МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Себряковский филиал

ИННОВАЦИОННОЕ РАЗВИТИЕ СТРОИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА РЕГИОНА: ЗАДАЧИ, СОСТОЯНИЕ, ПЕРСПЕКТИВЫ

МАТЕРИАЛЫ
III Всероссийской научно-практической конференции
Себряковского филиала
ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический
университет»

Михайловка – Волгоград, 15 октября 2020 г.

Волгоград 2020

УДК 338.45:69(470.45)
ББК 65.31(2Р-4Вог)-551
И66

Редакционная коллегия:
канд. соц. наук, доц. *С. Е. Карпушова* (отв. редактор);
академик Российской академии естествознания, академик международной академии «Контенант», д-р хим. наук, проф. *В. А. Бабкин*;
канд. экон. наук, проф. *В. А. Кабанов*;
д-р экон. наук, проф. *М. К. Беляев*;
д-р экон. наук, доц. *Т. А. Забазнова*

Рецензент:
член-корреспондент Российской инженерной академии наук,
д-р техн. наук, проф. *В. Т. Фомичёв*

И66 **Инновационное** развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы [Текст] : материалы III Всерос. науч.-практ. конф. Себряк. фил. ФГБОУ ВО «Волгогр. гос. техн. ун-т», Михайловка – Волгоград, 15 окт. 2020 г. / редкол.: С. Е. Карпушова (отв. ред.) [и др.] ; Федер. гос. бюдж. образоват. учреждения высш. образования «Волгогр. гос. техн. ун-т», Михайловка – Волгоград, 15 окт. 2020 г. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2020. – 337 с.

ISBN 978-5-9669-2073-9

Опубликованы результаты научных исследований сотрудников СФ ВолгГТУ за 2020 год. В материалах конференции представлены научные статьи и доклады участников.

Сборник предназначен для научных работников, преподавателей, соискателей, аспирантов и студентов вузов.

УДК 338.45:69(470.45)
ББК 65.31(2Р-4Вог)-551

ISBN 978-5-9669-2073-9

© Авторы статей, 2020
© ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет», Себряковский филиал, 2020

Участники конференции

- Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
- Институт архитектуры и строительства Волгоградского государственного технического университета
- Волгоградский социально-педагогический государственный университет
- Волгоградский государственный университет
- Лыткаринский завод оптического стекла (г. Лыткарино, Московская область)
- Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова (г. Москва)
- Институт биохимической физики РАН (г. Москва)
- Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск)
- Башкирский государственный университет (г. Уфа)
- Уфимский государственный нефтяной технический университет (г. Уфа)
- Горный институт Национального исследовательского технологического университета «МИСиС» (г. Москва)
- Российский государственный геологоразведочный университет им. Серго Орджоникидзе (г. Москва)
- Северо-Западный институт управления РАНХиГС (г. Санкт-Петербург)

СОДЕРЖАНИЕ

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

Забазнова Т.А., Бабкин В.А., Игнатов А.В., Селиванов А.Ю., Суркова О.А. Теории лауреатов Нобелевской премии 8

Крутилин А.А., Донскова Е.В., Полях Н.Ф. Урок ФГОС как условие реализации событийного подхода в системе общего образования 10

Пацюк Е.В., Карпушова С.Е., Землянская Е.В. Модель «затраты – выпуск»: история создания, области применения и преимущества метода..... 16

I. СТРОИТЕЛЬСТВО И ЭНЕРГЕТИКА

Pristanskov A.A., Liberovskaya A.N., Knyazev A.P., Ignatov A.V. Advantages of Tape Foundation in Low-Rise Constructions..... 22

Andreev D.S., Ignatov A.V., Hachatryan S.J., Voronina N.I., Grabskiy A.A., Stefanenko I.V., Akchurin T.K. Quantum-Chemical Study of the Protonation Mechanism of P-Dimethylaminostyrene by the *AB INITIO* Method..... 25

Андреев Д.С., Игнатов А.В., Лысенко Е.И. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и о-метоксистирола 33

Либеровская А.Н., Князев А.П., Пристансков А.А. Особенности современного геодезического оборудования и его применения при проведении кадастровых работ..... 39

Либеровская А.Н., Князев А.П., Пристансков А.А. Особенности геодезического обеспечения современных кадастровых работ..... 46

Князев А.П., Князева Г.Н., Пристансков А.А. Инженерно-геологические изыскания при проектировании фундамента под малоэтажное строительство..... 49

Князев А.П., Князева Г.Н. Системы дренажа участка и ливневой канализации бюджетного исполнения..... 52

Князев А.П., Князева Г.Н. Инженерно-геологические изыскания: «за» и «против» 54

Пахомова О.К., Крутилин А.А. Инновационные разработки в технологических процессах 56

Максимчук О. В., Карпушова С.Е., Гец В.А., Сордия В.Н., Крутилин А.А. Целесообразность внедрения комплексных, интегрированных систем управления строительными проектами 58

Сидорова Н.Ю., Крапчетова Т.В. Фильтрационные свойства хризотилцементных суспензий на основе мономинеральных цементов 62

II. УПРАВЛЕНИЕ УСТОЙЧИВЫМ РАЗВИТИЕМ

Секачева Т.В., Селиванов А.Ю. PEST-анализ как инструмент оценки влияния внешней среды на реализацию потенциала предприятия 66

Секачева Т.В., Селиванов А.Ю. Тенденции и перспективы поддержки малого бизнеса в Волгоградской области 68

Секачева Т.В., Селиванов А.Ю. Современная бизнес-модель предпринимательской деятельности 70

Секачева Т.В., Родичева Н. Актуальные вопросы экономического развития регионов 72

Секачева Т.В., Землянская Е.В. Акционирование и его роль в инвестиционной деятельности предприятия 75

Рыжова О.А. Региональный маркетинг..... 77

Секачева Т.В., Землянская Е.В., Забазнова А.Ф. Понятие и сущность инвестиционной деятельности предприятия 81
Секачева Т.В., Попова И.И., Забазнова А.Ф. Особенности цифровизации российской экономики 83
Токарева О.Б., Барышникова Н.Б. Стратегическое планирование развития малых городов 85
Liberovskaya A.N., Gurina O.A., Kosov D.A. Sebryakovsky quarry – one of the largest technogenic landforms of the Volgograd region 87
Ерохина Е.А., Щукина Н.В. Комплексная методика оценки уровня цифровизации организаций 90
Щукина Н.В., Ерохина Е.А. Оценка социально-экономической ситуации (на примере моногородов Волгоградской области – городской округ город Михайловка и городской округ город Фролово) 97
Решетникова М.В., Землянская Е.В. Ипотечное кредитование в государственных банках России 102
Решетникова М.В., Селиванов А.Ю. Роль государства в становлении и развитии ипотечного кредитования 111

III. НАУКА В ОБРАЗОВАНИИ

Давыдов А.Э., Косов Д.А., Николко К.С. Локальные геосистемы хозяйства «Дёминское» в пределах равнинно-водораздельных местностей 118
Давыдов А.Э., Косов Д.А., Фролова А.В. Локальные геосистемы хозяйства «Себряковское» в пределах равнинно-водораздельных и долинных местностей 122
Давыдов А.Э., Косов Д.А., Джумагазиев Е.Г. Антропогенное преобразование локальных геосистем хозяйства «Себряковское» 126
Давыдов А.Э., Косов Д.А., Кораблина К.А. Локальные геосистемы хозяйства «Дёминское» в пределах речных долин 129
Давыдов А.Э., Косов Д.А., Фролова А.В. Антропогенное преобразование локальных геосистем хозяйства «Дёминское» 132
Шишков Д.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования метиленциклопентана методом MNDO 135
Цыканов А.В. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 4-винилциклогексена методом MNDO 150
Цыканов А.В. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 3-фенилбутена-1 методом MNDO 164
Афонина Е.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования п-метоксиаллилбензола методом MNDO 179
Афонина Е.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования о-метоксиаллилбензола методом MNDO 193
Игнатова М.В. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 3-аллилциклопентена методом MNDO 206
Анисимова В.С. Квантово-химическое изучение механизма протонирования транс-3-метилпентадиена-1,3 методом MNDO 218

Анисимова В.С. Квантово-химическое изучение механизма протонирования цис-3-метилпентадиена-1,3 методом MNDO 229
Васильев Д.В. Квантово-химическое изучение механизма протонирования бутадиена-1,3 методом MNDO 241
Бабкин В.А., Андреев Д.С, Чепурнов С.В., Болдырев Р.О., Федунов Р.Г., Киселева М.Н., Арцис М.И., Заиков Г.Е. Квантово-химический расчет молекулы оксида графена в рамках структуры Лерфа – Клиновского методом MNDO 252
Бабкин В.А., Андреев Д.С, Чепурнов С.В., Болдырев Р.О., Лебедев Н.Г., Белоусов А.С., Гулюкин М.Н., Игнатов А.Н., Храмогин Д.А. Квантово-химический расчет молекулы оксид графена в рамках модели Накадзима-Мацуо методом MNDO 260
Бабкин В.А., Чепурнов С.В., Болдырев Р.О., Борисов Д.А., Янборисов В.М., Ценев Н.К. Квантово-химический расчет молекулы оксид графена в рамках модели Ресса методом MNDO 264
Andreev D.S., Voronina N.I., Ignatov A.V., Belousova V.S. Quantum-Chemical Study of the Protonation Mechanism of Allylcyclopentane by the *AB INITIO* Method 268
Andreev D.S., Voronina N.I., Ignatov A.V., Belousova V.S. Quantum-Chemical Study of the Protonation Mechanism of 4-Methylpentadiene-1,3 by the *AB INITIO* Method 275
Андреев Д.С., Игнатов А.В., Мощенко К.С. Квантово-химический расчет молекулы овалена методом PM3 в рамках нелинейной молекулярной модели графена 282
Андреев Д.С., Игнатов А.В., Мощенко К.С. Квантово-химический расчет молекулы дибензо[g,p]хризена методом PM3 в рамках нелинейной молекулярной модели графена 286
Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В. Квантово-химический расчет молекул нелинейных графенов из 10, 13 и 14 гексагонов методом MNDO 290
Андреев Д.С., Игнатов А.В., Степанов Н.С. Квантово-химический расчет молекулы хризена методом PM3 в рамках нелинейной молекулярной модели графена 300
Андреев Д.С., Игнатов А.В., Степанов Н.С. Квантово-химический расчет молекулы пирена методом PM3 в рамках нелинейной молекулярной модели графена 303
Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Клинов Д.А. Квантово-химический расчет молекулы графена из 12 гексагонов методом PM3 306
Андреев Д.С., Игнатов А.В., Захаров Д.С. Потенциальная поверхность взаимодействия аквакомплекса хлорида алюминия с 2,3,3-триметилбутеном-1 в гептане методом DFT 311
Карпушова С.Е., Секачева Т.В. Формирование цифровых компетенций в системе подготовки выпускника вуза 315
Лисина Л.М. Новейшие подходы к изучению особенностей синтаксического строя английского языка 319
Лисина Л.М. Способы развития письменной речи у студентов в процессе работы в форуме ЭОС 322
Лисина Л.М. Использование компьютерных обучающих программ для развития коммуникативной компетенции в процессе обучения английскому языку в техническом вузе 326
Лисина Л.М. Корпусный лексикографический анализ как способ раскрытия контекстного употребления лексики английского языка 329
Лисина Л.М. Видеоконференция как одна из новейших информационных технологий обучения английскому языку 333

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

ТЕОРИИ ЛАУРЕАТОВ НОБЕЛЕВСКОЙ ПРЕМИИ

Забазнова Т.А., Бабкин В.А.,
Игнатов А.В., Селиванов А.Ю., Суркова О.А.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Статья посвящена Нобелевской премии – международной премии, присуждаемой за выдающиеся научные исследования. Представлены факты ее возникновения. А также рассмотрены достижения лауреатов Нобелевской премии, и определена их роль в экономике.

Annotation

The article is dedicated to the Nobel Prize – an international prize awarded for outstanding scientific research. The facts of its occurrence are presented. The achievements of the Nobel Prize laureates are also considered, and their role in the economy is determined.

Ключевые слова*: Нобелевская премия; лауреаты; научные исследования; вклад; мировое признание; экономическое развитие.*

Key words*: Nobel Prize; laureates; Scientific research; contribution; world recognition; economic development.*

Самая престижная награда, о которой мечтают ученые со всего мира — Нобелевская премия.

Мир бы ничего не знал о Нобелевской премии, а наука не имела бы такого хорошего стимула для развития, если бы не знаменитый изобретатель Альфред Нобель, запатентовавший более 350 открытий.Он еще при жизни всерьез задумался о том, что же о нем будут помнить последующие поколения. В результате изобретатель написал свое завещание, в соответствии с которым его огромное состояние должно было пойти в специальный фонд. Задача этого фонда заключалась во вручении ежегодных денежных премий тем ученным, которые сделали наиболее весомый вклад в научное развитие. Это вручение и было названо Нобелевской премией, которая существует с 1901 года и успешно проводится до наших дней. Как видим, Нобель сделал замечательную инвестицию своих средств и не только вошел в историю, но и очень поспособствовал развитию науки [1].

На сегодняшний день Нобелевские премии имеют большой международный престиж и оказывают лауреатам значительную экономическую поддержку.

В настоящее время ежегодной премией, вручаемой за достижения в области экономических наук, считается Премия Шведского государственного банка по экономическим наукам памяти Альфреда Нобеля, учрежденная в 1969 году. Данная Нобелевская премия с момента ее создания имела возможность присуждаться 51 раз. Ее лауреатами становились 84 ученых – экономистов [2].

Первыми лауреатами Нобелевской премии в области экономики стали в 1969 году норвежец Рагнар Фриш, разработавший принципы построения «национальных счетов», и голландец Ян Тинберген, автор теории «оптимального строя».

Единственным же советским ученым – лауреатом Нобелевской премии в области экономики стал в 1975 году Леонид Канторович, один из создателей теории оптимального планирования и управления народным хозяйством, а также теории оптимального использования сырьевых ресурсов. Метод Канторовича, разработанный для решения проблем, связанных с производством фанеры, и известный сегодня как метод линейного программирования, нашел широкое экономическое применение во всем мире [3-5].

Многие ученые стремились внести свой индивидуальный вклад в экономику. Их достижения были направлены на исследования взаимосвязи экономических, социальных и институциональных явлений; разработку методов целенаправленного и эффективного управления финансовыми рисками; проведение анализа монетарной и фискальной политики при различных обменных курсах; изучение потребительского поведения; поиск способов снижения уровня бедности и улучшения качества жизни людей, находящихся за чертой бедности. Помимо сказанного, научные деятели изучаливлияние фактора времени на экономическую политику, занимались исследованиями движущих сил деловых циклов, анализом социальных проблем при помощи теории игр, моделировали поведения экономических субъектов с адаптивными ожиданиями, анализировали сегменты рынка с целью поиска свободных рыночных ниш и новых источников продаж и т.д. [6-7].

Возникновение новых экономических идей с каждым годом все больше овладевало массами, становилось движущим фактором развития и, несомненно, вело к изменению в социально-экономической и политической системах мира.

Соответственно за выдающиеся научные исследования, изобретения или крупный вклад в экономику или развитие общества ежегодно присуждалась и по сей день вручается Нобелевская премия по экономике, известная всему миру.

Международные премии, названные по имени их учредителя шведского инженера-химика Альфреда Бернхарда Нобеля знамениты не только своим богатым денежным фондом, но, и прежде всего, своей престижностью. Лауреат, которому присуждают Нобелевскую премию, в свою очередь, получает мировое признание, поддержку со стороны различных организаций, а их мнение считается очень весомым в обществе [2-3].

Таким образом, нобелевские лауреатысыграли значительную роль в экономике. Они внесли огромный вклад не только в развитие мировой экономической мысли, но в изучение рыночного хозяйства, в анализ фундаментальных проблем современной экономики, в разработку множества прикладных исследований в самых разнообразных областях экономической науки. Даже сегодня в решении проблем экономического развития, изучение научных работ, лауреатов премии памяти Альфреда Нобеля по экономике чрезвычайно важно [8-10].

Несмотря на все вышесказанное, к сожалению, уже довольно продолжительное время престиж науки, в том числе и экономики, в России находится в подорванном состоянии. Соответственно, для того, чтобы поднять науку на новый уровень, на сегодняшний день необходимо поменять систему ценностей. Звание ученого должно стать уважаемым, обществу следует по достоинству оценивать работу научных деятелей.

Если попытаться докопаться до сути, то ведь на самом же деле в России немало талантливых людей, которые смогут вывести экономику на новый уровень. При содействии государства они, несомненно, приведут страну к успешному развитию, только в них нужно верить, помнить, что от них зависит наше будущее. Особенно сейчас с

наступлением экономического кризиса общество как никогда нуждается в научных деятелях, которые сделают необходимый рывок в экономике. Просто нужно в настоящее время дать им шанс проявить свои способности, показать свои таланты всему миру.

И хотя сейчас в России положение науки и экономики выглядит не лучшим образом, однако все же стоит помнить, что у нас в стране есть невероятно глубокие научные и образовательные традиции, поэтому поправить сложившуюся ситуацию будет не так уж и сложно. Рано или поздно это всё-таки случится.

Список литературы

1. Лауреаты Нобелевской премии по экономике: Автобиографии, лекции, комментарии. Т. 1. 1969−1982. — СПб.: Наука, 2007г.
2. http://stockholm-info.ru/index.php/nobelprize/nobelhistory.html
3. https://swedeninfo.ru/nobelevskaya-premiya/
4. https://ru.wikipedia.org/wiki/Список_лауреатов_премии_по_экономике_памяти_Альфреда_Нобеля
5. Блауг М., Лукас Роберт-младший // 100 великих экономистов после Кейнса = Great Economists since Keynes: An introduction to the lives & works of one hundred great economists of the past. — СПб.: Экономикус, 2009г.
6. Васина Л. Л., Нобелевские лауреаты XX века. Экономика. Энциклопедический словарь. — М.: РОССПЭН, 2013г.
7. Лауреаты Нобелевской премии по экономике: автобиографии, лекции, комментарии. Т. 2. 1983−1996. — СПб.: Наука, 2009г.
8. Мировая экономическая мысль. Сквозь призму веков: В 5 тт. Т. 5. Всемирное признание. Лекции нобелевских лауреатов (в 2 кн.)./М.: Мысль, 2004−05г.
9. Никишин К., Петрова О. // Нобелевские лауреаты. Экономика. Избранное. – М., 2003г.
10. Нобелевские лауреаты по экономике. Взгляд из России / под ред. Ю. В. Яковца. — СПб.: Гуманистика, 2003г.

УРОК ФГОС КАК УСЛОВИЕ РЕАЛИЗАЦИИ СОБЫТИЙНОГО ПОДХОДА В СИСТЕМЕ ОБЩЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

***Крутилин А.А., **Донскова Е.В., **Полях Н.Ф.**

* Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
** Волгоградский государственный социально-педагогический университет

Аннотация

В статье представлена событийная модель современного урока, который остается одной из ведущих форм реализации федерального государственного образовательного стандарта в системе общего образования.

Федеральный государственный образовательный стандарт (ФГОС) во главу угла ставит развитие личности обучающегося. Данная задача требует от учителя нового подхода к организации процесса обучения. Учитель не преподносит готовое знание, а строит на уроках такую ситуацию, в ходе которой обучающиеся сами учатся находить предмет изучения, исследовать его, сравнивать с уже имеющимся опытом, формулировать собственное описание [1].

Создание подобной учебной ситуации строится с учетом возрастных и психологических особенностей учеников, степени сформированности их универсальных учебных действий (УУД), специфики учебного заведения. Так, если в старших классах можно оперировать уже накопленными знаниями, то в начальной школе учебные ситуации строятся на основе наблюдений, житейского опыта, эмоционального восприятия. Такая ситуация в обучении становится событием для обучающегося [2].

Событие – это мероприятие, целью которого является деятельность, направленная на формирование умения действовать. Событие может быть *стартовым*, *проектировочно-конструкторским* и *итоговым*. Перечисленные события соотносятся с основными типами уроков по ФГОС (см. рис.1).

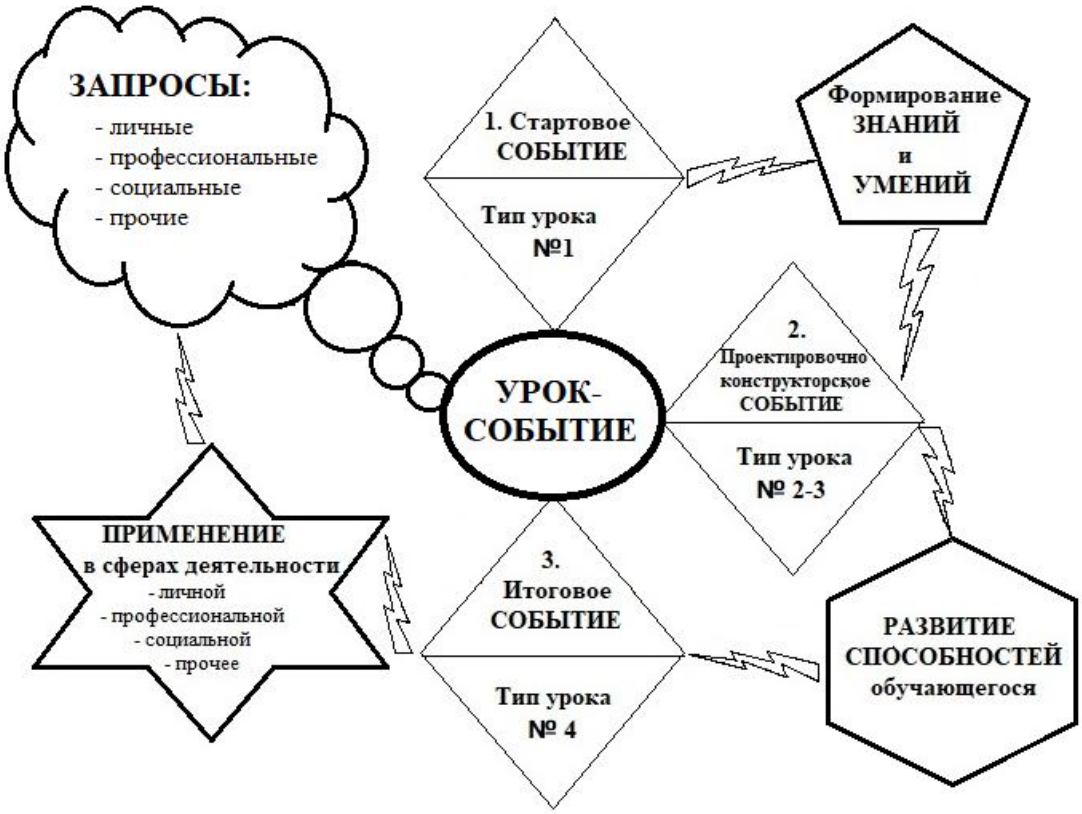

Рис 1. Модель урока-события по ФГОС

Стартовое событие проводится для создания условий по формированию опыта, необходимого в поиске самостоятельного решения познавательных и коммуникативных проблем. Ему соответствует ***урок открытия нового знания***(тип урока №1) – *урок*, на котором учитель создает условия для максимально-возможно самостоятельного освоения учащимися предметного знания через формирование новых способов познавательной деятельности.

