

Форма и содержание контрольных заданий способствует повторению и приведению изученного материала в новую и удобную систему для восприятия и прочного усвоения учебного материала, с учетом индивидуальных способностей студентов. Для этого при размещении контрольных заданий и информационного материала, их необходимо представить в электронных учебниках по возрастающей, начиная с наиболее простых и доступных (понятных) большинству студентов тем. Разделение заданий на эти три принципиальные группы должно помочь студентам оценить свои способности и стимулировать их обратить свое внимание на ту группу, которая вызывает наибольшие сложности, и при необходимости обратиться за консультацией к преподавателю.

В процессе создания электронного учебного пособия по начертательной геометрии и инженерной графике у автора возникли трудности, связанные с необходимостью излагать большие объемы материала, объясняющего те или иные

разделы дисциплины. Ограничение же объема приведет к недопониманию тем. Если подробнее рассматривать некоторые разделы – увеличиваются трудозатраты студентов. И тем не менее электронные учебники необходимо создавать, так как они дают возможность получить различные виды информации: текстовую, иллюстративную, аудио, а так же при подключении к сети Интернет – и в режиме диалога.

Преподаватели кафедры приступили к созданию электронного пособия по начертательной геометрии и инженерной графике, в котором в качестве основы используется учебно-методическое пособие, несущее набор рекомендаций и заданий с объяснением тем, необходимых для выполнения домашних заданий. Все это дает возможность освоить материал и способствует успешной сдаче экзамена (зачета).

Материалы конференции
«Компьютерное моделирование в науке и технике»
ОАЭ (ДУБАЙ) 16-23 октября 2014 г.

Технические науки

**КОНФОРМАЦИОННАЯ
ПРЕДПОЧТИТЕЛЬНОСТЬ
МЕТИЛМЕРКАПТАНА
В НАНОТРУБКЕ**

Кузнецов В.В.

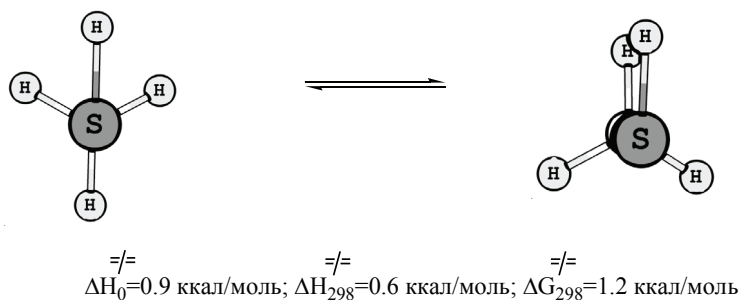
*Уфимский государственный авиационный
технический университет, г. Уфа*

*Уфимский государственный нефтяной
технический университет, г. Уфа,
e-mail: kuzmaggy@mail.ru*

Нанотрубки оказывают влияние на физико-химические характеристики инкапсулированных молекул и могут заметно менять свойства последних [1-3]. В частности, недавно было показано, что для этана в нанотрубке минимум потенциальной энергии внутреннего вращения отвечает не «шахматная», как для свободной молекулы, а заслоненная конформация [4].

В настоящей работе с помощью DFT-метода RBE/3z (пакет ПРИРОДА [5]) впервые исследовано конформационное поведение молекулы метилмеркаптана, помещенной внутрь одностенной модельной нанотрубки $C_{60}H_{12}$ длиной 8.5 Å и диаметром 4.8 Å.

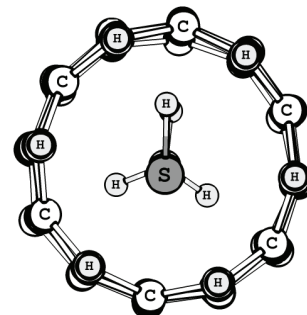
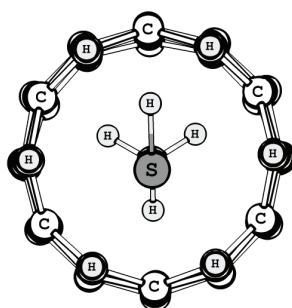
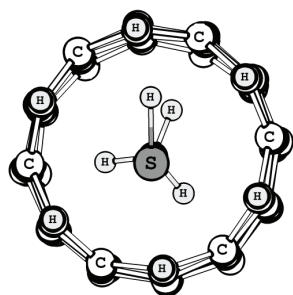
Сам метилмеркаптан, как известно, характеризуется заторможенным вращением; потенциальный барьер перехода между *gosh*-конформерами составляет 1.20-1.27 ккал/моль [6, 7]. Данные расчета изолированной молекулы тиола свидетельствуют об относительной выгодности *gosh*-формы, которая, по сравнению с заслоненной конформацией отличается более короткой C-S связью (1.836 и 1.845 Å соответственно). Ее порядок в обеих формах составляет 1.02. Вместе с тем использованное расчетное приближение занижает экспериментальную величину ΔH_{298}^\ddagger на 0.6-0.7 ккал/моль.



