S. K., Huddleston J. G., Holbrey J.D., Swatloski R.P., Rogers R.D. Application of poly(ethylene glycol)-based aqueous biphasic systems as reaction and reactive extraction media. Ind. End.Chem.Res., 2004, vol. 43, No. 17, pp. 5358-5364.
- Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Исследование пространственной структуры олигомеров полиэтиленгликоля PEG4+Cl и PEG5+Cl с атомом хлора. Материалы докл. VII Республиканской научно-практической конф. "Опто-, наноэлектроника и физика высоких энергий". Баку, 2013, с. 259-263.
- 4. Гаджиев З.И., Демухамедова С.Д., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Электронная и пространственная структура олигомеров полиэтиленгликоля ПЭГ4 и ПЭГ5 с атомом натрия. Journal of Qafqaz University-Physics, 2013, vol. 1, No 1, pp. 40-46.
- 5. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Пространственная структура олигомеров полиэтиленгликоля с атомом калия. I<sup>st</sup> International chemistry and chemical engineering conference CCE 2013, Abstracts & Proceedings. Baku, 2013, pp. 834-837.
- 6. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Квантовохимическое исследование структуры и колебательного спектра комплекса олигомера полиэтиленгликоля ПЭГ4 с ионной парой NaCl. Journal of Qafqaz University-Physics, 2014, 2, No 2, pp. 136-146.
- 7. Demukhamedova S.D., Hajiyev Z.I., Alieva I.N., Godjaev N.M. Theoretical calculation of spatial and electronic structures of the complex of oligomer of polyethylene glycol PEG4 with NaCl ion pair Fizika, 2014, **XX**, No 4, pp. 15-22.
- Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И. Электронная структура комплексов олигомеров полиэтиленгликоля ПЭГ4 и ПЭГ5 с атомом хлора. Сборник научных трудов по материалам VI Международной научно- практической конференции "Теоретические и прикладные аспекты современной науки" часть І. Белгород, 2015, с.18-21.
- 9. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И. Теоретический расчет пространственной и электронной структуры комплекса олигомера полиэтиленгликоля PEG 5 с ионной парой NaCl. Transactions ANAS, physical-techical & mathematical science series, 2016, XXXVI, No 5, pp. 5-15.
- I.N. Alieva, Demukhamedova S.D., Z.I. Hajiyev, N.M. Godjaev. Computer Modelling of Spatial and Electronic Structures of the Complex of PEG4 with KCl. AICT-2016, 10<sup>th</sup> International Conference on Application of Information and Communication Technologies. Baku, 2016, pp. 367-370.

Работа была доложена на International Conference "Modern Trends in Physics", 20-22 April 2017, Baku, Azerbaijan.

Article received 2017-07-07