Проектировочно-конструкторское событие – его целью является создание условий в формировании опыта, необходимого при определении проблемной области процессов обучения, воспитания и развития обучающегося в системе общего образования. Ему соответствуют два типа урока по ФГОС. ***Урок отработки умений и рефлексии*** (тип урока №2)– этоурок, на котором создается среда, позволяющая учащимся за короткий промежуток времени получить новый опыт, развить умения и отработать навыки. ***Урок общеметодологической направленности***(тип урока №3) **–** этоурок, на котором учащиеся осваивают методы организации и приобретают опыт осуществления деятельности, направленной на анализ, структуризацию, систематизацию и обобщение информации).

Итоговое событие проводится с целью создания условий в формировании опыта, необходимого при выявлении способности к самопознанию, проведении самоконтроля, самооценки, в т.ч. в квазипрофессиональной деятельности. Это событие соответствует ***уроку развивающего контроля***(тип урока №4) – это урок, на котором создаются условия для самоконтроля и самоанализа учеников при выполнении системы действий, направленных на пооперационный критериальный контроль правильности и полноты выполнения задания.

Таким образом, урок, остается основной единицей обучающего процесса. Однако с позиций событийного подхода, чтобы урок являлся одной из ведущих форм реализации ФГОС, требуется поиск и применение новых подходов, методов и средств [4].

Тип урока № 1.Урок открытия нового знания.

Его основная цель – научить учащихся новым способам нахождения знания, ввести новые понятия и термины.

Для того, чтобы эта цель была реально достигнута, а не сведена к традиционной передаче информации от учителя к учащимся, урок должен стать для каждого ученика СОБЫТИЕМ, которое удивляет, интригует, воодушевляет, провоцирует. Еще Анатоль Франс сказал: «Чтобы переваривать знания, надо поглощать их с аппетитом». Обострить познавательный аппетит учащихся помогает необычная форма урока: урок-исследование, урок проектов, экскурсия, квест, мозговой штурм, урок творчества, дискуссия в форме ток-шоу и т. Д.

Например, на уроке открытия нового знания в 8 классе по теме «Связь между скоростью движения молекул и температурой» (на основе материалов Л.А. Прояненковой [3]), в ходе которого учащиеся «…должны *усвоить,* что скорость беспорядочного движения молекул связана с температурой тела, - чем выше температура, тем быстрее движутся молекулы; из-за этого при более высокой температуре диффузия и испарение происходят быстрее, броуновское движение интенсивнее, а давление газа выше»*(содержательная цель урока)*, учитель создает условия для таких видов деятельности учащихся с использованием приема «*мозговой штурм*», как частично-поисковая, исследовательская. Каждый из учеников проходит такие этапы урока, как *этап* мотивации (самоопределения) к учебной деятельности на уровне «хочу», «надо», «могу»; *этап* актуализации **и фиксирования индивидуального затруднения в пробном действии; *этап* выявления места и причины затруднений; *этап* построения проекта выхода из создавшейся ситуации; *этап* первичного закрепления с проговариванием во внешней речи**; ***этап* самостоятельной работы с проверкой по эталону.** При этом реализуется

деятельностная цель урока («научиться получать указанный научный факт, объяснять конкретные ситуации» [3]). На оставшихся двух этапах урока учитель меняет основной прием ведения урока. Так, на ***этапе* включения в систему знаний и повторения, в ходе которого ученики при помощи учителя** фиксируют полученное знание, рассматривают, как новое знание укладывается в систему ранее изученного, при возможности доводят полученный навык до автоматизма в использовании (т.е. готовятся к дальнейшему погружению в тему), составляется *интерактивный кроссворд* с помощью он-лайн редактора «Фабрика кроссвордов» [5]). А на *этапе* рефлексии учебной деятельности на уроке (ученики соотносят цели, которые они ставили на уроке и результаты своей деятельности) составляется «*лестница успеха*».

Тип урока № 2.Урок отработки умений и рефлексии.

Особенностью урока этого типа является фиксирование и преодоление учащимися затруднений в собственных учебных действиях. Учащимся предоставляется возможность формировать собственный деятельностный опыт: разработать алгоритм деятельности, найти свои ошибки, понять их причину и исправить, обобщить и отработать различные способы действия, а также убедиться в их правильности.

В своей основе уроки отработки умений и рефлексии имеют принципы, приемы, методы и средства обучения, традиционно используемые учителями на уроках решения задач, лабораторных работах и практикумах.

Однако, следует признать, что классические задания и задачи мало интересны подавляющему большинству учащихся. Поэтому СОБЫТИЕМ для них становятся такие типы заданий, в которых отражаются ситуации реальной жизни, бытовые проблемы и личные интересы учащихся. Это могут быть контекстные задачи, проекты, кейсы, эссе, рецензии, сиквейны и пр.

Пример контекстной задачи по астрономии: В детской сказке К. Чуковского «Краденное солнце» нехороший крокодил солнце проглотил. Какое астрономическое явление послужило прообразом такого «крокодила»? Как часто происходят такие явления?

Тип урока № 3.* Урок *общеметодологической направленности.

Главная цель такого типа уроков – построение учащимися обобщенных моделей предметных знаний. Они должны помогать учащимся формировать целостное научное представление о явлениях окружающего мира; устанавливать внутрипредметные и межпредметные связи между понятиями, законами, идеями и теориями; вырабатывать нормы и освоить методы мыслительной деятельности, направленной на структуризацию, анализ, систематизацию и обобщение информации; встраивать новое знание в структуру уже приобретенного опыта

Наиболее событийными для учащихся формами уроков общеметодологической направленности являются: обзорные и межпредметные лекции, конференции, дидактические игры в форме викторин и интеллектуальных соревнований, обсуждение содержания совместно просмотренных фильмов и совместно прочитанных книг.

Трудности на уроках общеметодологической направленности для учащихся связаны в основном с запоминанием, обобщением и систематизацией больших объемов информации, для чего нужно использовать инфографические приемы работы с информацией. Такие приемы помогают учащемуся включатся в СОБЫТИЕ урока. Это

могут быть техники эффективного запоминания информации (облако слов, оригинальные шрифты, вики-словарь, кроссворд, интерактивные задания на запоминание и др.) и приемы структуризации и схематизации информации (интерактивный плакат, ментальная карта, фишбоун, лента времени и др.).

Пример облака слов «Радиоактивность»:

Рис 2. Облако слов «Радиоактивность»

Пример ребуса «Вес тела»:

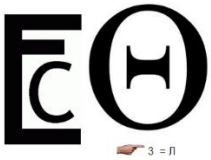

Рис 3. Ребус «Вес тела»

Пример фишбоун «Космические угрозы»:

Рис 4. Фишбоун «Космические угрозы»

Тип урока № 4.Урок развивающего контроля.

На таком уроке учащиеся учатся осуществлять контрольную функцию и рефлексию допущенных в работе ошибок, поскольку контроль является одним из важнейших компонентов не только образовательного процесса, но и всех видов деятельности человека.

Такой урок становится для ученика СОБЫТИЕМ, если учитель создает ситуации само- и взаимоконтроля, само- и взаимопроверки и само- и взаимооценки. Это возможно, поскольку у учащихся имеется опыт контрольно-коррекционной деятельности, приобретенный в начальной и основной школе.

Особенности такого урока требуют использовать на нем преимущественно письменные формы контроля или комбинировать с другими формами (традиционные контрольные работы, тесты, кейсы, практические контрольные задания и др.).

Так как ФГОС рекомендует проводить уроки развивающего контроля парно, то на первом занятии выполняется контрольная работа, а на втором – проводится ее анализ. Однако такая структура ставит учителей в затруднительное положение, связанное с крайне малым количеством учебных часов. Поэтому такой урок учителя ограничивают одним учебным часом, включающим в полном объеме первый этап (написание контрольной работы и ее критериальное оценивание) и частично второй (рефлексивный анализ).

Структура такого урока может быть следующей:

1. Мотивация и целеполагание контроля и самоконтроля (2-5минут)
2. Выполнение контрольной работы (25-30 минут)
3. Самоконтроль (взаимоконтроль) и самооценка (10 минут). Учащиеся сопоставляют свои (или чужие) работы по готовому образцу, фиксируют результаты, проводят оценку по заранее обоснованному критерию.
4. Рефлексия (2-3 минут). После фиксирования степени соответствия поставленной цели контрольной деятельности и ее результатов, необходимо предложить домашнее задание творческого характера на те знания и умения, которые контролировались на уроке.
5. Проверка контрольных работ и их оценок учителем (после урока) и выставление итоговой отметки.
6. Согласование оценок (проводится во внеурочное время в индивидуальной форме, если ученик не согласен с итоговой отметкой).

Таким образом, уроки в свете требований ФГОС предполагают основательную реконструкцию учебного процесса в связи с изменениями требований не только к содержанию учебного процесса, но и к результатам образования. Более того, ФГОС предлагает не только новую типологию уроков, но и новую систему реализации внеурочной деятельности учащихся и систему подготовки и переподготовки учителя, которые осуществляются на основе той же модели урока-события.

Список источников

1. Гуманитарные ориентиры современного образования: монография / В.В. Сериков, Н.С. Пурышева, Г.П. Стефанова и др.; под общ ред. Е.В. Данильчук. Волгоград: Изд-во ВГСПУ «Перемена», 2015. 328 с.

2. Донскова Е.В., Полях Н.Ф. Научно-исследовательская работа магистрантов, обучающихся по программе «Физическое образование», в контексте требований образовательного и профессионального стандартов // Известия ВГПУ. № 3. 2018. С.23–28.
3. Прояненкова Л.А. Я иду на урок физики / Л.А. Прояненкова. М.:ИД Первое сентября. С.104–109.
4. Строкова Т.А., Волосникова Л.М. Качество подготовки будущих педагогов к исследовательской деятельности в оценке преподавателей вуза // Образование и наука. 2017. Т.19. № 3. С 9–27.
5. Редактор создания кроссвордов «Фабрика кроссвордов». – URL: https://www.puzzlecup.com/crossword-ru/ (дата обращения: 15.03.2020).

МОДЕЛЬ «ЗАТРАТЫ – ВЫПУСК»: ИСТОРИЯ СОЗДАНИЯ, ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ И ПРЕИМУЩЕСТВА МЕТОДА

Пацюк Е.В., Карпушова С.Е., Землянская Е.В.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В 1973 году американский экономист Василий Леонтьев был удостоен Премии памяти Нобеля по экономике за «развитие метода „затраты – выпуск“ и за его применение к важным экономическим проблемам». Модель «затраты – выпуск» широко применяется при анализе экономики зарубежных стран, выступает обязательным элементом статистической базы. В России модель «затраты – выпуск» не пользуется должным вниманием. В условиях развития рыночных отношений следует обратиться к неоправданно забытому методу анализа, планирования и прогнозирования экономических систем.

Статья содержит краткий обзор истории модели межотраслевого баланса и тенденций её развития. В работе приводятся преимущества метода «затраты – выпуск» как инструмента планирования и прогнозирования развития национальной экономики и ее отраслей. Также в статье описаны основные принципы формирования таблиц межотраслевого баланса.

Annotation

In 1973, the American economist Vasily Leontiev was awarded the Nobel Memorial Prize in Economics for “developing the input-output method and for its application to important economic problems.” The “input-output” model is widely used in the analysis of the economies of foreign countries; it is a mandatory element of the statistical base. In Russia, the input-output model is not receiving the attention it deserves. In the context of the development of market relations, one should turn to the unjustifiably forgotten method of analysis, planning and forecasting of economic systems.

The article contains a brief overview of the history of the input-output balance model and its development trends. The paper presents the advantages of the “input-output” method as a tool for planning and forecasting the development of the national economy and its sectors. The article also describes the basic principles of forming input-output balance tables.

Ключевые слова: *«затраты – выпуск», межотраслевой баланс, Леонтьев, лауреаты премии Альфреда Нобеля, балансовая модель*

Keywords: *“Input-output”, input-output balance, Leontiev, Alfred Nobel Prize winners, balance model*

Нобелевская премия уже больше века по праву считается самой престижной наградой в мире. Она является официальным признанием того, или иного достижения. Премия учреждена в соответствии с завещанием Альфреда Нобеля от 27 ноября 1895 года. В завещании А. Нобеля предусматривалось выделение средств на награды представителям пяти направлений: физики; химии; физиологии или медицины; литературы; содействию установлению мира во всём мире [10]. С 1969 года премия стала присуждаться деятелям в области экономики.

Нобелевская премия по экономике (Премия Шведского государственного банка по экономическим наукам памяти Альфреда Нобеля) – это ежегодная премия, вручаемая за достижения в области экономических наук. С 1969 по 2019 год премия присуждалась 51 раз [10]. Премии по экономике были удостоены 84 ученых.

Среди лауреатов премии по экономике памяти А. Нобеля единственным отечественным лауреатом остаётся Леонид Канторович, награждённый совместно с Тьяллингом Купмансом «за вклад в теорию оптимального распределения ресурсов». Из лауреатов премии по экономике 3 экономиста российского происхождения, в том числе Леонтьев Василий Васильевич, создавший метод «затраты – выпуск» (модель межотраслевого баланса).

Леонтьев Василий Васильевич (1905-1999 гг.) – американский экономист, лауреат премии по экономике памяти А. Нобеля за 1973 год «за развитие метода „затраты – выпуск“ и за его применение к важным экономическим проблемам» [10]. Вовремя работы консультантом по экономическому планированию для военно-воздушных сил США построил матрицу «затраты – выпуск» для экономики Германии. Матрица послужила основой для выбора целей ВВС. Леонтьев разработал аналогичную матрицу для СССР, которая использовалась США для принятия решения об объёмах и структуре ленд-лиза [11]. С 1959 года межотраслевые балансы с подробной продуктовой детализацией регулярно разрабатывались в СССР.

В настоящее время модель «затраты – выпуск» широко используется за рубежом при анализе экономики государства. Её применение является обязательным элементом статистической базы Евразийского экономического союза и Евросоюза [3]. В России в постсоветское время разработка межотраслевого баланса была прекращена, за исключением единичных случаев. В 2003 году Росстатом были опубликованы агрегированные таблицы «затраты – выпуск» по 24 видам продуктов, предоставившие важнейшую информацию о пропорциях производства и потребления. После 2006 года

перестали разрабатываться даже обобщенные таблицы «затраты – выпуск». В 2009 году Правительство Российской Федерации выпустило распоряжение № 201-р, в котором поручается:

- Федеральной службе государственной статистики разработать базовые таблицы «затраты – выпуск» за 2011 год, а также осуществлять разработку базовых таблиц «затраты – выпуск» на регулярной основе 1 раз в 5 лет;
- Минэкономразвития России утвердить состав информации, необходимой для построения базовых таблиц «затраты – выпуск»;
- ФНС России, Казначейству России и ФТС России представить в Росстат информацию, необходимую для построения базовых таблиц «затраты – выпуск» [1].

В 2017 году Росстат презентовал базовый межотраслевой баланс за 2011 год и таблицы ресурсов и использования за 2012-2014 годы, что стало знаковым событием для экономистов и специалистов по статистике. С тех пор Росстат ежегодно выпускает скорректированный баланс, а раз в пять лет будет составлять базовый баланс.

Важность модели Леонтьева для современной экономики России заключается в том, что она характеризуется сложной отраслевой структурой и высоким уровнем специализации. Общероссийский классификатор видов экономической деятельности ОК 029-2014 содержит около 2680 группировок [2]. Отрасли хозяйства активно взаимодействуют друг с другом, образуя межотраслевые комплексы. Для анализа и учёта этих межотраслевых связей, а также для оценки структурных изменений в экономике стоит использовать метод межотраслевого баланса.

Модель «затраты – выпуск» (модель межотраслевого баланса) – это экономико-математическая балансовая модель, характеризующая экономические межотраслевые производственные взаимосвязи между секторами системы хозяйствования страны [11]. Модель «затраты – выпуск» может использоваться как для описания экономики государства в целом, так и применяться в качестве производственного плана на отдельном предприятии.

Основу модели «затраты – выпуск» составляет система стоимостных и натуральных потоков (издержек и результатов производства). Особенность модели состоит в том, что число материальных и стоимостных потоков не ограничено. Размеры таблиц зависят от объема информации и вычислительных средств. В начале в межотраслевом балансе присутствовало 44 отрасли [7]. В 1947 году в нём были задействованы 400 отраслей. Зачастую используется баланс из 600-700 отраслей.

Общий вид таблиц «затраты – выпуск» отображён в таблице 1.

Таблица 1 – Общий вид таблиц «затраты – выпуск»

Продукты / отрасли	**Промежуточный спрос**	**Конечный спрос**	**Выпуск**
Промежуточное потребление	I	II	
Добавленная стоимость	III		
Выпуск			

В таблицах выделяются три блока – квадранта. В I квадранте отражается промежуточный (производственный) спрос, во II квадранте – конечный спрос на ресурсы, в III квадранте – добавленная стоимость по отраслям производства. Сумма промежуточного потребления и добавленной стоимости по столбцам I и III квадрантов представляет собой затраты на производство. Сумма промежуточного и конечного спроса по строке I и II квадрантов характеризует использование ресурсов.

Общий вид симметричных таблиц «затраты – выпуск» представлен в таблице 2. В подобных таблицах предполагается, что отрасль – это совокупность однородных продуктов.

Таблица 2 – Общий вид симметричных таблиц «затраты – выпуск»

в / из	**Промышленность**	**Сельское хозяйство**	**Домашнее хозяйство**	**Общий выпуск**
Промышленность	25	20	55	100 т стали
Сельское хозяйство	10	30	80	120 центнеров зерна
Домашнее хозяйство	80	180	40	300 человеко-лет труда

Ячейки, составляющие основное содержание таблицы, характеризуют межсекторные потоки [13]. Числа в каждом столбце таблицы описывают структуру затрат соответствующей отрасли. Чтобы произвести 100 т стали, промышленность потребляет 25 т своего собственного продукта, 10 центнеров зерна и 80 человеко-лет труда. Чтобы произвести 120 центнеров зерна, сельское хозяйство должно получить и использовать 20 т продукции промышленности, 30 центнеров зерна и 180 человеко-лет. Аналогично расписывается и домашнее хозяйство. Из 100 т стали, производимой промышленностью, 25 т используются внутри неё, 20 поставляется сельскому хозяйству, 55 т потребляется в домашнем хозяйстве. Подобным же образом описываются оставшиеся строки распределения продукции.

Более детализированные таблицы межотраслевого баланса, состоящие из 50, 200 и даже 1000 различных секторов, позволяют получить подробную характеристику каждого отдельного числа. В таких таблицах отрасль представляется не одним, а многими различными секторами. В представленном выше примере использованы физические (натуральные) величины, на практике зачастую таблицы составляется в стоимостных показателях.

Межотраслевой баланс применяется для статистических целей, проверки сбалансированности системы статистических данных и определения товарной структуры потоков. Использование модели «затраты – выпуск» (межотраслевого баланса) позволяет проанализировать состояние межотраслевых связей, спрогнозировать и спланировать оптимальные соотношения производства и потребления.

Список литературы

Нормативно-правовые материалы

1. Распоряжение Правительства РФ от 14 февраля 2009 г. № 201-р «Об информации о межотраслевых связях и структурных пропорциях экономики Российской Федерации» / [Электронный ресурс]: КонсультантПлюс
2. ОК 029-2014 (КДЕС Ред. 2). Общероссийский классификатор видов экономической деятельности (ред. От 12.02.2020) [Электронный ресурс]: утв. Приказом Росстандарта от 31.01.2014 г. № 14-ст // КонсультантПлюс

Специальная литература

3. Евразийский экономический союз в цифрах: краткий статистический сборник; Евразийская экономическая комиссия. – Москва: 2020. – 213 с.
4. История экономических учений. Учебное пособие, в 2-х частях, часть I / Т.Н. Соснина, Н.Ф. Банникова.- Самара: Изд-во Самар. Гос. Аэрокосм. Ун-та, 2009
5. Куликов М. М. Межотраслевой баланс и модель «затраты – выпуск»: история создания и особенности использования / Вестник ЮРГТУ (НПИ) № 4. Изд.: Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова (Новочеркасск), 2013
6. Лавров Е.И., Капогузов Е.А. Л 136 Экономический рост: теории и проблемы: учебное пособие. – Омск: Изд. ОмГУ, 2006. – 214 с.
7. Леонтьев В.В. Экономические эссе. М.: Республика, 1992
8. Леонтьев В.В. Межотраслевая экономика. М.: Экономика, 1997
9. Экономическая теория: Учеб. Для студ. Высш. Учеб. Э40 заведений / Под ред. В.Д. Камаева. — 10-е изд., перераб. И доп. — М.: Гуманит. Изд. Центр ВЛАДОС, 2003. — 592 с.