Для молекулы метилмеркаптана в нанотрубке выявлено три стационарные точки, которым отвечают конформеры (а), (б) и (в).

Форма (а), гессиан которой не содержит мнимых частот, а торсионный угол HSCН составляет 22.2°, является очевидным минимумом на поверхности потенциальной энергии, в то время как конформации (б) и (в) относятся к переходным состояниям: их гессианы содер-

жат по одной мнимой частоте. При этом длина C-S связи всех инкапсулированных форм по сравнению со свободной молекулой метилмеркаптана заметно уменьшается (1.692-1.691 Å), снижается ее порядок (0.83-0.78), а сама молекула тиола приобретает заметный положительный заряд (0.59-0.69), хотя в целом система нанотрубка – метилмеркаптан является электрически нейтральной.



≠/≠ а:

$$\Delta H_0 = 0.0 \text{ ккал/моль}$$

≠/≠

$$\Delta H_{298} = 0.0 \text{ ккал/моль}$$

≠/≠

$$\Delta G_{298} = 0.0 \text{ ккал/моль}$$

≠/≠ б:

$$\Delta H_0 = 1.9 \text{ ккал/моль}$$

≠/≠

$$\Delta H_{298} = 1.8 \text{ ккал/моль}$$

≠/≠

$$\Delta G_{298} = 2.1 \text{ ккал/моль}$$

≠/≠ в:

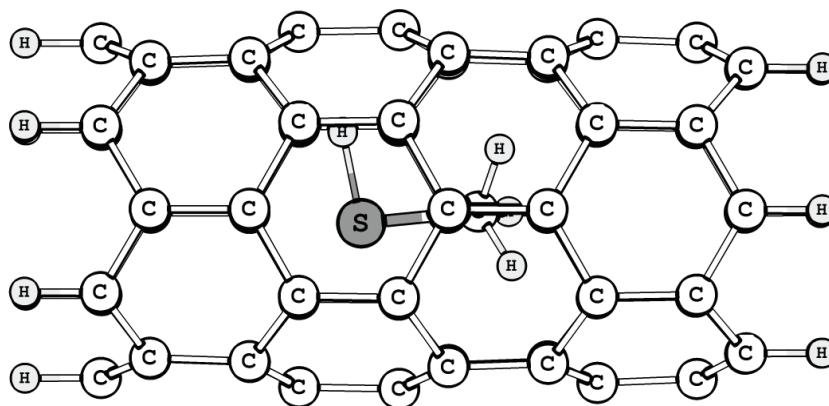
$$\Delta H_0 = 0.4 \text{ ккал/моль}$$

≠/≠

$$\Delta H_{298} = 0.1 \text{ ккал/моль}$$

≠/≠

$$\Delta G_{298} = 0.6 \text{ ккал/моль}$$



Полученные результаты свидетельствуют о формировании в рамках рассмотренной модели своеобразного силового поля внутри нанотрубки, которое «сжимает» инкапсулированную молекулу и тем самым кардинально меняет ее конформационные свойства.

Список литературы

1. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применение. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. 293 с.

2. Кузнецов В.В. // ЖОХ. 2012. Т. 82. Вып. 11. С. 1931.

3. Кузнецов В.В. // ЖОХ. 2013. Т. 83. Вып. 1. С. 148.

4. Кузнецов В.В. // ЖОрХ. 2013. Т. 49. Вып. 2. С. 319.

5. Лайков Д.Н., Устынюк Ю.А. // Известия РАН. Сер. хим. 2005. № 3. С. 804.

6. Дашевский В.Г. Конформации органических молекул. М.: Химия, 1974. С. 55.

7. Корольков Д.В. Теоретическая химия. Т. 1. Общие принципы и концепции. М.: Академкнига, 2007. С. 226.