

Требования к оформлению материалов Конкурса НИР, участвующих в первом туре:

- Объем материалов: 2 страницы формата А4 в текстовом редакторе WORD.
- Формат текста: Word for Windows. Поля: 2 см – со всех сторон; Шрифт: размер (кегель) – 14; тип – Times New Roman, интервал 1,5.
- Первой строкой без абзацного отступа полужирным стилем печатается название материалов, выравнивание по центру
- Второй строкой строчными буквами фамилия и инициалы имени отчества (в скобках указывается тип обучения, год, курс или класс), выравнивание справа.
- Третья строка: Научный руководитель: должность, научная степень, фамилия, инициалы имени отчества. Выравнивание справа
- Пустая строка.
- Текст материалов научного исследования, абзацный отступ – 1,25 см, выравнивание по ширине.
- Допустимо включение в текст рисунков, графиков, химических формул, схем. Подписи к рисункам, графикам, схемам, названия таблиц, их содержимое оформляются шрифтом Times New Roman, 12.
- Для включения в номинацию «Апробированное научное исследование» обязательно наличие ссылок в тексте и списка с апробацией работ.
- Список литературы по мере упоминания источника виде пронумерованного списка (12 шрифт). Отображение ссылок в виде сносок внизу страницы не допускается! *Оформление сносок:* в тексте указание на источник оформляется в квадратные скобки, название источника вносится в список литературы (пример: [1]).

Присылаемые тексты должны быть тщательно отредактированы. Если оформление материалов или их содержание не соответствует настоящим правилам, тезисы могут быть возвращены автору или отправлены на доработку.

Второй тур Конкурса НИР проходит в виде устных докладов. Доклады должны сопровождаться презентацией, выполненной в PowerPoint. Количество слайдов – не более 6, слайды пронумерованы, озаглавлены, кегль шрифта не менее 24, анимацию слайдов по возможности не использовать, время выступления – не более 5-6 мин. На последнем слайде отражена апробация работы и/или выводы, сделанные по результатам НИР.

Сравнение групповых характеристик распределения электронной плотности 2,2-диметилгептана и триметилпентилсульфида

Иванов И.И. (специалист, 5 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Петров П.П.

Сульфиды занимают важнейшее место в жизни человека. Их использование в производстве лекарственных препаратов и недостаточная изученность свойств распределения электронной плотности делают эти соединения значимыми объектами исследования методами квантовой химии.

Оптимизация геометрии 2,2-диметилгептана ((CH₃)₃-C-(CH₂)₄-CH₃) и триметилпентилсульфида ((CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃) проведена методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd) в программе GAUSSIAN 03 [1]. Вычисление зарядов (q) и объемов (V) «топологических» атомов – в программе AIMALL [2]. Групповые характеристики ($q(R)$, $V(R)$) суммированы из атомных q , V в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» [3] и сведены в таблицу.

Ранее автором были опубликованы данные для гомологического ряда триметилсульфидов в работе [4]. Показано влияние атома серы на заряды и объемы групп четырех соседних метиленов, отмечена неоднородность распределения электронной плотности ($\rho(r)$) на ближайших метильных фрагментах. Распределение $\rho(r)$ на функциональных группах гомологического ряда триметилалкилов представлено в материалах [5]. Однако сравнения групповых интегральных характеристик $\rho(r)$ между представителями гомологических рядов в рамках используемых методов до сих пор не проводилось.

Сравнение зарядов $q(R)$ и объемов $V(R)$ групп CH₃ в (CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃ показало смещение электронной плотности с CH₃, находящейся в плоскости алкильной цепи в сторону двух CH₃, расположенных перпендикулярно ей. Это не соответствует равномерному распределению $\rho(r)$ в (CH₃)₃-C-(CH₂)₄-CH₃ (табл.). В (CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃ группа CH₃ фрагмента (CH₂)₄-CH₃ проявляет меньшую электроотрицательность по сравнению с аналогичной группой в

$(\text{CH}_3)_3\text{C}-(\text{CH}_2)_4-\text{CH}_3$. На изменение $V(\text{CH}_3)$ и параметров ближайшей к нему CH_2 $V(\text{CH}_2)$ и $q(\text{CH}_2)$ в $(\text{CH}_3)_3\text{S}-(\text{CH}_2)_4-\text{CH}_3$ оказывает влияние стерическое воздействие фрагмента $(\text{CH}_3)_3\text{S}$.

Таблица: Заряды и объемы групп молекул $(\text{CH}_3)_3\text{R}-(\text{CH}_2)_4-\text{CH}_3$, где $\text{R} = \text{C}, \text{S}$.

	CH_3^{*1}	CH_3^{*2}	R	CH_2	CH_2	CH_2	CH_2	CH_3
R	Заряды групп $q(R)$ в а.е.							
S	0,049	-0,302	0,471	0,007	0,050	0,010	0,024	-0,008
C	-0,030	-0,030	0,105	-0,014	0,000	0,001	0,015	-0,015
R	Объемы групп $V(R)$ в Å^3							
S	30,99	35,35	18,13	21,95	22,69	23,45	23,59	33,04
C	32,07	32,07	6,15	22,86	22,80	23,47	23,66	33,14

CH_3^{*1} метильный фрагмент в плоскости алкильной цепи.

CH_3^{*2} метильные заместители с идентичным распределением электронной плотности у второго атома С в плоскости, перпендикулярной плоскости алкильной цепи.

Полученные результаты квантово-химического исследования показывают, что смещение электронной плотности в сторону CH_3 с S гораздо больше, чем с C, как и стерическое влияние серосодержащего триметильного фрагмента на пентильную цепь по сравнению с изопропильным. Данное наблюдение остается справедливым и при увеличении алкильного фрагмента с пяти до десяти углеродных атомов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Pople et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1, SMP). Gaussian Inc. Pittsburgh PA. 2007.
2. Todd A. Keith. AIMAll (Version 11.09.18, Professional). 2011. (<http://aim.tkgristmill.com>.)
3. Бейдер Р., Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001, 528 с.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

4. Иванов И.И., Петров П.П. Изменение групповых зарядов метиленов алкильной цепи в гомологическом ряду триметилсульфидов // Вестник ТвГУ: Сер. Химия. 2020. № 4. С76-89.
5. Иванов И.И., Петров П.П. Анализ электронной плотности разветвленных алканов // XX Каргинские чтения. Сборник материалов. 2019. С 61.