Интернет-ресурсы

10. Википедия – свободная энциклопедия / Нобелевская премия / Список лауреатов премии по экономике памяти Альфреда Нобеля / Василий Васильевич Леонтьев. – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org , свободный. – Дата обращения: 15.09.2020.
11. Википедия – свободная энциклопедия / Межотраслевой баланс. – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org , свободный. – Дата обращения: 15.09.2020.
12. Росстат – официальный сайт Федеральной службы государственной статистики / Общие методологические принципы построения системы таблиц «затраты – выпуск» // Межотраслевой баланс производства и распределения продукции и услуг. – Режим доступа: https://www.gks.ru/ , свободный. – Дата обращения: 16.09.2020.
13. Studfiles – файловый архив / Межотраслевой анализ. – Режим доступа: https://studfile.net , свободный. – Дата обращения: 17.09.2020.

I. Строительство и энергетика

ADVANTAGES OF TAPE FOUNDATION IN LOW-RISE CONSTRUCTIONS

*** Pristanskov A.A., ** Liberovskaya A.N., ** Knyazev A.P., **Ignatov A.V.**

* MKOU School №5

** Sebryakovsky Branch of Volgograd State Technical University

Annotation

The article examines the general provisions of the modern practice of construction of strip foundations and foundation structures, their advantages and disadvantages in low-rise construction.

***Key words**: foundation, bearing capacity, foundation.*

The foundation is the most important element of any building. The reliability and durability of the structure depends on the bearing capacity of this component. If mistakes are made during the construction of the foundation, then it will be almost impossible to fix them. In addition, this will result in unnecessary costs. To choose the right foundation, first let's get acquainted with the existing ones.

Foundations are divided into several aspects.

1. By the depth of placement.

Foundations are shallow or deeply buried. Shallow foundations are erected when it comes to light buildings and soils that are not subject to frost heaving. They require a warm blind area, which gives stability and excludes soil heaving. Deeply buried foundations are erected below the level of soil freezing. This is done to exclude a negative effect on the base as a result of frost heaving.

2. By the method of construction.

The monolithic foundation is made of reinforced concrete. Such bases are considered the most durable and reliable in construction. However, it is important to use quality materials and follow the necessary technologies. The precast foundation is known for using prefabricated reinforced concrete elements. These are beams, slabs, blocks and more. In the combined foundations, factory elements and concrete are used.

3. By design features.

Tape foundation. Such foundations are well suited for structures with heavy walls or ceilings. It will be relevant when building a basement, underground or garage.

Such a foundation is completely/deeply buried type is laid for the entire length of soil freezing. It turns out that the base is quite simple to manufacture, which at the same time has high reliability. The disadvantages include the high consumption of materials.

A shallow tape foundation requires a continuous reinforced belt. However, when building it, you do not need a lot of materials. The disadvantages of this foundation include low rigidity, which sometimes leads to cracks. In addition, high demands are made on the quality of the reinforcement. In addition, drainage and a sand cushion are required.

Columnar foundation. Such bases are good for houses with light walls. These are buildings of wood, chopped, frame or panel type. In this case, special pillars are installed at corners, as well as in places of increased loads. They can be made of wood, brick or concrete. The pillars are buried in the ground to a depth of 1.5 m, so that they are not destroyed during frost heaving. The columnar foundation requires a distributed load. Pillars must be installed at all corners of the building, as well as at intersections of walls, under the supports of heavy girders. Special strapping beams are laid on top of the posts. If the distance between the posts is more than 2.5 m, the beam should be more powerful. A foundation of this type will cost 1.5-2 times cheaper than a tape one [1].

Pile foundation. Screw piles are steel pipes with a screw at the end. They are screwed into the ground, after which a structure is installed on them. The foundation wins with its special speed of construction. In addition, the pile foundation does not require preparatory earthworks. However, this type of foundation has its drawbacks. Over time, the piles fail, thus, such structures are not durable.

Slab foundation. Such a base is erected from monolithic reinforced concrete. At the same time, the foundation receives the required spatial rigidity. The need for such a foundation in low-rise construction arises when one has to deal with uneven and highly compressible soils.

In this case, a single slab is installed under the house, which can be flat or ribbed, insulated or not. The foundation has become widespread due to its versatility. The slab base is often used in the implementation of standard projects of individual houses. The advantage of such a foundation is that it can be used on almost all types of soil. The exceptions are quicksands, flowing clays and soils with a high content of peat.

The advantages of the tape foundation are:

- High bearing capacity.
- Durability, reliability.
- Resistance to external loads.
- Simplicity, economy of construction.
- Several design options are available to best suit the conditions.
- Possibility of arranging a basement or cellar.

The disadvantages include:

- The need for a thorough examination of the hydrogeological conditions of the site, the composition of the soil layers, and other features.
- Quite a large amount of earthworks, for which construction equipment is often required.
- The mass of the belt is high enough and concentrated on one line, which contributes to soil subsidence in case of unfair construction.

According to the depth of the laying, there are types:

Shallow. Almost all of the tape is located on the day surface. It is built in conditions when immersion in the ground is impractical or impossible – on dry dense soils, rock slabs, etc. In practice, it is rare, since the appropriate conditions in the northern latitudes are almost impossible.

Shallow. It is used on dry non-porous (or slightly porous) soils. It is used for the construction of relatively small buildings, low-rise residential private houses.

Recessed. A full-fledged tape type intended for large and massive buildings. It has the greatest bearing capacity and strength, but it requires a lot of labor and consumption of building materials.

By tape design:

Monolithic. It is a continuous reinforced concrete tape. It has maximum strength and bearing capacity, has high resistance to heaving loads. The disadvantage is the need to cure concrete to gain technological strength, which takes a month.

Made. The tape is built from special foundation blocks (FBS), brick, stone, etc. The option is suitable only for non-porous soils with no deforming effects. The most durable is a tape made of FBS; with a decrease in the size of the fragments, the resistance to deforming effects of the soil decreases. Beneficial in appropriate conditions due to the high construction speed.

Combined. An example of such a foundation is the pile-tape type. A combination of two types of support is formed, when the piles provide contact with dense and stable layers of soil, and the tape receives and redistributes the load from the walls of the building. It is used in difficult conditions, in heaving, loose or boggy areas. The construction requires the use of special equipment.

Tape bases are designed to function in various conditions, but they perform best on dense, dry and stable soils with low ground water level.

With an increase in problematic positions in terms of the hydrogeological conditions of the site, the bearing capacity decreases and there is a need for additional measures – an increase in the backfill layer, equipment of a solid sole (casing), drainage. On heaving soils, the strip foundation is used to a limited extent, only if there are design capabilities.

The base tolerates low-temperature conditions well, but requires certain measures to be taken to cut off groundwater or condensate (waterproofing, insulation) [2].

In conclusion, we would like to note that the best basis for the foundation is a homogeneous mineral soil, without inclusions of peat or large boulders and with deep groundwater. Therefore, various inhomogeneous inclusions, such as stump remains, organic materials, boulders and other various formations, should be removed from the bases. With such soils and with a correctly distributed load, the foundations receive a uniform settlement, and in order to drain surface water, it is necessary to organize an appropriate slope of the soil. For this, a vertical layout is performed, and a blind area is arranged around the house.

References

1. http://davaiknam.ru/text/fundament-osnovanie-zdaniya-i-chem-ono-prochnee-tem-dolgovechn
2. https://expert-dacha.pro/stroitelstvo/fundament/lentochnyj-f/lento-ili-monolitnij.html

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF THE PROTONATION MECHANISM OF P-DIMETHYLAMINOSTYRENE BY THE AB INITIO METHOD

[1]Andreev D.S., [1]Ignatov A.V., [1]Hachatryan S.J., [1]Voronina N.I., [2,3]Grabskiy A.A.

[4]Stefanenko I.V., [4]Akchurin T.K.

[1]Sebryakovsky Branch of the Volgograd State Technical University

[2]Russian State Geological Prospecting University named after Sergo Ordzhonikidze, Moscow

[3]Mining Institute of National University of Science and Technology "MISIS", Moscow

[4]Institute of Architecture and Building of the Volgograd State Technical University, Volgograd

Summary

For the first time we studied the protonation mechanism of p-dimethylaminostyrene by the quantum-chemical method MNDO. It is shown that this mechanism is the usual reaction of attaching a proton to the double bond of a monomer. The reaction is exothermic and is of the barrier-free type. The energy gain as a result of the reaction of attacking the α-carbon atom is 570 kJ/mol.

***Key words**: protonation mechanism, MNDO method, p-dimethylaminostyrene.*

There have been relatively few studies on the cationic polymerization of the p-dimethylaminostyrene olefin. Theoretical studies on the mechanism of elementary acts (initiation — growth of the material chain — break) of p-dimethylaminostyrene are practically absent to date. The energy of these reactions and the nature of the active centers are unknown, and the role of the solvent on the properties of the polymer under study has not been established. In this regard, it is of undoubted interest to study these mechanisms.

According to modern ideas about the initiation mechanism of cationic polymerization of p-dimethylaminostyrene, the true catalyst of this reaction is the aquacomplex of Lewis acids of the type $AlCl_3 \cdot H_2O$, $AlCl_2C_2H_5 \cdot H_2O$, $BF_3 \cdot H_2O$, etc. (i.e., the impurities of water in the system always exist) from which, due to complex coordinated interactions, the initiating particle $H^{+\delta}$ is being formed and, in turn, in accordance with the Markovnikov rule, attacks the most hydrogenated carbon atom C_α [1-3]. Study of the protonation mechanism of p-dimethylaminostyrene is a first step in studying the mechanism of elementary act of initiating cationic polymerization of the monomer. In connection with this, the purpose of this work is a quantum chemical study of the protonation mechanism of p-dimethylaminostyrene using the classical method MNDO.

Methodical Part

To study the protonation mechanism we chose the quantum chemical method MNDO with geometry optimization of all parameters by the gradient method built-in Firefly [4], which is partly based on the GAMESS (US) source code [5], in view of the fact that this method is specifically parameterized for the best reproduction of the energy characteristics of molecular systems, which is an important factor in the analysis of the mechanisms of cation processes. The calculations were performed in the approximation of an isolated molecule in the gas phase. The system $H^+ \ldots C_{10}H_{13}N$ (p-dimethylaminostyrene) consists of 25 atoms, $M = 2S + 1 = 1$ (where S is the total spin of all electrons in the system and is equal zero (all electrons are paired), M is multiplicity), the total charge of the molecular system is $\sum q_c = 1$.

To research the protonation mechanism of p-dimethylaminostyrene, we performed the calculation of potential energy of proton interaction with p-dimethylaminostyrene using the same techniques as in [6-15]. The distances from the proton H_1 to C_2 (R_{H1C2}) and from H_1 to C_3 (R_{H1C3}) were chosen as the reaction coordinates. The initial values of R_{H1C2} and R_{H1C3} were assumed to be 0.31 nm. Further, changing the values of R_{H1C2} with a step of 0.01 nm, the quantum-chemical calculation of the molecular system was performed by changing the values of R_{H1C3} with the same step of 0.01 nm. According to the obtained energy values along the reaction coordinates, an equipotential surface of proton interactions with p-dimethylaminostyrene was constructed. The primary model of the proton attack of the p-dimethylaminostyrene molecule is shown in Fig. 1. The renowned *MacMolPlt* program [16] was used to picture the molecular models.

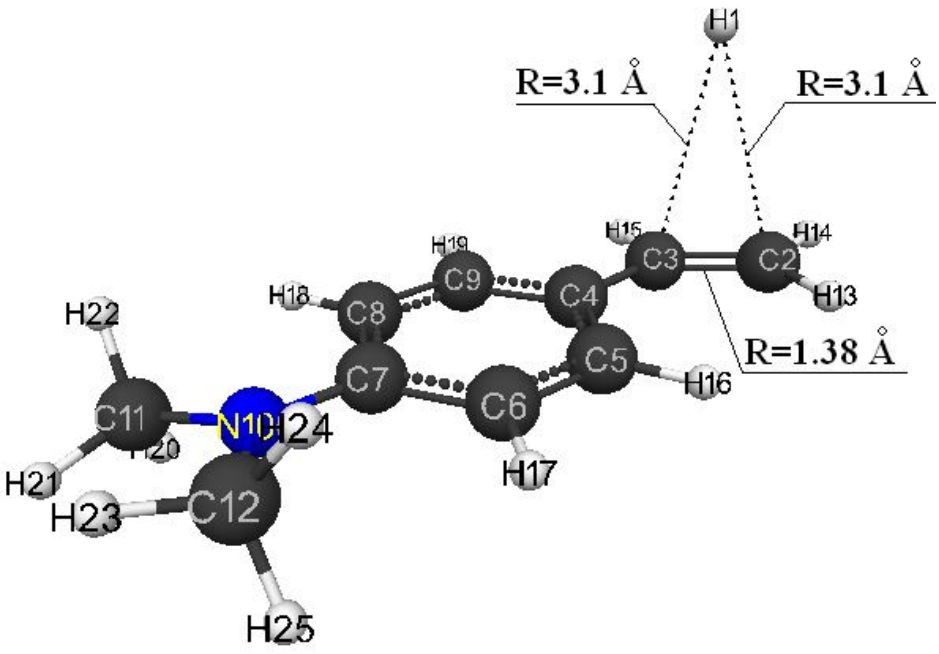

Fig. 1. Primary model of the proton attack of the p-dimethylaminostyrene molecule

Calculation Results

The final structure of the carbocation formed after the H_1 proton attack on the α-carbon atom of p-dimethylaminostyrene (C_2) and the rupture of the double bond of p-dimethylaminostyrene are shown in Fig. 2. Change in the total energy during the protonation of p-dimethylaminostyrene is shown in Fig. 4, from which it can be seen that on the entire path of the proton (the initiating particle) $H^{+\delta}$ motion along the reaction coordinates R_{H1C2} and R_{H1C3} the negative value of the total energy of the system H^+ … $C_{10}H_{13}N$ (E_0) steadily increases up to the complete formation of the carbocation and has a barrier-free type as in attacking the α- and β-carbon atoms of p-dimethylaminostyrene. The energy gain as a result of the reaction when attacking the α-carbon atom is 570 kJ/mol, and when attacking the β-carbon atom it is equal to 510 kJ/mol. Fig. 5. Shows the change in the total energy along the pathway of the proton H1 addition reaction to the α-carbon atom of p-dimethylaminostyrene. On the Fig. 6. The change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the α-carbon atom of p-dimethylaminostyrene is displayed. Fig. 7. Shows the total energy change along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of p-dimethylaminostyrene. Fig. 8. Displays the change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of p-dimethylaminostyrene.

Moreover, using the formula $pKa=42{,}11-147{,}18q_{max}^{H+}$ [17] (q_{max}^{H+} = +0,098 – is the maximum charge on the hydrogen atom, pKa is the universal indicator of acidity), we find the acid strength of the formed carbocations equal to pKa = 28.

In addition, an analysis of the results of quantum chemical calculations and a change in the bond lengths and valence angles along the reaction coordinate in both cases when the proton attacks the α- and β-carbon atoms of p-dimethylaminostyrene suggests that the protonation mechanism for the cationic polymerization of p-dimethylaminostyrene proceeds according to the classical scheme of attaching a proton to the double bond of the monomer.

Thus, we first studied the protonation mechanism of p-dimethylaminostyrene by the quantum-chemical MNDO method. It was shown that this mechanism is a common reaction of attaching a proton to the double bond of an olefin. The reaction is exothermic and is of the barrier-free type.

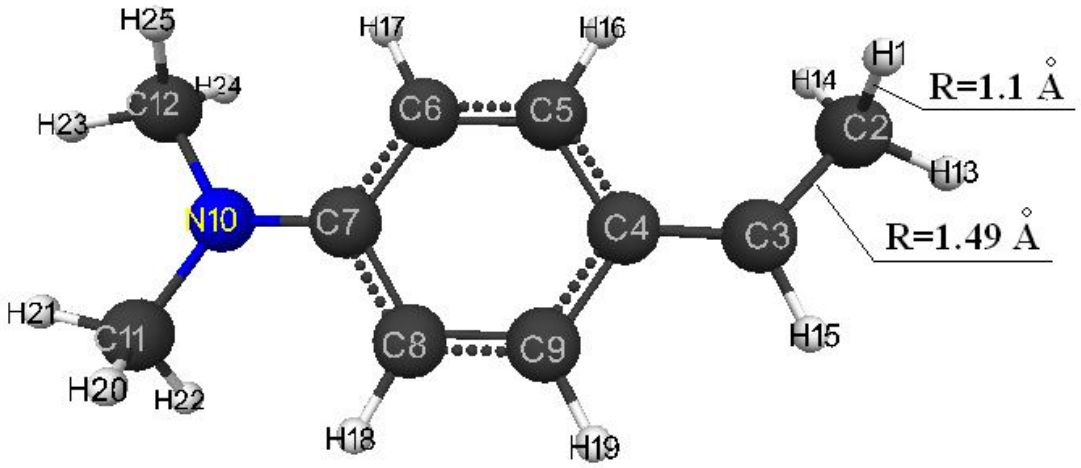

Fig.2. Final structure of the formed carbocation after the proton (H_1) attack of the α-carbon atom of p-dimethylaminostyrene (C_2)

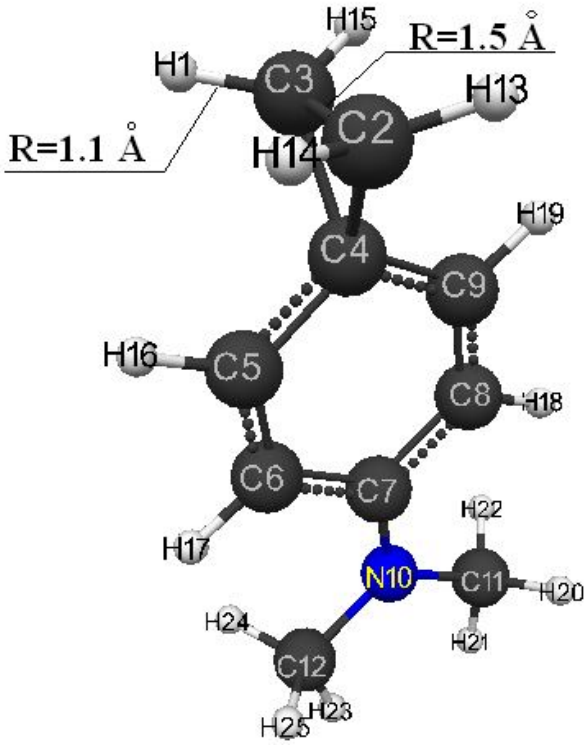

Fig.3. Final structure of the formed carbocation after the proton (H_1) attack of the β-carbon atom of p-dimethylaminostyrene (C_3)

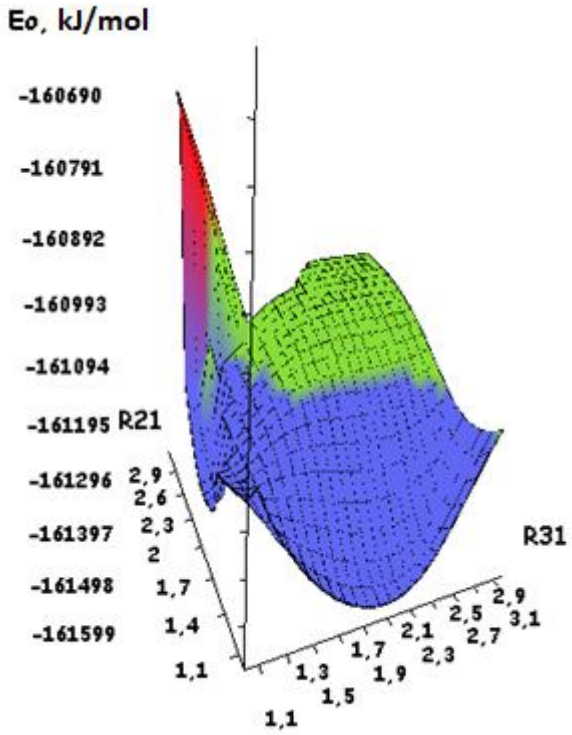

Fig. 4. Potential surface of the energies of proton interactions with p-dimethylaminostyrene

Fig. 5. Change in the total energy along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the α-carbon atom of p-dimethylaminostyrene

