

Министерство образования Российской Федерации
Удмуртский государственный университет
Физико-технический институт УрО РАН
Институт прикладной механики УрО РАН
Институт истории языка и литературы УрО РАН
Естественно-гуманитарный научно-образовательный комплекс
Государственный комитет Удмуртской республики по науке,
высшему и среднему профессиональному образованию при Правительстве
Удмуртской Республики

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

5-й РОССИЙСКОЙ УНИВЕРСИТЕТСКО-АКАДЕМИЧЕСКОЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

ЧАСТЬ 6

Ижевск 2001

ББК 24.57; 26.2; 28.081; 28.58; 28.681; Т39

Ответственные редакторы:
В.А.Журавлев, С.С.Савинский

Т39. Тезисы докладов 5-й Российской университетско-академической научно - практической конференции. Ч.6. / Отв. ред. В.А. Журавлев, С.С. Савинский. Ижевск, 2001. 180с.

В сборнике опубликованы тезисы докладов 5-й Российской университетско-академической конференции (г. Ижевск, УдГУ, апрель 2001 г.). В конференции приняли участие преподаватели вузов России и научные сотрудники институтов РАН по гуманитарным и естественно-научным специальностям: археология и история, биология и экология, педагогика и психология, экономика и математика, химия и др. науки.

Предназначен для преподавателей и студентов гуманитарных и естественно-научных специальностей университетов, сотрудников академических и научно-исследовательских организаций.

ББК 24.57; 26.2; 28.081; 28.58; 28.681

© Удмуртский государственный университет, 2001

гаются как отдельные молекулы воды, так и небольшие ассоциаты из нескольких молекул воды. Тем самым, такая вода становится менее «подвижной» и приобретает «новую» структуру, отличную от той, когда в системе не присутствовала добавка ТРА (рис. 1а).

Таким образом, «новая» структура воды будет являться более эффективным переносчиком протона, чем «прежняя», в силу своей устойчивости (преобладанию туннельного механизма передачи протона), что было ранее показано в серии экспериментальных работ.

* * *

1. Широбоков И. Б., Корепанова Т. А., Плетнев М. А., Решетников С. М.: Защита металлов, 1994. Т. 30. № 6. С. 620 – 623.

Е.В.БЕСОГОНОВ, Ю.С.МИТРОХИН, И.Б.ШИРОБОКОВ

Удмуртский государственный университет, г.Ижевск

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ БАКМИНСТЕРФУЛЛЕРЕНА C_{60}

Методом Хюккеля была рассчитана электронная структура и энергетические характеристики молекулы бакминстерфуллере́на C_{60} . Расчеты производились с использованием набора параметров Стрейтвизера [1,2]. Учитывались только π -связи углерод – углерод и углерод - гетероатом. Вычислялись электронные плотности, заряды, порядки (коулсоновы) и длины связей, атом – атомные поляризуемости, энергии резонанса (делокализации электронов), потенциалы ионизации и сродство к электрону, электронные спектры поглощения и спиновые плотности. Для расчета использовался программный код, реализованный на языке FORTRAN в операционной среде Windows'95 (Бесогонов Е.В.). В качестве тестовых были выполнены расчеты бутадие́на, этиле́на, формальдеги́да и метиле́н-циклопро́пена. Результаты тестовых расчетов хорошо совпали с приведенными в литературе (см. табл. 1).

Таблица 1. Сравнение энергий МО метиленициклопропена

Энергии молекулярных орбиталей метиленициклопропена, рассчитанные программой.	Энергии молекулярных орбиталей метиленициклопропена, приведенные в литературе [2].
$\alpha+2,170086486626029*\beta$	$\alpha+2,170*\beta$
$\alpha+0,311107817465986*\beta$	$\alpha+0,311*\beta$
$\alpha-1,000000000000000*\beta$	$\alpha-1,000*\beta$
$\alpha-1,481194304092016*\beta$	$\alpha-1,481*\beta$

Несмотря на то, что метод МОХ основан на ряде серьезных упрощающих предположений, для целого ряда веществ значения получаемых с его помощью величин хорошо коррелируют с экспериментальными данными.

Это позволило перейти к основной части работы – расчету электронной структуры бакминстерфуллера и сравнению результатов расчетов методом Хюккеля с уже известными результатами расчетов другими методами и экспериментальными данными. Все вычисления производились с двойной точностью, максимальный порядок характеристической матрицы молекулы был равен 60 (для бакминстерфуллера).

В некоторых случаях можно говорить о предпочтительности применения метода МОХ для расчетов электронной структуры молекул π -сопряженных соединений. Метод Хюккеля является на сегодняшний день самым простым и экономичным методом для π -электронных систем. Его целесообразно применять там, где не столь важна точность предсказания свойств молекулы, но существенное значение играет время и правильность качественных выводов, например, в экспериментальной органической химии.

* * *

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учебное пособие для ун-тов. – М.: Высшая школа, 1979.
2. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. – М.: Мир, 1979.