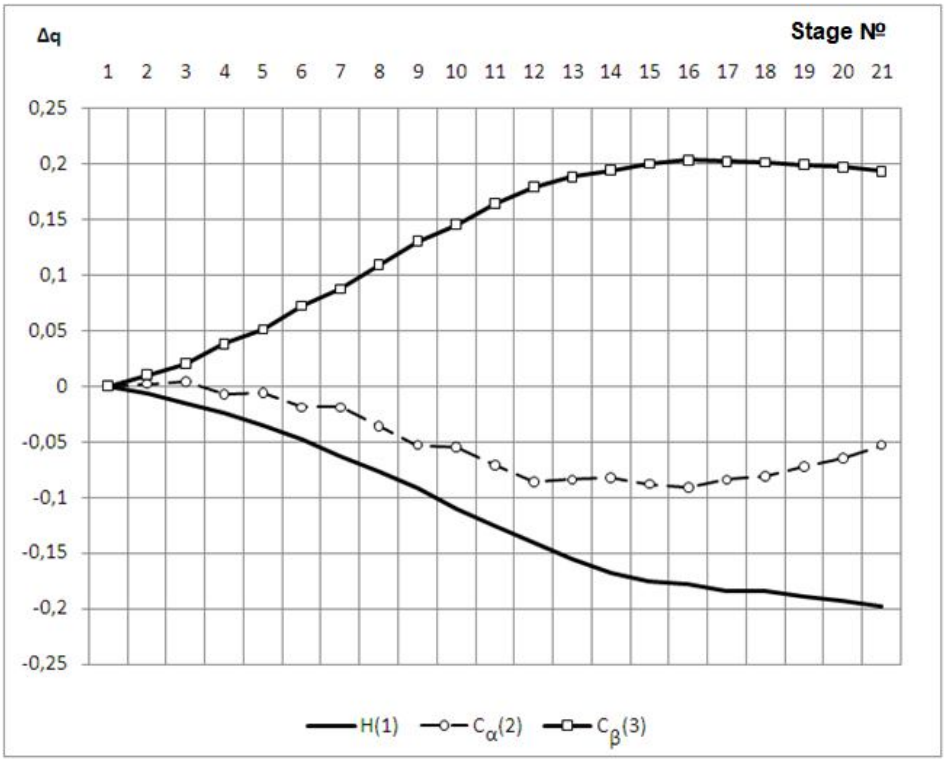

Fig. 6. Change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the α carbon atom of p-dimethylaminostyrene

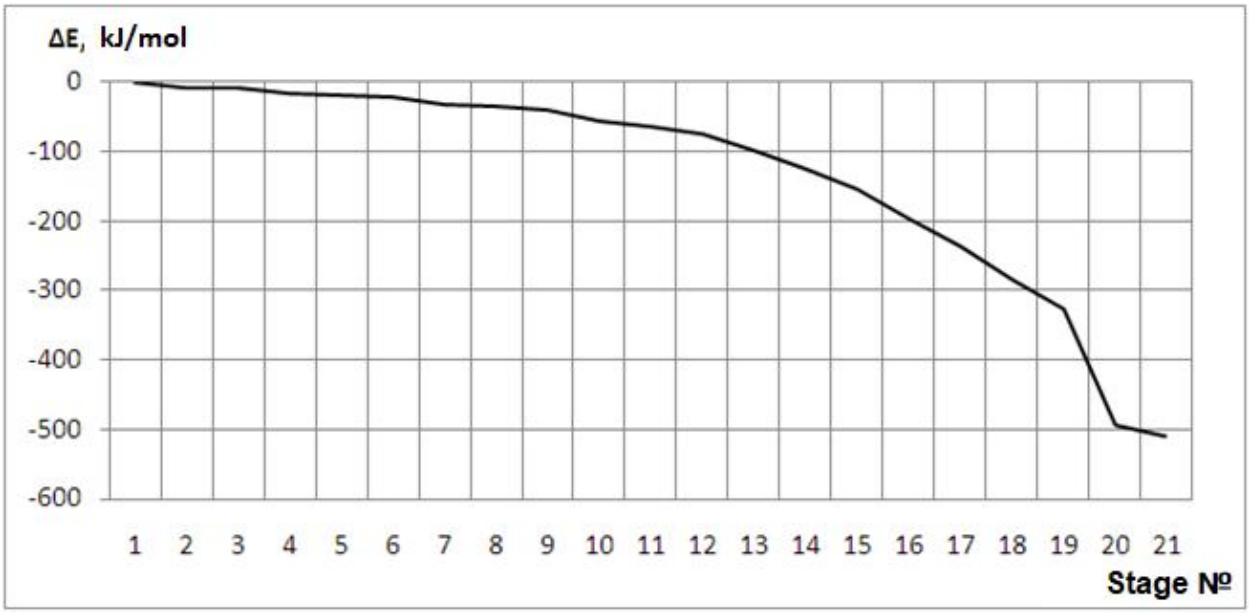

Fig. 7. Change in the total energy along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of p-dimethylaminostyrene

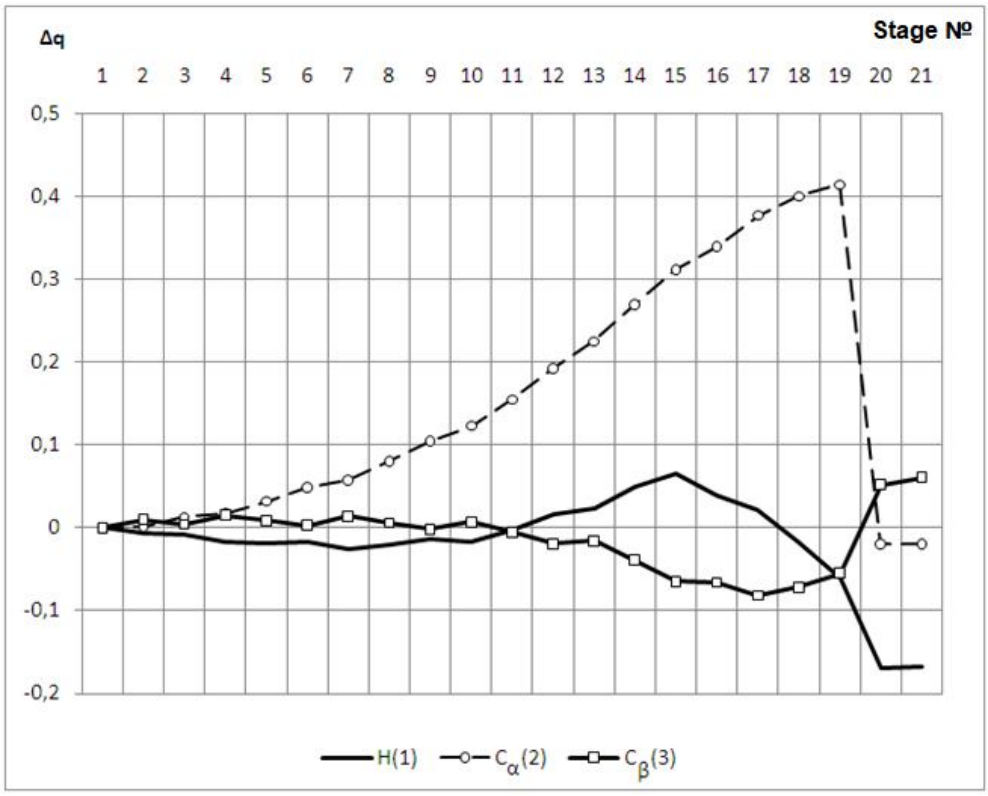

Fig. 8. Change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of p-dimethylaminostyrene

References

1. Kennedy J. Cationic polymerization of olefins / – Moscow, 1978. – 431 p.
2. Sangalov Yu.A., Minsker K.S. Polymers and copolymers of 4-methylpentene-1 / – Ufa, 2001. – 381 p.
3. Babkin V.A., Zaikov G.E., Minsker K.S. Quantum-chemical aspect of cationic polymerization of olefins / – Ufa, 1996. – 182 p.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. Babkin V.A. Quantum-chemical study of the mechanism of protonation of 2,3,4,5-tetramethylstyrene by the AB INITIO method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Rakhimov A.I., Rakhimova N.A., Titova E.S. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – C. 22-28.
7. Babkin V.A. Potential interaction surface of a proton and a monomer of the cationic polymerization of 1-methylene-4-vinylcyclohexane. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Ovcharova V.A., Pristanskov A.A., Rakhimov A.I., Rakhimova N.A. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – No. 4 (199). – S. 43-47.
8. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the ab initio method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // In the collection: Materials of the I All-Russian scientific-practical conference of the Sebryakovsky Branch of the Volgograd

State Technical University and the National University of Science and Technology "MISiS". – 2018 .- p. 164-170.
9. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the ab initio method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // In the collection: Materials of the I All-Russian Scientific and Practical Conference of the Sebryakovsky Branch of the Volgograd State Technical University and the National University of Science and Technology "MISiS". – 2018 .- p. 170-186.
10. Ovcharova V.A. Potential interaction surface of a proton and a monomer of the cationic polymerization of allylcyclohexane. / Ovcharova V.A., Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Bakholdin I.I., Fomichev V.T., Fedunov R.G., Stoyanov O.V., Zaikov G.E., Sangalov Yu.A. // In the collection: State, problems and prospects for the development of a socially-oriented building complex at the regional level. Materials of the IV All-Russian scientific and technical Internet conference dedicated to the 15th anniversary of the Sebryakovsky Branch of Volgograd State Technical University. – 2017 .- p. 116-129.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – No. 4 (125). – S. 5-6.
12. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // In the collection: Materials of the II All-Russian student scientific and technical Internet conference. – 2017 .- p. 17-22.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // In the collection: Materials of the II All-Russian scientific-practical conference of the Sebryakovsky branch of the Volgograd State Technical University. – Volgograd, 2020 .- p. 107-112.
14. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // In the collection: Materials of the II All-Russian Scientific and Practical Conference of the Sebryakovsky branch of the Volgograd State Technical University. – Volgograd, 2020 .- p. 30-36.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // In the collection: Materials of the II All-Russian scientific-practical conference of the Sebryakovsky branch of the Volgograd State Technical University. – Volgograd, 2020 .- p. 36-42.
16. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
17. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.

ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ПОВЕРХНОСТЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРОТОНА И О-МЕТОКСИСТИРОЛА

Андреев Д.С., Игнатов А.В., Лысенко Е.И.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования о-метоксистирола классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция экзотермична и имеет без барьерный характер. Тепловой эффект реакции при атаке на α-углеродный атом равен 556 кДж/моль.

Summary

The first research of protonation mechanism of o-methoxistyrene has been performed by a classical quantum chemical method – MNDO. It has been shown, that the mechanism is a common connection reaction of proton and the double bond of the monomer. The reaction is exotermic and barrier-free. The heat effect of the reaction in the attack of the α-carbon atom is 556 kJ/mol.

***Ключевые слова**: механизм протонирования, метод MNDO, о-метоксистирол*

***Keywords**: mechanism protonizataion, method MNDO, o-methoxistyrene*

Введение

Впервые полимеризацию о-метоксистирола и её кинетические особенности исследовали в 1964 году в работе [1] в присутствии $BF_3 \cdot Oet_2$ в различных растворителях – Cl_4, $CHCl_3$, CH_2Cl_2 и $(CH_2Cl)_2$ при температуре от -20 до +30°С. Используя принцип стационарного состояния по уравнению Майо [2], они рассчитали соотношение констант скоростей реакции. Они показали, что отношение $K_{пер.\ м}/K_p$ (где, $K_{пер.\ м}$ – константа скорости передачи цепи на мономер, K_p – константа роста) не зависит ни от температуры реакции, ни от диэлетрической проницаемости растворителя. Кроме того, установлено, что соотношение K_o/K_p (где K_o – константа скорости роста-обрыва материальной цепи полимеров уменьшается с понижением температуры и диэлектрической проницаемости. Также некоторые интересные данные по полимеризации и сополимеризации о-метилстирола были приведены в этой же работе [2]. Другая информация по полимеризации этого мономера практически отсутствует. До сих пор неизвестны механизмы элементарных актов (инициирование-рост-обрыв), природа активных центров и роль растворителя на электронном уровне.

Изучение механизма протонирования о-метоксистирола является первым шагом в изучении механизма элементарного акта инициирования катионной полимеризации этого мономера. В связи с этим, цель настоящей работы – квантово-химическое исследование механизма протонирования о-метоксистирола классическим полуэмпирическим методом MNDO через построении потенциальной поверхности протона и изучаемого мономера.

Методическая часть

Для изучения механизма протонирования был выбран классический квантовохимический метод MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [3-4], в связи с тем, что этот метод специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … $C_9H_{10}O$ (о-метоксистирол) 21 атом, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M-мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$

Для исследования механизма протонирования о-метоксистирола выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с о-метоксистиролом по аналогичной методике работ [6-7]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы, изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. По полученным данным значений энергий вдоль координат реакции строилась эквипотенциальная поверхность взаимодействий протона о-метоксистиролом (см. рис. 4). Исходная модель атаки протона молекулы о-метоксистирола показана на рис. 1.

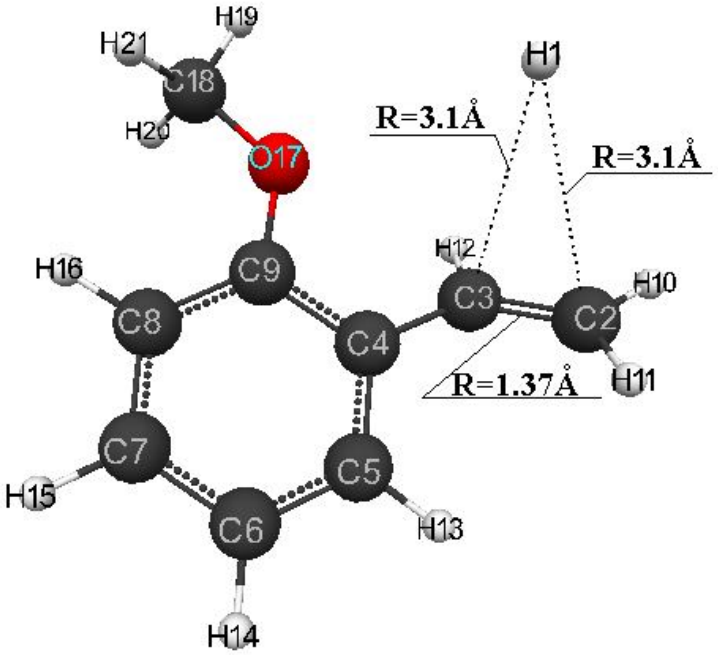

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы о-метоксистирола

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt [5].

Результаты расчетов

Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α– и β–углеродному атому о-метоксистирола показано на рис. 4, 5 и 7. Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α– и β–углеродному атому о-метоксистирола показано на рис. 6 и 8. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома о-метоксистирола (C_2) и разрыва двойной связи о-метоксистирола представлена на рис. 2. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β – углеродного атома о-метоксистирола (C_3) и разрыва двойной связи $C_2 = C_3$ показана на рис. 3. Кроме того, из рис. 4 видно, что на всем пути движения протона (инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы $H^+ \ldots C_9H_{10}O(E_0)$ неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β-углеродные атомы о-метоксистирола (рис. 5, 7). Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 65 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β- углеродного атома. Тепловой эффект реакции при атаке на α-углеродный атом равен 556 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 491 кДж/моль.

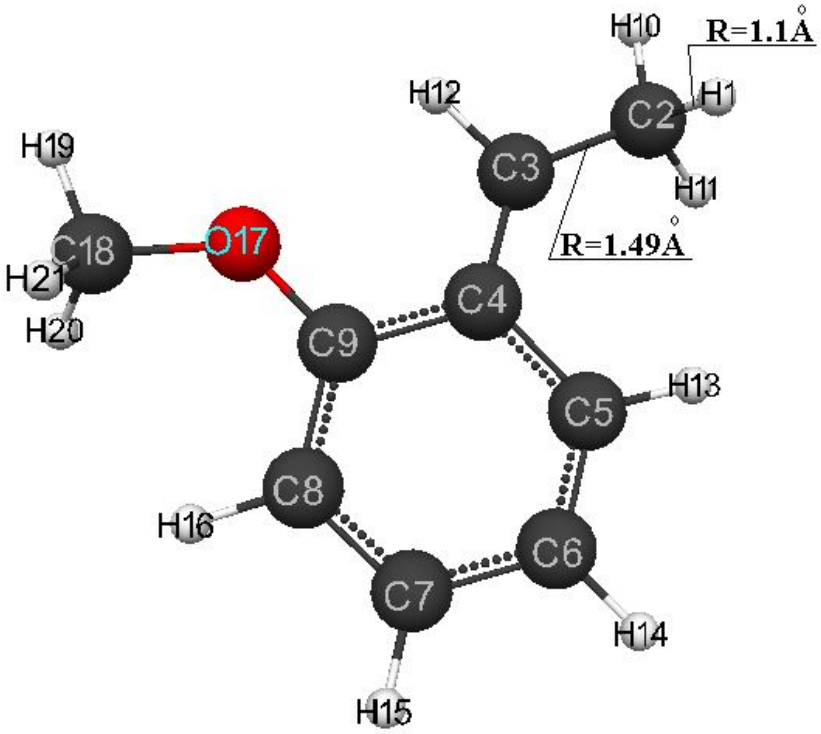

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α – углеродного атома о-метоксистирола (C_2)

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы о-метоксистирола свидетельствует о том, что механизм протонирования катионной полимеризации о-метоксистирола идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования о-метоксистирола квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер.

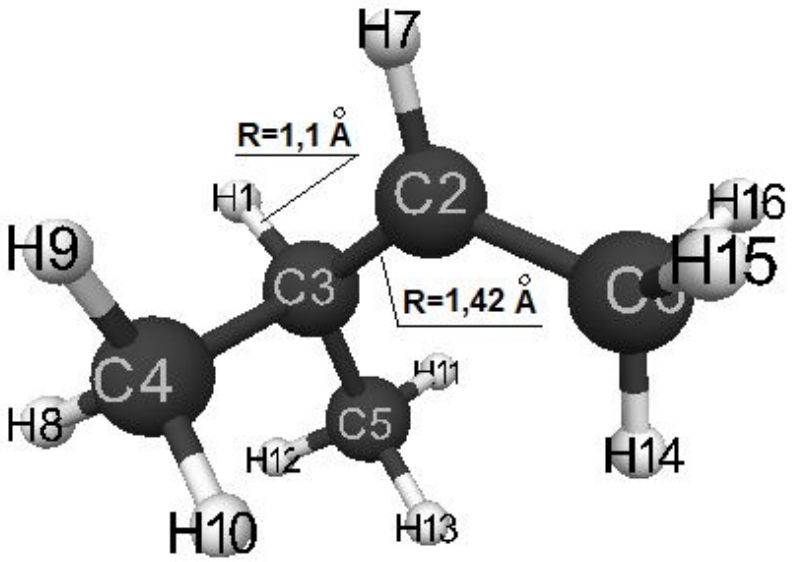

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β – углеродного атома о-метоксистирола (C_3)

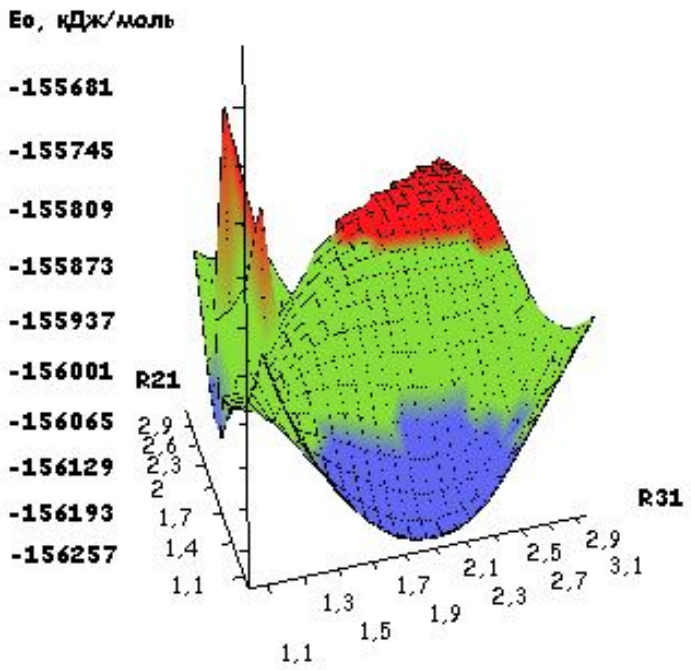

Рис. 4 – Потенциальная поверхность энергий взаимодействий протона с о-метоксистиролом

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому о-метоксистирола

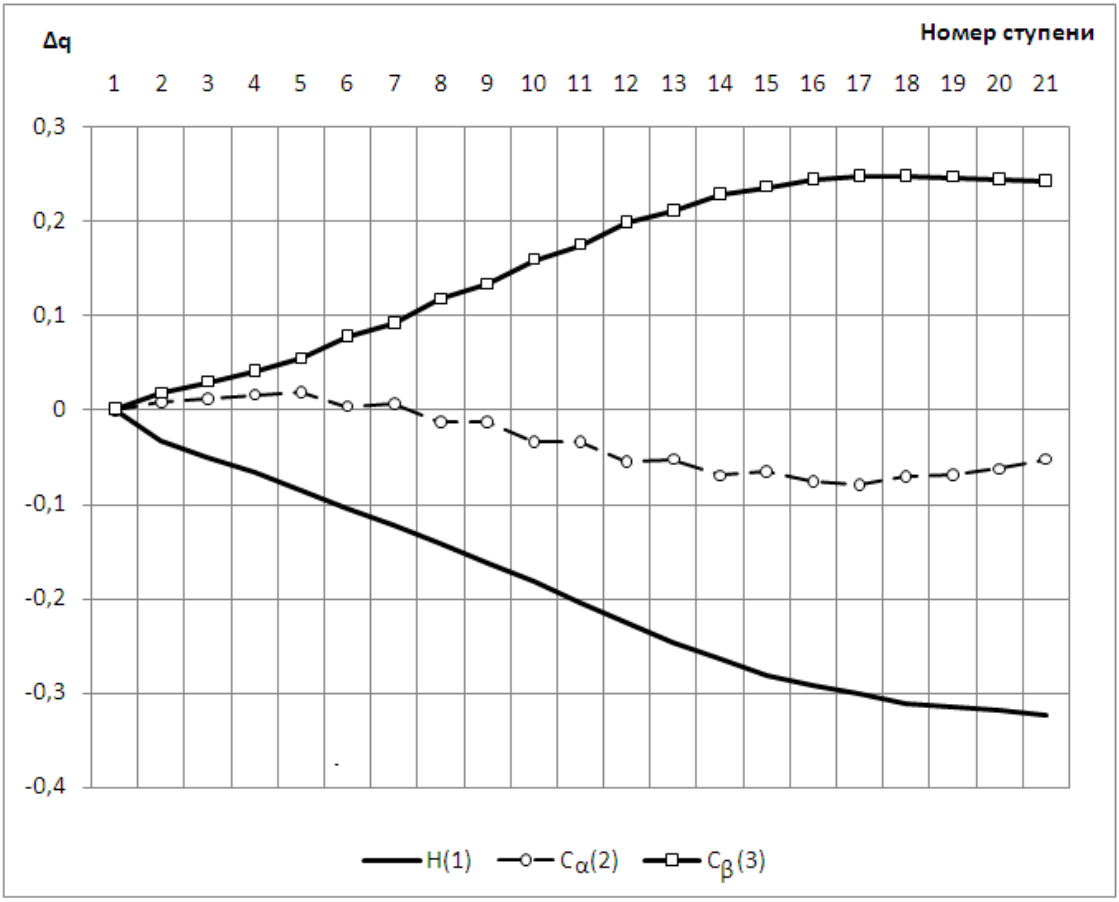

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому о-метоксистирола

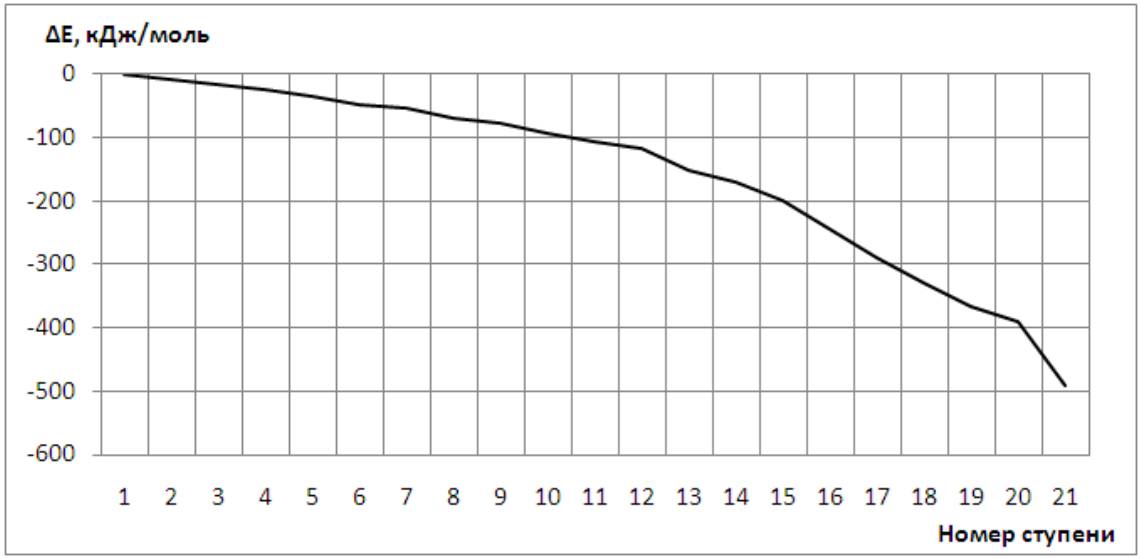

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому о-метоксистирола

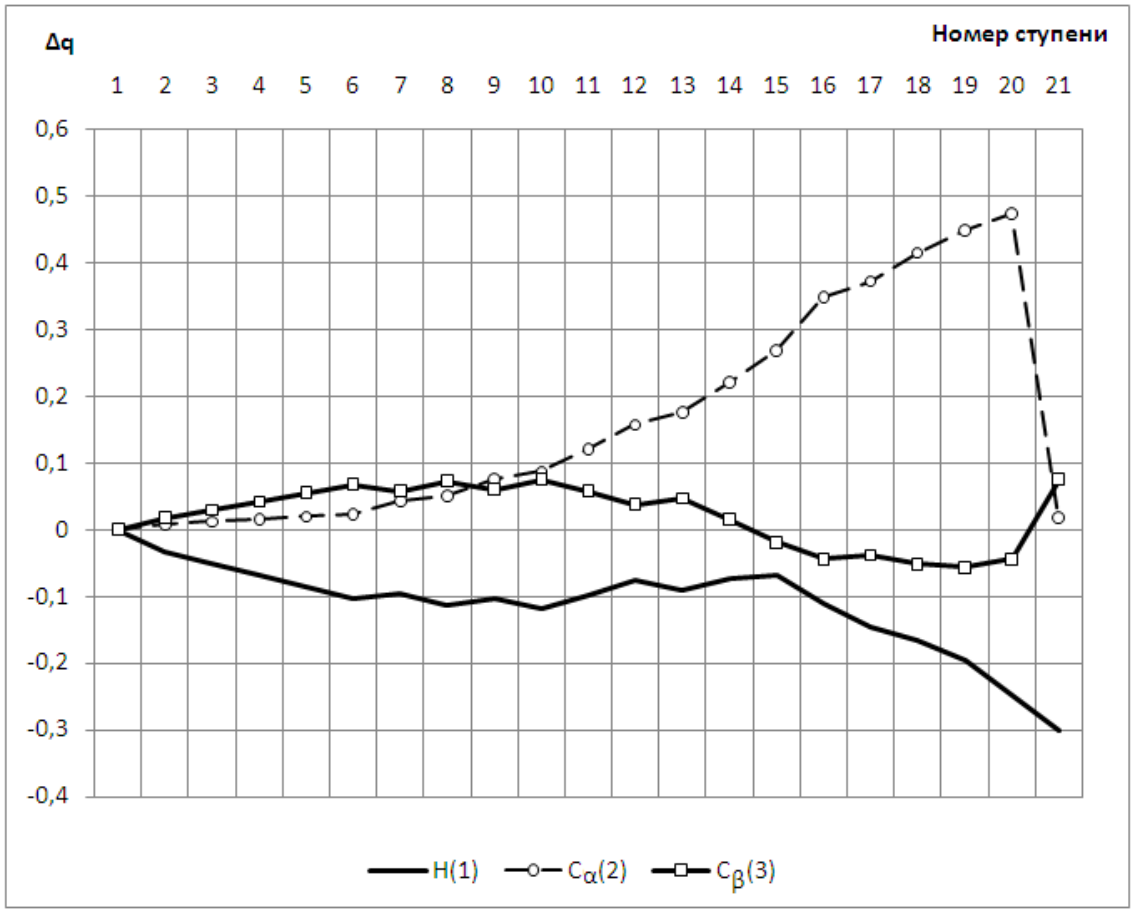

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому о-метоксистирола

Список литературы

1. Imanishi Y., Matsushita S., Higashimura T., Okamura S., Makromol. Chem., 70, 68 (1964).
2. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов / Дж. Кеннеди. – М., 1978. – 431 с.
3. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
4. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
5. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
6. Бабкин В.А., Скорченко В.Ю., Андреев Д.С., Заиков Г.Е. Потециальная поверхность взаимодействия протона и стирола. «Вестник» Казанского технологического университета. 2016. Т.19, №12, с.10-13.
7. Бабкин В.А., Игнатов А.В., Андреев Д.С., Прочухан К.Ю., Стоянов О.В., Заиков Г.Е. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и п-этилстирола. «Вестник» Казанского технологического университета. 2016. Т.19, №14, с.9-12.

ОСОБЕННОСТИ СОВРЕМЕННОГО ГЕОДЕЗИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЯ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ КАДАСТРОВЫХ РАБОТ

Либеровская А.Н., Князев А.П., Пристанскoв А.А.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Развитие технологий в современном мире затрагивает все сферы жизнь в том числе и геодезическое оборудование. Современные приборы, которые пришли на место традиционным позволяют решать задачи, которые ранее не могли выполнятся с высокой точностью и скоростью. В основу их работы заложены ранее используемы принципы измерения, которые с годами совершенствуются, делая измерения более простым и автоматизированными.

Annotation

The development of technology in the modern world affects all spheres of life, including geodetic equipment. Modern devices that have replaced the traditional ones allow solving tasks that previously could not be performed with high accuracy and speed. Their work is based on previously used measurement principles, which have improved over the years, making measurements simpler and more automated.

Ключевые слова: геодезическое оборудование, инновации в геодезии, кадастровые работы, геодезия.

Key words: surveying equipment, innovations in geodesy, cadastral work, geodesy.

Геодезическое оборудование подразделяется на несколько видов оборудования:

Теодолиты

Нивелиры

Тахеометры

Лазерные дальномеры

Геодезические спутниковые приемники (GNSS приемники)

Лазерные сканеры

Каждый вид прибора выполняет определённые функции (замер углов, расстояний, высот и определения координат), а некоторые из них и выполняют замеры одновременно нескольких параметров.

2. Теодолит

Прибор для измерения вертикальных и горизонтальных углов в геодезических работах. Углы измеряются в градусах и минутах.

Существую электронные теодолиты, позволяющие во время съемки получать результаты измерения на цифровом табло. Сокращает время измерения и ошибки при ручном снятии измеренных углов.

Прибор для определения разности высот между двумя точками земной поверхности. Измерения проводятся с помощью нивелирной рейки – проградуирована линейка.

Также, как и с теодолитом существуют электронные нивелиры, отличаются они от обычных тем, что в них встроено электронное устройство, которое снимает отсчет по специальной рейке с очень высокой точностью. Применение электронного нивелира сокращает время измерения и исключает ошибки человеческой невнимательности.

3) Лазерные сканеры

Прибор включающий в себя съемочную систему которая с высокой скоростью (от нескольких тысяч до миллиона точек в секунду) измеряет расстояние от сканера до поверхности измеряемого объекта и регистрирующая соответствующие направления (горизонтальные и вертикальные углы) с последующим формированием 3-х мерного изображения (скана). В итоге лазерный сканер выдает массив точек, которые имеют три пространственные координаты X, Y и Z.

Тахеометр – прибор, который измеряет горизонтальные и вертикальные углы, превышения и расстояния, также определяет координаты на местности. Несмотря на довольно небольшой размер, он является инструментом, который объединяет в себе функции теодолита и дальномера. Наличие внутри тахеометра процесса с мощным программным обеспечением позволяет производить необходимые расчеты и измерения быстро и с минимальной погрешность, а также обрабатывать и запоминать большой объем информации.

В настоящие время, растущая потребность в геодезических приборах, развитие электроники, компьютерных технологий, лазерной техники, позволяет производить не только новые модели известных приборов, а также разрабатывать новые технологии и геодезическое оборудование. Продолжают улучшаться электронные тахеометры. За последние годы (10 – 15 лет) из прибора, соединяющие в себе дальномер и теодолит, он превратился в прибор для использования в кадастровой съемке, топографической съемке и геодезическом сопровождении строительства.

И это все благодаря объединению в электронном тахеометре функций электронного теодолита, лазерного дальномер и полового компьютера. На сегодняшний день электронный тахеометр используется для реконструкции, инженерных изысканиях, в строительстве, наблюдениях за деформациями, землеустроительных и кадастровых работах для решения широкого круга прикладных задач.

В кадастровых работах электронные тахеометры используются реже, чем спутниковые приемники, так как ими измерения выполнять гораздо дольше. Но при этом они имеют некоторое преимущество от спутникового приемника.

Во – первых, электронным тахеометром можно проводить измерения не только на улице, но и внутри помещения, GNSS приемником невозможно проводить измерения внутри помещения, так как ему обязательно открытое небо для связи со спутником летающем вокруг Земли.

Во – вторых, в электронном тахеометре присутствует лазерных дальномер, и не придется тратить дополнительные деньги на его покупку, так как это необходимый прибор для кадастровых работ, и без него некоторые работы провести невозможно.

Теперь рассмотрим основные минусы электронного тахеометра от геодезического спутникового приемника:

1) Нужно при измерениях иметь видимость минимум на 2 пункта и станцию с известными координатами.

2) Измерения занимают больше времени в отличие от спутникового метода в режиме RTK.

3) Прибор дольше устанавливается и центрируется на станции;

4) Дольше наводить на нужную точку.

5) При измерениях необходимо 2 человека.

6) Сложнее в работе.

Но при этом в строительстве тахеометр — необходимый прибор, так как точность, которую выдает тахеометр, ни выдаёт не один геодезический прибор, включая GNSS приемники. И именно в строительстве нужные высокоточные измерения, так как точность измерения там должна составлять до 1 мм [4]. И измерения на стройплощадке проводятся не редко под крышей, а GNSS спутником можно проводить съемку только под открытым небом.

Делая из всего выше сказанного вывод, что электронный тахеометр универсальный прибор (т.е. он совмещает в себе нивелир, теодолит, спутниковый приемник и лазерный дальномер), который подходит абсолютного ко всем видам геодезических работ. Его можно использовать как в строительстве, так и в кадастре. Так как он совмещает себе все функции измерения: расстояния, углы, высоты и координаты. Но при этом выбор зависит, не только от точности и универсальности прибора, но и от удобности его использования и времени потраченного на получения результата работ.

Представленные выше тахеометры имеют очень высокий уровень выдаваемой точности при измерениях, любой из них может подойти в кадастровых работах так как там достаточно точности в пределах 2-3 см.

Лазерный дальномер – это геодезический прибор, который измеряет расстояния с помощью лазерного луча.

Описать как работает данный прибор достаточно легко – измеряется время, которое потребуется для лазерного луча, чтобы пройти расстояние от прибора до измеряемого объекта.

Лазерный дальномер отличается от простой рулетки тем, что:

1) позволяет делать измерения в пределах сотни метром, с высокой точностью даже в труднодоступных местах;

2) измерения можно сделать за считанные секунды

3) кроме того, при измерении обычной рулеткой иногда нужны 2 человека, что с лазерным дальномером никогда не случится.

Также большинство лазерных дальномеров имеют множество дополнительных функций такие как: запоминания результатов измерения в память прибора, выполнения различный вычислений таких как, расчет площади, периметров и объемов, и измерения углов.

В кадастровых работах таких как техническая инвентаризация (определения местоположения, площади и размеров, фактическое использование и состояние объекта капитального строительства) лазерный дальномер незаменимая вещь.

Именно лазерным дальномером определяются расстояния, размеры и вычисляется площадь необходимы объектов недвижимости (помещения, здания, сооружений). Данный прибор обеспечивает необходимую точность и удобства измерения [1; 2].

Лазерный дальномер можно заменить электронным тахеометром, имеющим в своем составе лазерный дальномер, но у данного вида прибора имеются ряд преимуществ:

- он компактен (имеет маленький размер и его легко носить в кармане, также мало весит)
- измерения проводятся быстрее и проще
- не стребует сложной установке на местности
- маленькая стоимость.

Спутниковые навигационные системы (СНС) – система, предназначенная с целью установления местоположения (определения координат) водных, наземных и воздушных объектов. СНС около 20 лет применяется в геодезическом обеспечение кадастровых работ для определения координат пунктов ОГС и ОМС. На настоящие время СНС включает существующие и создающиеся системы: ГЛОНАСС, GPS, GALILEO и т.д., при этом только две из них обеспечивает полное и бесперебойное покрытие Земли (GPS и ГЛОНАСС)

Навигационные спутники, непрерывно передают потребителям от всех НС радионавигационные сообщения, которое содержит оперативные цифровые данные и несёт фазовую и кодовую информацию. Совокупность всех сигналов, излучаемых спутниковыми системами, образуют в околоземном пространстве радионавигационного поля в котором работают принимающая аппаратура.

Спутниковые геодезические приемники могут работать в одной системы или в нескольких (GPS, ГЛОНАСС, GALILEO). Измерения GPS спутниками производятся на одной или нескольких чистоте (L1, L2, и L5) определения выполняются по кодовой или фазовой информации полученного сигнала [3].

- L1 передаётся в диапазоне 1575.42 МГц
- L2 передаётся в диапазоне 1227.60 МГц
- L2 передаётся в диапазоне 1176.45 МГц

P-code – радионавигационная система является защищенным кодом, доступ к нему гражданских пользователей ограничен. Он обеспечивает метровую точность при определении координат, а при дифференциальных методах измерений – дециметровую.

C/a code – открыть для всех гражданских пользователей, но обеспечивать меньшую точность. Раньше он предавался только на L1, сейчас веден на других частотах. Его точность составляет сотни метров (селективный доступ, который снят).

Кодовый способ не обеспечивает высокую точность, поэтому геодезические приемники работают в основном по фазе несущих частот.

Наиболее точно производят измерения геодезические спутники, имеющие 2-е чистоты и работающие одновременно и по кодам, и по фазам.

Данные системы имеют некоторые недостатки.

- Ионосферные и тропосферные задержки

Сигнал спутника проходящий через ионосферу может быть замедлен (из-за низко расположенных спутников – увеличение расстояния прохождения сигнала, воздействия на сигнал водяного пара и солнечной активности). Эти задержки приводят к ошибке при вычислении дальности, так как воздействую на скорость сигнала.

- Ошибки часов спутника и приёмника

Учитывая, что часы спутника точные, ошибка может составлять около 3 наносекунд, так как они могут уходить слегка впредь и назад, что вызывает ошибки при вычислении координат

- Многолучевость

Данный вид ошибки возникает, когда геодезический приемник устанавливается рядом с большими отражающимися поверхностями (типа озера и стеклянных зданий). Сигнал от спутника не попадает на антенну по прямой, а отражается на ближайший объект, а потом попадает на антенну отраженным сигналом.

Каждый приемник может проводить измерения независимо от других приемников или синхронно с другими приемниками.

Поэтому существует два метода измерения:

- Абсолютный метод – когда измерения проводятся одним приемником независимо от других

Точность измерения при данном методе достигает 1.5- 15 м. Данный метод не применяется в геодезических и кадастровых работах, так как не обеспечивает необходимую точность.

- Относительный метод – когда измерения проводятся приемникомсинхронно с другими приемниками.

Имеет более высокую точность измерения до 5 мм. При таком методе наблюдений один из приемников располагается в пункте с известного координатора.

Референц – станция (база) – приемник, который установлен на пункте с известными координатами. Так, как данный приемник находится на пункте с известными координатами, то он может точно оценить дальности до различных спутников, поэтому он определяет разность между вычисленными и измеренными дальностями и эти разности называются поправками.

Ровер – приемник с помощью которого определяется местоположения объекта, и именно он принимает поправки от базы.

Геодезические спутниковые приемники имеют ряд преимуществ по отношению к электронным тахеометрам в кадастровых работах:

1) Не требуется обеспечивать взаимную видимость между пунктами для определения координат на местности.

Спутниковые измерения выполняются в любую погоду и в любое время суток.

3) Измерения осуществляются в течении нескольких минут, что существенно упрощает производство полевых работ.

4) Автоматизация измерений с помощью спутникового приемника повышает производительность труда и минимизирует ошибки

5) Измерения можно осуществлять в движении.

3. Точность измерения увеличивается благодаря снижению влияния атмосферы [5].

Поэтому именно этот метод измерения с применением спутниковых приемников чаще всего применяется в кадастровых работах, так как имеет ряд преимуществ.

Таким образом, проведя теоретический анализ достоинств и недостатков электронных тахеометров, лазерных дальномеров, и геодезических спутниковых приемников при производстве кадастровых работах было выявлено, что в кадастровых работах лучше всего применять спутниковые приёмники, так как они наиболее практичны, повышают производительность при полевых работах, имеют наибольшую степень автоматизации.

Список литературы

1. Брынь М.Я. Геодезическое обеспечение кадастра объектов недвижимости: учебное пособие / М.Я. Брынь, В.Н. Иванов, Д.В. Крашеницин. – СПб.: Петербургский государственный университет путей сообщения, 2011 – 18 с.
2. Ворошилов А.П. Геодезические работы в кадастровой деятельности: учебное пособие / А.П. Ворошилов. – Челябинск: Изд-во ЮурГУ, ЦДО, 2011. – 126 с.
3. Ворошилов А.П. Спутниковые системы и электронные тахеометры в обеспечении строительных работ: учебное пособие / А.П. Ворошилов – Челябинск: АКСВЕЛЛ, 2007. – 163 с. Монахова М. А. Методы применения спутниковой системы (проект «Москва») для геодезического обеспечения кадастра объектов недвижимости: автореферат диссертации. – Москва, 2017. – 24 с.
4. Официальный сайт оборудования Stonex – https://www.stonex.it/
5. Сайт компания Империя Гео выпускающих геодезическое оборудование разных производителей – https://imgeo.ru/

ОСОБЕННОСТИ ГЕОДЕЗИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ СОВРЕМЕННЫХ КАДАСТРОВЫХ РАБОТ

Либеровская А.Н., Князев А.П., Пристансков А.А.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В настоящее время ежедневно осваиваются новые территории, растут города, строятся различные объекты недвижимости. Данный процесс сегодня, как никогда ранее, нуждается в грамотной систематизации и урегулировании, так как именно сейчас объемы строительной, кадастровой деятельности в разы больше, чем прежде.

Abstract

Currently, new territories are being developed every day, cities are growing, and various real estate objects are being built. This process today, more than ever before, needs competent systematization and regulation, since right now the volume of construction and cadastral activities is many times greater than before.

Ключевые слова: геодезия, геодезические работы, картография, кадастровые работы, геодезическое обеспечение, земельные участки, недвижимость.

Key words: geodesy, surveying, cartography, topographic surveys, geodetic support of land

Результатом кадастровых работ в отношении объектов недвижимости являются межевые планы (для земельных участков и их частей), технические планы (для всех видов

строений), акты обследования, которые составляются кадастровым инженером при подготовке документов о снятии объекта недвижимости с учета.

Межевой план земельного участка подготавливается на базе геодезической части кадастровых работ – то есть по материалам съемки, таким, как координаты поворотных точек границ земельного участка, горизонтальные проложения. Геодезическое оборудование в ходе таких работ может использоваться разное: как теодолиты, электронные тахеометры, лазерные дальномеры, так и спутниковые приборы. Также межевой план может формироваться аналитическим способом, если за основу взят утвержденный проект межевания территории, и картометрическим, если за основу взят картографический материал (карты, планы, ортофотопланы и т. Д). Однако, имеет место быть использование этих методов совместно. Пример такого сочетания методов рассмотрим чуть позже. Технический план также требует определения координат поворотных точек контура здания, помещения, но дополнительно включает в себя внутренние обмеры помещений [1].

В случае, если целью работ является образование новых земельных участков или зданий и сооружений, межевание земель и подготовка технических планов производится для постановки объектов недвижимости на кадастровый учет с регистрацией права или без нее. В случае же, если объект недвижимости уже стоит на кадастровом учете и, соответственно, имеет свой кадастровый (условный) номер, производится уточнение сведений об этом объекте недвижимости, включая площадь, местоположение границ и другие характеристики. Часто встречается, что декларативная площадь объекта недвижимости, указанная, например, в государственном акте на право собственности на землю, отличается от фактически существующей. Для этого и производится уточнение таких объектов недвижимости, и новые актуальные сведения вносятся в ЕГРН.

Можно выделить следующие основные цели геодезических работ в кадастре [2]:

- полевые (геодезические) измерения на объектах недвижимости;
- определение координат поворотных точек границ объектов недвижимости;
- определение площадей;
- геодезические разбивочные работы;
- производство топографической и кадастровой съемки;
- составление публичной кадастровой карты города или района.

Основой для производства всех видов геодезических работ на объектах недвижимости являются опорные геодезические сети: ГГС и ОМС. Относительно их производится определение координат, вынос границ земельного участка на местность, топографические съемки.

Таким образом, можно подвести, что задачей геодезического обеспечения современных кадастровых работ является сбор основных характеристик и сведений об объектах недвижимости, которые затем переносятся в ЕГРН.

Картографическое обеспечение кадастровых работ заключается в составлении, оформлении, чтении и использовании на практике кадастровых карт территории. Кадастровое картографирование является одним из направлений тематического картографирования. Картографическая основа является важной частью обеспечения современных кадастровых работ, так как она определяет в значительной степени адекватность и эффективность кадастра.

Кадастровые карты – это тематические карты, на которых отображаются сведения о местоположении земельных участков, зданий и сооружений, объектов незавершенного строительства, об их правовых характеристиках (категория земель, вид разрешенного строительства и т.д), о прохождении государственных границ, о территориальных зонах, зонах с особыми условиями использования территории и о многом другом. Однако, кадастровые карты – это не только источник и носитель информации, еще они выполняют такие функции, как хранение, организация и анализ данных.

В настоящее время ознакомиться с кадастровой картой, охватывающей территорию Российской Федерации, может каждый желающий на сайте Росреестра [2] так как она предназначена для неограниченного круга лиц и является публичной.

Рассмотрим современные геодезические системы координат (ГСК). В настоящее время применяются следующие СК[3]:

1) Геоцентрическое пространственные – X, Y, L.

Они введены в государственной системе ПЗ-90 на общем земном эллипсоиде.

2) Эллипсоидальные геодезические координаты – B, L, $H_г$.

3) Плоские прямоугольные геодезические координаты в проекции Гаусса-Крюгера – x, y.

Эти координаты в настоящее время используются в СК-95.

4) Местные системы координат (МСК).

Существует местная систем координат кадастрового округа с его номером. Эти системы введены в 2008 году.

МСК были введены, чтобы исключить имеющие искажения на краях шестиградусных зон в проекции Гаусса-Крюгера.

Под МСК понимают прямоугольную систему координат, установленную в отношении ограниченной территории, не превышающей субъект Российской Федерации.

Начало отсчета МСК и ориентировка осей смещены относительно действующей ГСК (СК-95).

МСК действует только на ограниченной территории. Ранее они водились на территории отдельных городов для проведения инженерностроительных изысканий и проектирования. Вне городов МСК не было, поэтому до 2008 года кадастровые работы проводились на территории городов в МСК, а вне их – в ГСК [4].

В 2008 году на территории РФ введена кадастровая МСК однотипно по всем кадастровым округам (к. о). За основу МКС к. о была принята стараяМСК СССР 1963 года. Но в ней вместо шестиградусных зон использованы трехградусные зоны проекции Гаусса-Крюгера. Эти трехградусные зоны в МСК к. о введены в каждом округе по-разному.

Каждая МСК связана с формулами пересчета с ГСК (СК-95) и МСК соседних округов. Такие формулы называются ключами перехода.

Таким образом, можно заключить, что:

1) Определение местоположения границ земельного участка в настоящее время в основном проводится методом спутниковых определений, но был обнаружен целый класс задач, в которых необходимо применение картометрического метода;

2) Точность определения местоположения границ земельного участка зависит от категории земель и может быть определена разными способами. Вычисление СКП

местоположения точек требует производства точных определений, в том числе картометрических.

Список литературы

1. Ворошилов А. П. О точности крупномасштабных материалов ГИС. / Геоинформационные технологии: актуальные проблемы и стратегии развития. – Челябинск: Изд-во ЮурГУ, 2012. – с. 11-16.
2. Детинич Г. Учёные создали пиксель в миллион раз меньше, чем у экранов современных смартфонов: [Электронный ресурс]. 11.05.2019. URL:https://3dnews.ru/987290 (дата обращения 17.10.2020).
3. Дехканова, Н. Н. Использование аналитического, картометрического и фотограмметрического методов при определении координат характерных точек границ ЗУ, а также контура здания, сооружения или объекта незавершённого строительства на ЗУ: [Электронный ресурс]. 26.02.2016. URL: https://www.pbprog.ru/products/articles/5703/ (датаобращения 15.10.2020).
4. Варламов А.А., Гальченко С.А., Рулева Н.П. Проблемы кадастрового учета земель лесного фонда: [Электронный ресурс]. 11.08.2016. URL: http://отрасли-права.рф/article/19702(датаобращения 15.10.2020)

ИНЖЕНЕРНО-ГЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗЫСКАНИЯ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ ФУНДАМЕНТА ПОД МАЛОЭТАЖНОЕ СТРОИТЕЛЬСТВО

***Князев А.П., **Князева Г.Н., *Пристансков А.А.**

* Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

** МКОУ СШ №7

Аннотация

Рассмотрено значение выполнения геологических изысканий при для получения комплексной информации об инженерно-геологических условиях участка застройки, которые покажут проявление неблагоприятных геологических процессов как природного, так и техногенного характера.

Annotation

The importance of performing geological surveys in order to obtain comprehensive information about the engineering and geological conditions of the development site, which will show the manifestation of adverse geological processes of both natural and man-made nature.

Ключевые слова. Геологические процессы, инженерно-геологические изыскания, проблемные грунты, фундамент.

Keyword. Geological processes, engineering and geological surveys, problematic soils, Foundation.

Каждый человек или семья после тяжелой работы хочет отдохнуть и провести свое свободное время вдали от городской суеты, а это можно сделать если есть дом за пределами городов. А если его нету, то хотят, по мере своих возможностей, чтобы он был. Любое жилое строение начинается с основы – фундамента дома, на котором располагается вся «коробка» дома. Собраны и подсчитаны все средства на исполнение мечты, но если мы не узнаем на чем будет располагаться (на каких грунтах) наш фундамент, и соответственно все наше жилое строение, наша радость будет преждевременна. Со временем могут проявиться разные негативные для целостности конструкции дома геологические процессы: подтопление, просадка грунтов, изменения уровня грунтовых вод и др. И поэтому, чтобы не рисковать ни своим здоровьем, ни здоровьем своих родных и близких, но и своими средствами и временем, рекомендуется провести инженерно-геологические изыскания участка застройки

В наше время все более набирает обороты применение геологических изысканий в малоэтажном строительстве в начале производства работ – расчет фундамента. Правильно рассчитанный фундамент это практически выполненная на 25 % работа по возведению объекта строительства, а это невозможно без проведения инженерно-геологический изысканий, выполненных квалифицированными специалистами – геологами, которые дают истинную информацию не только о грунтах, но и материалы о процессах происходящих в них: наличие грунтовых вод, изменение их уровня, агрессивности грунтов к материалам фундамента, рекомендации по типу фундамента. При заказе данного типа изысканий в малоэтажном строительстве необходимо брать во внимание следующие факторы: а) пятно застройки, для определения мест бурения надо знать где будут производиться строительные работы запланированного объекта; б) доступность, т.е. сможет ли буровая техника или переносные буровые установки, необходимая для проведения запланированных мероприятий, осуществить весь спектр изыскательских работ; в) объем выполняемых работ, т.е. надо знать или примерно предполагать размер будущего дома в проекте, его этажность, материал строительства и ряд других вопросов, которые могут появиться в ходе выполнения работ. В зависимости от размеров дома определяется количество скважин и глубина их заглубления, с учетом глубина промерзания характерной для данной местности; г) наличие или отсутствие топографической съемки, но это уже относится к другому виду работ - инженерно-геодезическим изысканиям [1].

Основным элементом конструкции здания является фундамента который ложится вес всей конструкции строения, от качества исполнения которого зависит и функциональность будущего объекта. Качества исполнения фундамента зависит от ряда учтенных геологических факторов, такие как тип грунтов и их механические свойства, уровень залегания грунтовых вод и их возможная динамика по сезонам, неровности рельефа, предполагаемой нагрузки «коробки» на фундамент, так и фундамента на подстилающие грунты, а для этого надо провести весь комплекс инженерно-геологических работ. И тут большую роль играют организации, которые могут оказать весь спектр услуг необходимых для получения материалов по грунтам участка, т.к. именно от фундамента зависит срок службы нашего строения, поэтому отдача предпочтения тому или иному виду фундамента зависит от местных особенностей грунтов и нагрузки, которая «ляжет» на эти грунты от возведенного объекта.

Фундаменты классифицируются по ряду признаков таких, как тип материала, способ опоры на грунты, глубина залегания и др. Выполнив геологию на своем участке мы получаем интересующий нас материал об участке застройки, а после этого квалифицированные специалисты останавливают свой выбор на том или ином типе фундамента.

Любой архитектор при проектировании дома обязан спросить с заказчика материалы инженерно-геологических изысканий, чтобы иметь более полное представление о грунте и его физических свойствах, уровне грунтовых вод, глубине промерзания грунта и т.п. Ведь главной причиной разрушения и неустойчивости фундамента является как раз эти и ряд других неблагоприятных геологических процессов [2].

Можно выделить ряд грунтов, которые имеют свои отличия по своим физическим и механическим свойствам.

Поскольку для фундамента опасно любое непредвиденное поведение грунтов в текущих условиях, то надо знать, чего можно ожидать в будущем. Можно выделить следующие виды грунта:

а) Скалистый - самый надежный грунт: прочный и не поддающийся воздействию подземных вод, мало подвержен температурным колебаниям, практически не оседает из-за давления фундамента на грунт;

б) Песчаный – не вспучивается, но постепенно проседает. Грунтовые воды не являются проблемой, так как у песка хороший коэффициент фильтрации. Необходимо рассчитать уровень проседания до начала строительства и, соответственно, выбрать тот тип фундамента, который рекомендован для этого вида грунта;

в) Глинисто-песчаный – зависит от соотношения глины и песка в грунте. Превалирует глина – характерно вспучивание, песок (супесь) –- также может вспучиваться и промерзать, но в работе немного проще;

г) Глинистый – проблемный тип – вероятны проседания, размытия и вспучивания. Рекомендуется учитывать уровень грунтовых вод;

д) Хрящевый - неплохие свойства, но имеет недостатки в виде вспучивания. Плохо поддается размытию благодаря высокому содержанию каменных элементов или гравия.

Идеальным основанием для здания является ровная плита, но это встречается редко, именно поэтому фундамент приходится устанавливать на наиболее подходящий грунт. Выигрывает в этом перечне песчаный грунт, который хоть и проседает со временем, но происходит это равномерно.

Целью инженерно-геологических изысканий является получение комплексной информации об инженерно-геологических условиях участка застройки, которые покажут проявление неблагоприятных геологических процессов как природного, так и техногенного характера.

Проведение **инженерных изысканий** обеспечивает максимально качественную и техническую надёжность строительства объекта. От качества и количества выполненных зависит достоверность информации о геологической среде, а также ваше здоровье вашей семьи и близких, надежность сооружения.

Результаты таких работ, как правило, представляются в виде «Отчета о проведении инженерно-геологических изысканий».

Список литературы

1. Князев А.П. О значимости инженерно-геологических изысканий для загородного строительства // В сборнике: Инновационное развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». Редколлегия: С.Е. Карпушова (отв. Ред.) [и др.]. Волгоград, 2020. С. 122-124.

2. http://www.buroviki.ru/

СИСТЕМЫ ДРЕНАЖА УЧАСТКА И ЛИВНЕВОЙ КАНАЛИЗАЦИИ БЮДЖЕТНОГО ИСПОЛНЕНИЯ

***Князев А.П., **Князева Г.Н.**

* Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

** МКОУ СШ №7

Аннотация

Рассмотрены варианты отвода избытка воды с участка, основные ошибки, которые допускаются при самостоятельном устройстве дренажа.

Annotation

The options for removing excess water from the site, the main errors that are allowed for independent drainage device are considered.

Ключевые слова. Дренаж, ливневая канализация, подземные и поверхностные воды.

Keyword. Drainage, storm sewers, underground and surface water.

Собственники домовладений хорошо знают, что «лишняя» вода на участке – это не особо хорошо. Лишняя вода приводит к подтоплению фундамента и территории, вымыванию основания, затоплению грядок и т.д. Как итог, возникают проблемы с «сухим» проходом по территории.

В теории данный материал о типах дренажа и видах атмосферных и подземных вод очень велик и не уместится в рамках одной статьи. А в практическом исполнении дренажная система, выполненная неправильно, работает первые несколько лет, а потом происходит ее заиливание, т.к. скорее всего был уложен в глинистый, суглинистый или другой грунт, дренаж перестаёт работать. За это время участок уже обжился, обзавелся какими-либо строениями и поэтому просто переложить дренажную систему становится проблематично, т.к. в процессе переформатирования можно «перекопать» весь участок и испортить весь ландшафт участка. Поэтому прежде чем начать ремонт дренажа надо подумать как обойтись минимальным ущербом для участка. Т.к. кризис еще не прошел и не думает заканчиваться, то надо подумать, как устроить ливневую канализацию для отвода дождевой воды от дома, что бы проблема была решена как количественно (сэкономленные средства), так и качественно.

Прежде чем начать процесс перекладки дренажа надо хотя бы материал по геологического обследования грунта, для нахождения водоупорных пластов (например, глины), гидрогеологии – какая именно вода приводит к подтоплению участка [1; 2].

Поверхностные воды характеризуются временным (сезонным) характером, что связано в первую очередь с естественными причинами – снеготаянием или обилием дождей. Наиболее проблемными для нас являются следующие типы подземные воды: капиллярная вода, грунтовая вода и верховодка. Притом что поверхностных вод в количественном соотношении больше, чем подземных вод. Поэтому, если поверхностная вода, например, после выпадения осадков, если не будет отведена дренажными системами или поверхностным стоком, будет просачиваться в грунт и переходить в подземную воду, поэтому поверхностный сток рекомендуется отводить ливневой канализацией, а не пытаться сделать поверхностный дренаж!

Ливневая канализация – система канализации, предназначенная для организованного и быстрого отвода выпавших на какой-либо определенной территории атмосферных осадков, а также талых поверхностных или подземных вод за пределы участка, что с

учетом грамотной организации рельефа на приусадебной территории позволит избежать застойных зон на участке, где будет скапливаться вода и дальнейшего заболачивания.

Основные ошибки, которые допускаются при самостоятельном устройстве дренажа: 1) несоблюдение правильного уклона уложенных дренажных труб: в среднем 5-7 мм на 1 п.м дренажной трубы; 2) применение более дешёвого известнякового щебня (вместо гранитного), который со временем подвержен размыву.

Первое, что приходит в голову, чтобы обустроить на участке бюджетный вариант ливневой канализации – уложить специальные лотки.

Лотки могут быть сделаны из бетона или пластика, но цена на них бывает разной и не всегда нас устраивающей (минимум от 370 руб/п.м.), что заставляет искать более дешёвые варианты обустройства ливневой канализации и систем водоотвода с участка.

Первый вариант. Можно использовать асбоцементные трубы (4м) и распилить их болгаркой вдоль длиной по 2м, чтобы избежать переломов, тем самым получив самодельный лоток. Но есть и большой недостаток этого варианта дренажа – необходимость самостоятельно пилить асбоцементные трубы, что не всегда нас привлекает.

Второй вариант – возможность приобрести водосточные желоба (пластиковые или металлические) и уложить их на подготовленное основание в слой бетона около 100 мм. Но первый вариант является более долговечным.

Схему укладки лотков представляет из себя следующий «состав»:

- Грунтовое основание в виде ложа.
- Слой песка или песчано-гравийная смесь толщиной – около 5 см.
- Бетон – около 7 см (армированный металлической сеткой на стыках).
- Лоток из трубы.

Третий вариант, сделать ливнёвку для отвода воды на базе «серой» трубы, которую используют при обустройстве внутренней канализации.

Уложив трубу в траншею и присыпав её грунтом, можно убедиться в том, что она держит форму, а ливнёвка работает [3; 4].

Практика говорит о том, что из любой ситуации можно найти выход. При отсутствии опыта или веры в свои силы всегда можно обратиться за советом к опытным участникам разных интернет-форумов, так и специалистов на месте, которые всегда подскажут, что и как правильно делать при монтаже.

Список литературы

1. Князев А.П. О значимости инженерно-геологических изысканий для загородного строительства // В сборнике: Инновационное развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». Редколлегия: С.Е. Карпушова (отв. Ред.) [и др.]. Волгоград, 2020

2. Князев А.П., Князева Г.Н. О малогабаритных буровых установках // В сборнике: Инновационное развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». Редколлегия: С.Е. Карпушова (отв. Ред.) [и др.]. Волгоград, 2020.

3. Князев А.П., Князева Г.Н. Об источниках водоснабжения и прокладке водопровода // В сборнике: Инновационное развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». Редколлегия: С.Е. Карпушова (отв. Ред.) [и др.]. Волгоград, 2020.

4. https://www.forumhouse.ru/

ИНЖЕНЕРНО-ГЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИЗЫСКАНИЯ: «ЗА» И «ПРОТИВ»

***Князев А.П., **Князева Г.Н.**

* Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

** МКОУ СШ №7

Аннотация

Рассмотрены положительные и отрицательные стороны изыскательских работ по геологии при возведении объектов загородного строительства небольшой площади.

Annotation

The positive and negative aspects of geological survey work in the construction of small-area suburban construction projects are considered.

Ключевые слова. Инженерно-геологические изыскания, проблемные грунты, техническое задание.

Keywords. Engineering and geological surveys, problem soils, technical task.

На интернет сайтах постоянно появляются темы с разными проблемными вопросами: «Треснул фундамент. Причины?», «В несущей стене появились трещины. Почему? Как это исправить» и ряд других вопросов. Да и сами мы проходя по улицам наших городов можем замечать ряд нарушений в целостности как фундамента, так и «коробки» дома. Одной из главных причин нарушения целостности конструкции часто называют отсутствие геологии, например, при возведенении объекта решили сэкономить и не делали инженерно-геологических изысканий. Думали, что и так пойдет, т.е. строили на «авось « пронесет.

Для многих застройщиков, пусть даже у них и будут результаты исследований грунтов, скорее всего будет непонятной информацией, т.к. разбираться в ней должны узкопрофильные специалисты, которые не всегда есть в наличии в той или иной организации, которая отвечает за возведение объекта

Еще со студенческой скамьи нас учат, что «коробки» домов могут быть выполнены по проекту, которых очень много, а вот тип фундамента, глубина его заложения и ряд других особенностей напрямую зависят от местных особенностей грунта и факторов на него влияющих, а это можно узнать только находясь на месте будущего возведения объекта. Задача фундамента перераспределить нагрузку от дома на грунтовое основание. Поэтому выполнять геологические изыскания грунта надо по заданию конструктора фундамента. Определитесь со своими «пожеланиями», что бы в дальнейшем они были строительным языком в тех.задании для организации, которая будет проводить эти изыскания. Иначе, это будет просто зря потеряны и средства и время.

В этом задании будет прописан, например, этажность сооружения, тип фундамента и примерная глубина его заложения, предполагаемая нагрузка на фундамент и на подошву грунта.

Получив техзадание организация составит программу обследования участка, где будет указано количество и глубина скважин, какие пробы д.б. взяты и какие исследования грунта уже в лабораторных условиях д.б. выполнены.После выполнения всех полевых и лабораторных работ будет составлен отчет о проведённых инженерно-геологических изысканиях [2;3].

Но и после полученного отчета застройщик получает только первичное представление о положительных и отрицательных сторонах своего участка строительства.

Итак, после того как проведены инженерно-геологические изыскания, получены рекомендации как по выбору типа фундамента, так и по глубине его заложения, спрогнозирована вероятность возникновения и дальнейшего развития опасных геологических процессов надо идти к конструктору фундамента и профессиональному архитектору-проектировщику. Если будет пропущено хоть какое -то звено в данной цепи то, в большинстве случаев, вы зря потратили свои средства и время…

Материалы инженерно-геологических изысканий – основа для расчета и проектирования фундамента.

Но, опять же, весь ход строительства идет от пожеланий и возможностей заказчика. Например, при заказе проекта загородного дома со всей требуемой документацией площадью от 120 до 150 м^2, сколько было заказано у настоящих профессионалов своего дела, а не скопировано из сети интернет и не подогнано под ваши требования. Мы воспитаны на «халяве» и поэтому хотим сэкономить и не платить мастерам своего дела. Работая удаленно заказчик получает только рекомендации, пожелания, не более того! Остальное уже – это наши риск и ответственность!

Если заказчик не готов идти по полному циклу работ, предусмотренному по плану – не выполняйте инженерно-геологические изыскания.

Даже если вы решили провести изыскания грунтов, то это не одномоментная работа, т.к. описывает состояние грунта на момент исследования, не прогнозируя его вероятные изменения со временем. А изменения м.б. разными вплоть до того что произошла застройка окружающего ваше место строительства территории и изменился уровень грунтовых вод (поднялся, например) из-за искусственного насыщения грунта водой.

Качество исполнения буровых работ может желать лучшего, например, по проекту было прописано выполнить 3-4 скважины. Их выполнили, но все пробы взяли из одной. Вопрос: в чем был смысл бурения остальных скважин?!

Каким способом были взяты пробы и в каком состоянии они дошли до лабораторных исследований тоже играет не последнюю роль. Про качество специалистов и говорить не стоит. Пусть даже у него в руках и современная техника, но если нет опыта работы или он минимален, то и качество изысканий будет таким же. Добросовестность геологов-бурильщиков играет не последнюю роль в «правдивости « отчета. А переделывать свою работу ох как не хотят и придумают ряд инструкций что бы не возвращаться к плохо выполненной работе.

Поэтому прежде чем заказать изыскательские работы, узнайте что из себя представляет та или иная организация, как говориться «сарафанное» радио самое правдивое [1;4].

Геологию своего участка вы делаете не ради бумажки с печатью, а для проектировщика фундамента. Поэтому надо помнить, что ремонт домов обойдется значительно дороже, чем траты на геологию, но опять же, мы думаем, что мы не окажемся в числе тех «счастливчиков» которые попали на ремонт.

Геология нужно обязательно делать если на нашем участке есть проблемные грунты, варианты линз, разуплотнения и т.п., в остальных случаях для частного строительства можно и не проводить. Но.. как узнать без геологии , что у вас этих проблемных грунтов нет?!

В итоге решать вам, готовы ли вы выделить из своего семейного бюджета средства для полноценного выполнения работ при возведении объекта строительства или не стоит!

Но их рекомендуется проводить если вы строите большой и тяжелый дом, который окажет значительную нагрузку на грунтовое основание; есть вероятность, что на участке проблемный грунт, например, глины, текучие и пластичные супеси, участок подсыпан привозным грунтом и непонятно, что находится под этим слоем и т.д.

Список литературы

1. Князев А.П. О значимости инженерно-геологических изысканий для загородного строительства // В сборнике: Инновационное развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». Редколлегия: С.Е. Карпушова (отв. Ред.) [и др.]. Волгоград, 2020
2. Князев А.П., Князева Г.Н. О малогабаритных буровых установках // В сборнике: Инновационное развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». Редколлегия: С.Е. Карпушова (отв. Ред.) [и др.]. Волгоград, 2020.
3. Князев А.П., Князева Г.Н. Об источниках водоснабжения и прокладке водопровода // В сборнике: Инновационное развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». Редколлегия: С.Е. Карпушова (отв. Ред.) [и др.]. Волгоград, 2020.
4. https://www.forumhouse.ru/

ИННОВАЦИОННЫЕ РАЗРАБОТКИ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

Пахомова О.К., Крутилин А.А.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В последнее время на строительном рынке все активнее появляются новые инновационные материалы и технологии их производства. В данной статье рассмотрены основные виды технологических инноваций и сущность их реализации на предприятиях строительной индустрии.

Ключевые слова: современное строительство, инновационные разработки, технологические инновации, эффективность деятельности.

Огромная роль в современном строительстве отведена инновационным разработкам в технологических процессах. Применение инноваций в строительном производстве решает ведущую роль для любого предприятия строительной индустрии, так как изменение самого не значительного параметра производства может резко повлиять на прибыль отрасли в целом.

Инновация – это нововведение, которое может охватить самые различные области строительной индустрии. Это использование новых технологических ресурсов, изменение технологии по требованиям научно-технического прогресса, управление трудовыми ресурсами на самом предприятии.

Технологические инновации – это результат деятельности предприятия, производство нового, более совершенного продукта, обязательно нашедшего применение в промышленной сфере услуг.

Все технологические инновации можно подразделить на два типа:

- продуктовые инновации;

- процессные инновации.

Продуктовые инновации – это любые продукты предприятия, которые являются новыми, воплощающими в себе современные технологии или использование более эффективных компонентов для их производства.

Процессные инновации – это освоение новых производственных технологий и методов производства. Они направлены на применение современного оборудования, которое повышает эффективность производства.

Для того чтобы нововведения стали инновациями необходимо использовать самые последние достижения техники и науки, а также опыт использования похожих технологических приемов в прошлом.

Инновации при их грамотном применении могут повлиять на конкурентоспособность, увеличить финансовую прибыль предприятия и расширить функциональность. Сам термин «инновация» очень тесно связан со многими другими терминами, например, изобретением или открытием.

Инновационные технологии могут стать опорой для мировой экономики, для этой цели важно идеализировать ключевые ресурсно-инновационные стратегии, которые и сделают структуру гармоничной.

Для того что бы повысить эффективность деятельности любого предприятия стройиндустрии в сфере инноваций необходимо удовлетворять современным требованиям общества. Повышение показателя конкурентоспособности и эффективности производства, а так же качества готовой продукции и полуфабрикатов оказывает прямое воздействие для достижения поставленной цели. Необходимо достигнуть баланса между стабильностью и усилиями по внедрению новых технологий; гибко приспосабливаться как к эволюционным, постоянно реализуемым нововведениям, так и радикальным, периодически осуществляемым нововведениям.

Конечно же, инновационная деятельность в итоге своей реализации должна удовлетворить определенным общественным потребностям, либо повысить эффективность предприятия в целом, но в результате внедрения новшества и получения нововведения это происходит далеко не всегда. Очень часто спрогнозировать влияние различных отрицательных факторов очень проблематично. На положительный результат могут повлиять экономические, юридические, технологические, рыночные факторы, а так же их совокупность.

Таким образом, технологические инновации – это возможность для предприятий внедрить ту или иную разработку, или предложить рынку продукт, который помог бы укреплению экономической ситуации. В любом случае применение инноваций в технологическом процессе — это высокий риск, так как не всегда известен результат внедрения нововведений и иногда подразумеваемый колоссальный успех может сулить полным провалом.

Список литературы

1. Алексеева М. Б. Анализ инновационной деятельности: учебник и практикум для вузов / М. Б. Алексеева, П. П. Ветренко. — Москва: Издательство Юрайт, 2020. — 303с.

2. Белова Л. Г. Инновации в мировой экономике: учебное пособие. — М.: Экономический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова, 2018. — 148с.

3. Ивантер В.В., Комков Н.И. Основные положения концепции инновационной индустриализации России // Проблемы прогнозирования. 2012. No 5. С. 3-12.

ЦЕЛЕСООБРАЗНОСТЬ ВНЕДРЕНИЯ КОМПЛЕКСНЫХ, ИНТЕГРИРОВАННЫХ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ СТРОИТЕЛЬНЫМИ ПРОЕКТАМИ

***Максимчук О. В., **Карпушова С.Е., *Гец В.А., *Сордия В.Н., **Крутилин А.А.**

*Волгоградский государственный технический университет
**Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Обоснована целесообразность внедрения комплексных, интегрированных систем управления строительными проектами по двум контурам унифицированных фаз.

Ключевые слова: строительный проект, методы управления, принципы управления проектами, уровни управления, автоматизация документооборота

Управление проектами, в том числе и строительными, базируется на соблюдении законов и принципов. К законам относят все те базовые законы, согласно которым осуществляется взаимодействие между хозяйствующими субъектами в рамках какой-либо экономической системы (национальной экономики, рыночной экономики) в пределах определенного государства или группы государств.

К ***базовым принципам*** управления строительными проектами относят:

- *единство социальных и экономических результатов*,
- *специализация и концентрация исполнителей проекта*,
- *иерархичность субъектов и объектов управления*,
- *нормативность в управлении*,
- *оптимальность управления проектом*.

Взаимоотношения между субъектами и объектами управления имеют определенную иерархию (соподчиненность по вертикали) по ***уровням управления*** (*верхним, средним, нижним*) и по связям между ***звеньями управления*** (соподчиненность по горизонтали между *функциональными и производственными звеньями*).

Передача информации между субъектом и объектом управления может осуществляться либо традиционным способом, т.е. без компьютерной обработки информации, автоматизированным (с применением ЭВМ), либо автоматическим способом (автоматические системы управления).

В теории и практике управления с прямой связью ассоциируют методы управления, под которыми понимают приемы и способы воздействия управляющей системы на управляемую.[1] Комплексная система управления строительным проектом решает целый ряд прикладных задач, таких как:

- автоматизация учета кадров;
- автоматизация ведения платежных операций;
- автоматизация учета материально-технического обеспечения;
- автоматизация учета документооборота;
- другие прикладные задачи.

Однако ключевой частью проекта внедрения комплексной информационной системы является внедрение автоматизированной системы документарного обеспечения

[1] Управление проектом: Учебное пособие/ С.А.Болотин; СПб. гос. архит.-строит. ун-т. – СПб., 2000. – 97 с.

управления строительными проектами на основе системы электронного документооборота, которая на сегодняшний день также необходима, как автоматизация бухгалтерского учета в середине девяностых годов. Причин этому много: 1) информацию необходимо обрабатывать как можно быстрее и качественнее и в настоящее время информационные потоки так же важны, как финансовые и материальные; 2) утеря, «старение», искажение информации, ее попадание не по адресу дорого обходится в условиях крайнгей динамичности и жесткой конкуренции. Для сферы производства и строительства очень актуальны проблемы:

- документы теряются;
- документы дублируются в различных формах представления одной и той же информации;
- накапливается множество документов, назначение и источник которых неясны;
- документы и информация, содержащаяся в них, попадают не по адресу;
- тратится масса рабочего времени на поиск нужного документа и формирование тематической подборки документов;
- создается несколько копий одного и того же документа – на бумагу и копирование документов тратится много времени, расходных материалов и усилий;
- на подготовку, обработку информации, содержащейся в документах, тратится много времени;
- в процесс создания документов вовлекается множество специалистов, которые вынуждены тратить много времени и усилий на их техническую подготовку;
- при построении систем управления крупными проектами процессы создания, движения, согласования документов становятся затратными по всем видам ресурсов;
- растет конфликтность в коллективе.

Внедрение системы электронного документооборота отчасти и во многом позволяет решить все эти проблемы и способствует:

- слаженной работу всех подразделений/ участников строительного проекта;
- упрощению/ универсализации работы с документами, повышению ее эффективности;
- повышению производительности труда сотрудников за счет сокращения времени создания, обработки и поиска документов;
- повышению оперативности доступа к информации;
- разграничению прав доступа информации по строительному проекту.

Вывод очевиден – автоматизация документооборота необходима в реализации любого строительного проекта, независимо от масштаба и типа собственности. В реализации любого строительного проекта можно выделить **два контура работы с документами**:

1) **учет и контроль за прохождением и исполнением документов** – выполняются персоналом в рамках подразделений документационного обеспечения управления строительными проектами (управлений делами, секретариатов, канцелярий и т.п.), работающих с учетно-контрольными данными о документах и их движении, организующих движение документов между всеми участниками строительного проекта: осуществляют получение, регистрацию, тиражирование, перемещение, рассылку, ведут контроль исполнения, обеспечивают ведение архивов;

2) **содержательная работа непосредственно с документами** – выполняется специалистами функциональных подразделений, обеспечивающих планирование строительного проекта, получающих документы, выполняющих их анализ и согласование,

готовящих и редактирующих новые документы, принимающих и исполняющих решения, готовящих планы и отчеты об их исполнении.

Практические многие виды работ и действий по реализации учетно-контрольных функций и работе с документами осуществляется на основе широкого использования электронных технологий. Однако до настоящего времени взаимодействие между делопроизводственными службами и функциональными подразделениями, а зачастую, и между специалистами внутри подразделений, осуществляется преимущественно на основе бумажных документов. Причиной тому служат и отсутствие необходимых аппаратно-программных средств, и традиционно сложившееся разделение труда, и отсутствие нормативной базы, отсутствие должной квалификации.

При реализации строительных проектов на удаленных расстояниях от управляющего центра, возникает множество помех из-за этого.

Очевидны огромные издержки такого разделения единого по сути процесса на две технологии, включая неоднократное преобразование электронных документов в бумажные, и наоборот – при казалось бы полностью информатизированом и компьютеризированном оснащении всех этих процессов, на деле работ возникает в несколько раз больше и по времени, и по затратам усилий конкретных работников, и по степени вовлеченности в выполнение технических операций возникает загрузка квалифицированных работников чисто техническими видами рабочих операций.

Главная тенденция сегодняшнего дня – расширение традиционных делопроизводственных технологий для поддержания электронного документооборота в организации, объединяющего функции контроля за прохождением документов и работу с самими документами в единую интегрированную технологию. Для того, чтобы распространить технологию традиционного документооборота на электронные документы система автоматизации делопроизводства должна быть дополнена такими функциями, как работа с файлами документов, аутентификация документов, отслеживание версий документов, согласование (обсуждение) документов, публикация принятых решений, аналитическая работа с документами, сканирование/распознавание бумажных документов, изготовление бумажных документов и др.

В связи с этим именно полноценные интегрированные системы делопроизводства и электронного документооборота позволяют привнести совершенно новое качество в организацию управления строительными проектами.

Еще одна из черт современного строительного бизнеса – оперирование большими объемами информации. Электронные базы данных как форма организации хранения информации – это не только ответ на реалии расширяющегося информационного пространства, но и осознанная необходимость ввиду расширения территориальных рамок ведения строительного бизнеса. Ведь от скорости доступа к необходимой информации, возможностей по ее анализу и обработке зависит эффективность строительного бизнеса, и как следствие, прибыль подрядчика, доходность заказчика и окупаемость самого строительного проекта. Внедрение систем электронного документооборота на предприятиях различных сфер деятельности позволяет значительно повысить производительность труда персонала, сократить непроизводительные затраты времени и накладные расходы и, в итоге, повысить общую экономическую эффективность работы всех подразделений и участников строительного проекта. Внедрение системы электронного документооборота требует интеграции разнородных информационных систем, обеспечивающих строительный проект. Возможная схема такой интеграции представлена на рис. 1.

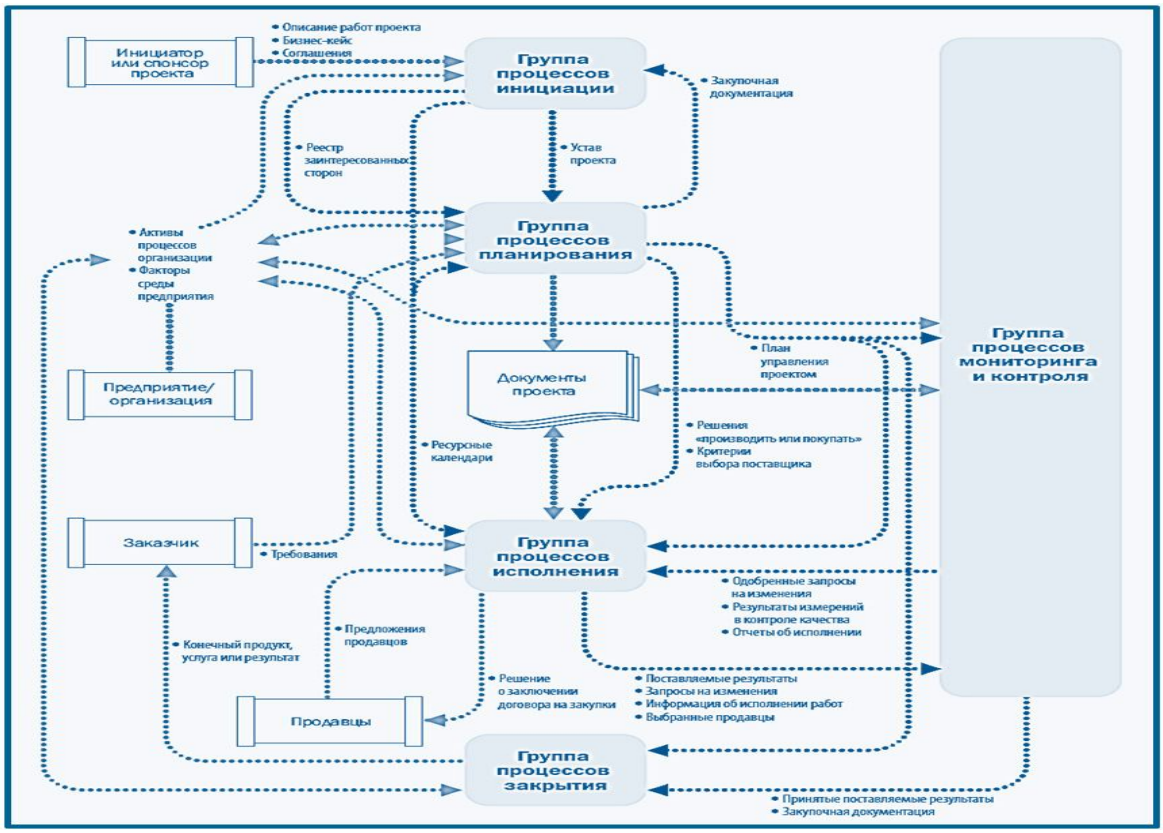

Рис. 1. Модель взаимодействия процессов управления проектом.
Источник: Руководство PMBOK, Издание 5[2]

Использование подобной комплексной системы позволит: снять ограничения на количество пользователей информацией по проекту; возможность доступа к системе из любой точки мира (например, в командировке, в удаленном филиале, из дома, из офиса и т.д.); гарантия своевременной доставки информации и документов; оптимальная организация хранения информации и документов; информационная безопасность. Тем самым обосновывается целесообразность внедрения комплексных, интегрированных систем управления строительными проектами по двум контурам унифицированных фаз.

Список литературы

1. Адванта. Управление проектами [Электронный ресурс] URL: http://construction.advanta (дата обращения 01.03-12.2017 г.)

2. Бабаскин, С. Я. Инновационный проект. Методы отбора и инструменты анализа рисков. Учебное пособие / С.Я. Бабаскин. – М.: Издательский дом «Дело» РАНХиГС, 2014. – 240 с.

3. Ильина О. Управление проектами: ориентация на устойчивое развитие // Проблемы теории и практики управления. – 2012. - № 1. – С. 106 – 109.

4. Мариневич Е. Ю. Управление инвестиционно-строительными проектами на основе интегрированных контрактов: Диссертация [Электронный ресурс]: Режим доступа — https://vivaldi.nlr.ru/bd000275774/view#page=12

5. Карпушова С.Е., Чижо Л.Н., Гец В.А., Чеванин В.А., Максимчук О.В., Алехина С.А. Инновационные подходы к управлению энергозатратами в промышленности:

[2] Виды стандартов управления проектами [Электронный ресурс] URL: http://projectimo.ru/upravlenie-proektami/standarty-upravleniya-proektami.html (дата обращения 11.03-12.2017 г.)

Региональная экономика, инвестиции, инновации, социально-экономическое развитие: теория, методология и концепция модернизации: материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет», 26 февраля 2019 г., Михайловка- Волгоград/ М-во науки и высшего образования и науки Рос. Федерации, Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2019.

ФИЛЬТРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ХРИЗОТИЛЦЕМЕНТНЫХ СУСПЕНЗИЙ НА ОСНОВЕ МОНОМИНЕРАЛЬНЫХ ЦЕМЕНТОВ

Сидорова Н.Ю., Крапчетова Т.В.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В производстве хризотилцементных изделий процессы фильтрации играют важную роль на всех этапах формования изделий. Фильтрационные свойства хризотилцементной суспензии оказываю влияние на равномерность распределения цемента, ориентацию хризотилового волокна, количество и размер пор в хризотилцементном камне, т. е. определяют физико-механические свойства и долговечность готового продукта.

Ключевые слова: хризотил, хризотилцемент, портландцемент, фильтрация

Abstract

In the production of chrysotile cement products, filtration processes play an important role at all stages of product forming. Filtration properties of chrysotile cement suspension affect the uniformity of cement distribution, orientation of chrysotile fiber, the number and size of pores in chrysotile cement stone, i.e. determine the physical and mechanical properties and durability of the finished product.

Keywords: chrysotile, chrysotile cement, Portland cement, filtration

В настоящее время изучению закономерностей фильтрации и фильтрационных свойств хризотилцементных суспензий посвящено множество исследований, но в литературе достаточно мало сведений о фильтрационных свойствах основных минералов портландцементного клинкера, определенных непосредственным измерением.

Для исследования был принят объем исследуемой суспензии 400 – 500 см^3, расход цемента составил 80 – 85 г, выбран фильтрационный анализ, как наиболее полно моделирующий производственные процессы, при средней (относительной) ошибке эксперимента ± 5% [1]. Асбест использовался Баженовского месторождения, первичную обработку осуществили в промышленных установках, с последующей распушкой в лабораторной установке. Портландцемент – с предприятия АО «Себряковцемент» измельченный на сите №008 до остатка 8 – 9%. Концентрация хризотилцементной суспензии в пределах 0,08 – 0,1 г/см^3, при твердой фазе: 13% - хризотила и 87% - портландцемента. В качестве жидкой фазы использовали: известково-гипсовую воду, с содержанием оксида кальция - 1,17 г/л, и технологическую воду производства ОАО «Себряковский комбинат асбесто-цементных изделий», с содержанием оксида кальция - 1,12 г/л.

По результатам исследований был построен график фильтрации, с диапазоном от 0 до 2000 – коэффициент сопротивления фильтрации; и диапазоном от 0 до 40 – время фильтрации, мин. [2]:

$$t / V = A_ф \cdot V^2 + \beta_ф \quad (1)$$

где t – время фильтрации, с; V – объем фильтрата см^3/см^2; $A_ф$ – коэффициент, учитывающий концентрацию, $\beta_ф$ – интенсивность роста сопротивления слоя при фильтрации с/см.

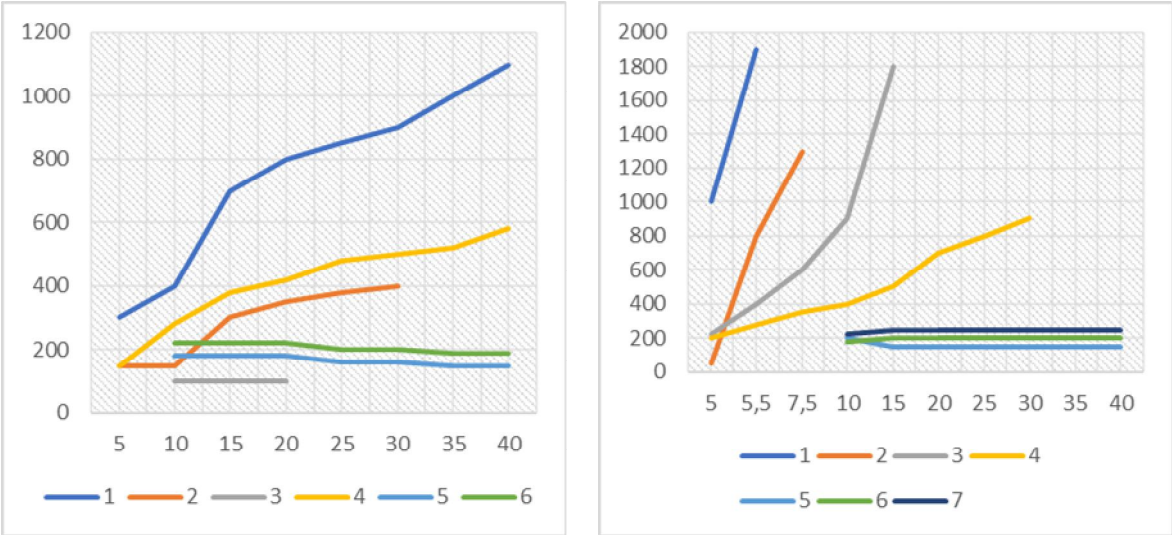

Рис.1. Фильтрационных свойств хризотил-асбестовых суспензий
1 – содержание трехкальциевого силиката, 2 – содержание двухкальциевого силиката, 3 – содержание трехкальциевого алюмината, 4 – содержание четырехкальциевго алюмоферрита

На первом графике представлены изменения фильтрационных свойств хризотилцементных масс с использованием технологической воды шиферного комбината, а на втором с использованием известково-гипсовой воды. Следует отметить, что применение известково-гипсовой воды увеличивает фильтрационные свойства хризотилцементных суспензий.

Полученные результаты показывают, что лучшими фильтрационными свойствами обладают хризотилцементные массы с высоким содержанием трехкальциевого и двухкальциевого силиката в изестково-гипсовой воде. Было отмечено, что наихудшими фильтрационными свойствами (масса отложившегося слоя низкая) обладают с большим содержанием алюмоферритов кальция. Более сложное влияние оказывает высокое содержание трехкальциевого алюмината [3]. Добавка гипса, содержащаяся в известково-гипсовой воде, в корне меняет картину фильтрации. В хризотилцементных суспензиях наблюдается интенсивное коагуляционное структурообразование, вследствие чего фильтрационные свойства их значительно улучшаются. Положительная роль гипса отмечена в результате образовании кристаллов гидросульфоалюминатна кальция, обладающего высокой адгезией к хризотиловому волокну [4].

Вывод: минералы портландцемента обладают различной адгезионной способностью к хризотил волокну, оказывает значительное влияние на фильтрационные свойства хризотилцементных суспензий. При имеющемся представлении об отрицательном влиянии трехкальциевого алюмината на свойства хризотил-асбеста установлено, что алюмоферриты кальция показывают наихудшие условия фильтрации

Список литературы

1. ГОСТ 12871-2013 Хризотил. Общие технические условия

2. Наумова Л.Н. Повышение качества асбестоцементных изделий на основе модифицированного хризотил-асбеста : Дис. ... канд. техн. наук : 05.23.05 Белгород, 2006 160 с. РГБ ОД, 61:06-5/2757

3. Бутт Ю. М., Сычёв М. М., Тимашев В. В. Химическая технология вяжущих материалов: учебник для вузов. // М.: Высшая школа, 1980. – 472 с.

4. ГОСТ Р 56196-2014 Добавки активные минеральные для цементов. Общие технические условия.

II. Управление устойчивым развитием

PEST-АНАЛИЗ КАК ИНСТРУМЕНТ ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ НА РЕАЛИЗАЦИЮ ПОТЕНЦИАЛА ПРЕДПРИЯТИЯ

Секачева Т.В., Селиванов А.Ю.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

PEST-анализ является незаменимым инструментом исследования условий бизнеса, позволяющим исследовать не только потребительские, но и рыночные тренды и предпочтения. В статье рассматривается воздействие факторов внешней среды на социально-экономическую систему ОАО «СКАИ».

Abstract

PEST analysis is an indispensable tool for studying business conditions, allowing you to explore not only consumer, but also market trends and preferences. The article examines the impact of environmental factors on the socio-economic system of OAO “SKY”.

Ключевые слова: *PEST-анализ, учитывать внешние факторы, использовать возможности предприятия*

Keywords: *PEST analysis, take into account external factors, use the company’s capabilities*

PEST-анализ является самым распространенным и популярным методом анализа макросреды предприятия. Это базовый метод, используемый при разработке стратегического планирования, позволяющий учитывать внешние факторы. Предприятие вынуждено искать и находить пути уменьшения затрат на производство, что снижает себестоимость, и повышает конкурентоспособность продукции. Можно выделить следующие основные характеристики внешней среды:

- политические,
- экономические,
- социальные,
- технологические.

Преодолеть вышеперечисленные факторы и полноценно использовать возможности предприятия по силам только при наличии искусства стратегического управления.

Благодаря анализу факторов внешней среды предприятию удается разрабатывать свой перечень опасностей, который ему необходимо преодолеть с наименьшими потерями.

ОАО «Себряковский комбинат асбестоцементных изделий» является одним из крупнейших предприятий строительной индустрии Российской Федерации. Внешние факторы, которые могут повлиять на деятельность ОАО «СКАИ», представлены в PEST-анализе.

Таблица 1

PEST – анализ внешних влияющих факторов

Политические факторы	Экономические факторы
• законодательство в области бизнеса и труда; •глобализация; •жесткость государственного регулирования экономики; • льготные экономические режимы; • инвестиционная политика государства;	• темпы инфляции и дефляции; • уровень занятости населения; • реальность бюджетного баланса; • стабильность курса рубля; • уровень ставок по кредитам; • тенденция изменения тарифов на транспортные услуги и энергоресурсы; • налоговые ставки; • таможенная политика.
Социальные факторы	**Технологические факторы**
• демографическая политика; социальная напряженность в обществе; • уровень предложения на рынке рабочей силы; • защита прав потребителей; • степень неравенства различных социальных групп; • активность профессиональных союзов в защите прав трудящихся	• состояние производства и его энергоэффективность; • возможности новых технологических разработок; • уровень технологии конкурентов; • темпы обновления технологии; • наличие возможности быстрой конверсии деятельности и расширения производства

На сегодняшний день основными препятствиями для производства асбестоцементной продукции могут стать экономическая нестабильность в стране, резкое снижение уровня доходов населения, повышение уровня технологии конкурентов. Чтобы не допустить наступления нежелательных событий, специалисты ОАО «СКАИ» проводят мониторинг рынка, чтобы вовремя выявлять новые тенденции. Кроме того, предприятие постоянно работает над повышением конкурентоспособности: усовершенствует производство, повышает качество продукции, разрабатывает инновации.

ОАО «СКАИ», несмотря на жесткую конкуренцию, сохраняет свой производственный и творческий потенциал, и динамически развивается, эффективно действует в рыночных условиях. Об успешном развитии предприятия свидетельствуют: Почетный Диплом «Международное признание» за «Большой вклад в развитие экономики России на основе применения передового международного опыта по внедрению

современных методов организации управления, экономики, финансов и производственных процессов» и Диплом Международной Академии Реальной Экономики «Лидер региональной экономики».

Для того чтобы ОАО «СКАИ» и дальше успешно работать на строительном рынке, необходимо учитывать опыт, как зарубежных коллег, так и российских, наращивать выпуск продукции, не боятся использовать инновационные разработки, проводить мониторинг рынка и при необходимости оперативно корректировать политику предприятия.

Список литературы

1. Карпушова С.Е., Секачева Т.В. Современный стратегический анализ (учебное пособие). Издательство Волгоградского государственного технического университета, ISBN978-5-9948-2751-2, 2018 г., 121 с.

ТЕНДЕНЦИИ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПОДДЕРЖКИ МАЛОГО БИЗНЕСА В ВОЛГОГРАДСКОЙ ОБЛАСТИ

Секачева Т.В., Селиванов А.Ю.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Поддержка предпринимательской деятельности на региональном уровне, является залогом успешного социально-экономического развития территории. В статье приведена систематизация направлений, форм такой поддержки в Волгоградской области.

Annotation

Support of business activities at the regional level is the key to successful socio-economic development of the territory. The article provides a systematization of directions and forms of such support in the Volgograd region.

Ключевые слова: *малый бизнес, эффективность, поддержка, устойчивое развитие*

Keywords: *small business, efficiency, support, sustainable development*

Волгоградская область уделяет особое внимание малому бизнесу, который, безусловно, является эффективным сектором экономики и обеспечивает успешное решение социально-политических и финансово-экономических проблем. Поддержка малого и среднего предпринимательства – в числе приоритетных направлений работы областной администрации.

Серьезный вклад в развитие предпринимательской деятельности вносят институты

развития бизнеса:

1. Помощь в предоставлении услуг по сопровождению проектов, осуществлению бизнеса оказывают Центр поддержки предпринимательства, Центр инжиниринга и Российский экспортный центр;

2. Волгоградский областной бизнес-инкубатор начинающим бизнесменам дает право на льготную аренду офисов;

3. Финансовую поддержку бизнесу в регионе предоставляют Гарантийный фонд, Микрофинансовый центр и региональный Фонд развития промышленности. С целью повышения доступности заемных средств для бизнеса в 2017 году был создан Фонд микрофинансирования, предоставляющий предпринимателям прямые займы по ставкам ниже, чем процентные ставки в банках.

На территории Волгоградской области ведутся мероприятия по развитию действующей поддержки, вовлечению молодежи в предпринимательскую деятельность, которые направлены на создание новых объектов инфраструктуры. Организуется работа по внедрению центра инноваций социальной сферы и двух новых центров молодежного инновационного творчества по направлениям «Бионика и нейротехнологии», «Биомедицина».

В регионе реализуется проект «Формирование сервисной модели поддержки малого и среднего предпринимательства в Волгоградской области». Его первостепенной задачей является обеспечение производителя на каждом этапе развития производства теми инструментами поддержки, которые позволят бизнесу стать более конкурентоспособным и увеличить прибыль.

Разрабатываются государственные программы, выдвигающие основные направления по повышению уровня развития малого предпринимательства:

- успешно работает механизм «единого окна», обеспечивающий непрерывное взаимодействие государственных органов и бизнеса;
- оказывается финансовая поддержка в виде предоставления субсидий для предпринимательских субъектов, осуществляющим деятельность по приоритетным направлениям экономической деятельности на конкурсной основе;
- консультация по отдельным вопросам применения упрощенной системы налогообложения;
- рекомендации по применению упрощенной бухгалтерской отчетности;
- создание единой информационно-сервисной инфраструктуры поддержки малого и среднего предпринимательства, объединяющей существующие информационные ресурсы и услуги, обеспечивающей гибкий формат взаимодействия предпринимателей, государственных органов и местных органов власти, финансово – кредитных учреждений и институтов развития;
- предоставление различных услуг по обеспечению максимально благоприятных условий становления успешного развития бизнеса в регионе.

Все региональные проекты и государственные программы, проводимые в Волгоградской области, нацелены на устойчивое развитие малого предпринимательства. Следовательно, комплексная поддержка институтов развития бизнеса, создание новых инструментов поддержки, реализация региональных и национальных проектов во многом определяет эффективность развития малого предпринимательства.

В условиях современной рыночной экономики необходимо постоянно усиливать государственную поддержку, направленную на развитие малого предпринимательства путем создания конкурентной среды и благоприятного делового климата. Ведь именно этот сектор является одним из важнейших резервов роста как региональной, так и национальной экономики.

Список литературы

1. Секачева Т.В. Активизация деятельности малого предпринимательства как необходимое условие развития регионов. Вестник региональной экономики. – 2020. - №2 (43). - с. 144-166

СОВРЕМЕННАЯ БИЗНЕС-МОДЕЛЬ ПРЕДПРИНИМАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Секачева Т.В., Селиванов А.Ю.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В статье анализируется влияние информационных технологий и процессов глобализации на современную бизнес-модель предпринимательской деятельности. Дана характеристика классической и инновационной модели предпринимательства.

Abstract

The article analyzes the impact of information technologies and globalization processes on the modern business model of entrepreneurship. The characteristic of the classical and innovative models of entrepreneurship is given.

Ключевые слова: *предпринимательство, модель предпринимательской деятельности, индикатор деловой активности, инновационная модель*

Key words: *entrepreneurship, model of entrepreneurial activity, an indicator of business activity, innovative model*

Развитие информационных технологий и процесс глобализации изменили структуру рынка и оказали значительное влияние на эволюцию предпринимательства как экономического явления. Поменялся характер конкуренции, роль информации и знаний получила новое, более важное значение. В результате, современному предпринимателю не достаточно только учитывать риски, ему необходимо ими управлять. Предприниматель не может быть сторонним созерцателем рыночных отношений и процессов, ему необходимо активно реализовать свой творческий потенциал.

Для успешного развития и функционирования рыночной экономики в России необходима активизация предпринимательской деятельности. Сегодня предпринимательство является самонастраивающейся деятельностью и основным механизмом экономического и социального развития. Деятельность в этой области дает мощный стимул для повышения производительности и качества труда, получения доходов и удовлетворения потребностей общества. На данном этапе развития рыночных отношений предпринимательство является движущей силой экономики.

Современное российское предпринимательство представляет собой модель деловой активности, основанной на самостоятельности, инициативе и ответственности за все принятые решения. Безусловно, это реализация особых способностей личности, а также умелое и разумное сочетание факторов производства на основе инновационных методов.

Основная задача предпринимательской деятельности заключается не в адаптации к изменяющимся условиям, а в умении изменять сами экономические условия и правильно оценивать перспективы социального развития. В результате цели предпринимательской

деятельности трансформировались: от ориентации на «ближайшие» результаты — максимизацию прибыли – к обеспечению финансовой устойчивости предпринимательских организаций, что позволяет успешно сочетать дух рационализма, демократии и социального партнерства. Общепризнано, что реализация инвестиционного проекта включает в себя бизнес-модель, ориентированную на прибыль, увеличивающую общественное благо. Бизнес-модель – это своего рода способ, который компания использует для создания стоимости и получения прибыли.

Наиболее важными особенностями современного предпринимательства являются:

• экономическая самостоятельность и независимость хозяйствующих субъектов;

• экономический интерес;

• экономический (деловой) риск;

• персональная ответственность за результаты своей деятельности;

• мобильность и динамичность деловой активности.

Современное предпринимательство – это ключевой институт рыночного хозяйства. Поэтому, процветание рыночной экономики зависит от эффективной деятельности и существования класса предпринимателей.

Сегодня современная модель предпринимательской деятельности, выступающая в качестве экономической категории, стала особенно актуальной. В нынешних экономических условиях она влияет на социально-экономическое состояние страны и является двигателем позитивных изменений, обеспечивающих замещение импортной продукции, услуг на выпуск российских инновационных товаров, кроме того, это важный инструмент оптимизации структуры экономики.

Систематизация теоретико-экономических знаний позволяет выделить две основные концепции содержания предпринимательства:

- во-первых, бизнес-модель, отличительной особенностью, которой является получение максимальной отдачи от имеющихся ресурсов, называется классической;

- во-вторых, бизнес-модель, отличительной особенностью которой является поиск наиболее эффективных технологий переработки ресурсов, называется инновационной.

Мировой опыт показывает, что большинство развитых стран предпочитают инновационную модель предпринимательской деятельности. Именно она ориентирована на экономический рост, достижение устойчивого развития, стабильность. Активную роль в реализации этой модели играет государство, оказывая многофункциональную поддержку при разработке и реализации принципиально новых, коммерчески-рискованных, научно-технических и социально-экономических проектов.

Главной особенностью российского инновационного предпринимательства на современном этапе развития является возникновение рисков, связанных с этим видом деятельности, а также высокая стоимость технических или организационных решений.

В последние годы современным бизнес-моделям уделяется значительное внимание, им посвящены многие программы государственной поддержки, семинары и конференции, создание информационных баз данных, осуществление корректировок законодательства для эффективного развития данного сектора экономики. Непосредственный интерес к современной модели предпринимательства обусловлен тем, что она направлена на реализацию масштабной задачи – снижение уровня монополизации экономики.

Для государства и политиков современная модель предпринимательской деятельности очень важна, прежде всего, потому, что она во многом заменяет государство в решении сложных социально-экономических проблем «на местах». Кроме того, на современном этапе развития рыночной экономики преобладающая бизнес-модель обеспечивает создание новых рабочих мест, формирование среднего класса, что является одним из основных факторов долгосрочной стабильности в экономике, быстрого насыщения рынка потребительскими товарами и услугами. Непосредственно для

государства современная модель предпринимательства выступает существенным источником пополнения государственного бюджета. Именно поэтому, в 2018 году был разработан национальный проект «Малое и среднее предпринимательство и поддержка индивидуальной предпринимательской инициативы», направленный на создание благоприятной бизнес-среды, чтобы предприниматели могли работать самостоятельно и прибыльно, конкурировать с другими структурами, платить необходимые налоги в государственный бюджет, получать своевременную помощь от государственных организаций, не вмешиваясь во внутренние дела предприятия.

Государство оказывает существенную поддержку в осуществлении современной предпринимательской деятельности, которая выступает стимулом в развитии национальной экономики. Поэтому мы приходим к выводу, что современные бизнес-модели являются важным индикатором деловой и экономической среды страны. Развитие предпринимательства способствует повышению уровня экономической свободы и формированию гражданского общества.

Несмотря на все трудности, присущие современному периоду развития, бизнес-модель предпринимательской деятельности остается главной потенциальной «точкой роста» российской экономики. Умение соединять воедино все факторы производства, способность адаптироваться к рыночным изменениям и снижать затраты, а также высокая инновационная активность делают его незаменимым в социальном развитии и экономической динамике.

Список литературы

1. Карпушова С.Е., Секачева Т.В. Современный стратегический анализ (учебное пособие). Издательство Волгоградского государственного технического университета, ISBN978-5-9948-2751-2, 2018 г., 121 с.

АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ЭКОНОМИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ РЕГИОНОВ

Секачева Т.В., Родичева Н.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Достижение устойчивого развития нашего государства возможно только при условии сбалансированного развития его регионов. В статье рассмотрен цикл стратегического планирования экономического развития регионов, обеспечивающий взаимосвязь всех макросистем региона. Изучен механизм реализации Стратегии – 2025 в Волгоградской области.

Abstract

Achieving sustainable development of our state is possible only if its regions develop in a balanced way. The article considers the cycle of strategic planning of economic development of regions, which ensures the interconnection of all macro-systems in the region. The mechanism of Implementation of the strategy – 2025 in the Volgograd region was studied.

Ключевые слова: регион, стратегическое планирование, экономическое развитие, Волгоградская область.

Keywords: region, strategic planning, economic development, Volgograd region.

В настоящее время состояние экономики страны зависит от экономического благополучия каждого ее субъекта. Чтобы повысить эффективность хозяйственной деятельности в регионах Российской Федерации, необходимо знать уровень экономической и географической ситуации, уровень развития инфраструктуры и ресурсного обеспечения.

Социально-экономическое развитие региона является основной деятельностью региональных органов власти. Важнейшими характеристиками территории являются: плотность населения; уровень развития промышленности и сельского хозяйства; наличие природных ресурсов. Исторически сложилось, что российские регионы развиваются неоднородно. Поэтому, регулировать региональное развитие можно с помощью разработки стратегического плана, учитывающего взаимосвязь всех макросистем региона (рис.1). Основным направлением реализации стратегии является обеспечение устойчивого развития региона и создание условий, гарантирующих достойный уровень и качество жизни каждого человека.

Синхронизацию полномочий между муниципалитетами и региональными властями можно достичь в результате реализации полного цикла стратегического планирования экономического развития региона:

- постановка целей развития;
- анализ внешней среды региона;
- определение сильных и слабых сторон региона;
- использование существующих преимуществ и новых локальных преимуществ;
- разработка концепции регионального развития;
- разработка конкретных планов действий и стратегий их осуществления.
- анализ эффективности и результативности, согласование целей и путей их достижения.

Для обеспечения устойчивого экономического развития регионам необходимо научиться продавать свою продукцию и услуги в другие регионы. Увеличение гибкости и разнообразия форм экономической деятельности позволит стабильно развиваться потребительскому рынку в регионах. Кроме того, важнейшими современными факторами развития региона являются качественная коммуникационная инфраструктура, современные линии связи, локальные компьютерные сети и бесплатный доступ в интернет.

На данном этапе стратегического планирования социально-экономического развития региона мы будем рассматривать возможности максимизации сильных сторон региона, нейтрализации слабых или превращения их в преимущества. Стратегический план развития региона является основой для разработки программ социально-экономического развития. Такие программы разрабатываются для основных сфер человеческой деятельности с учетом рационального соотношения государственного регулирования и рыночных отношений.

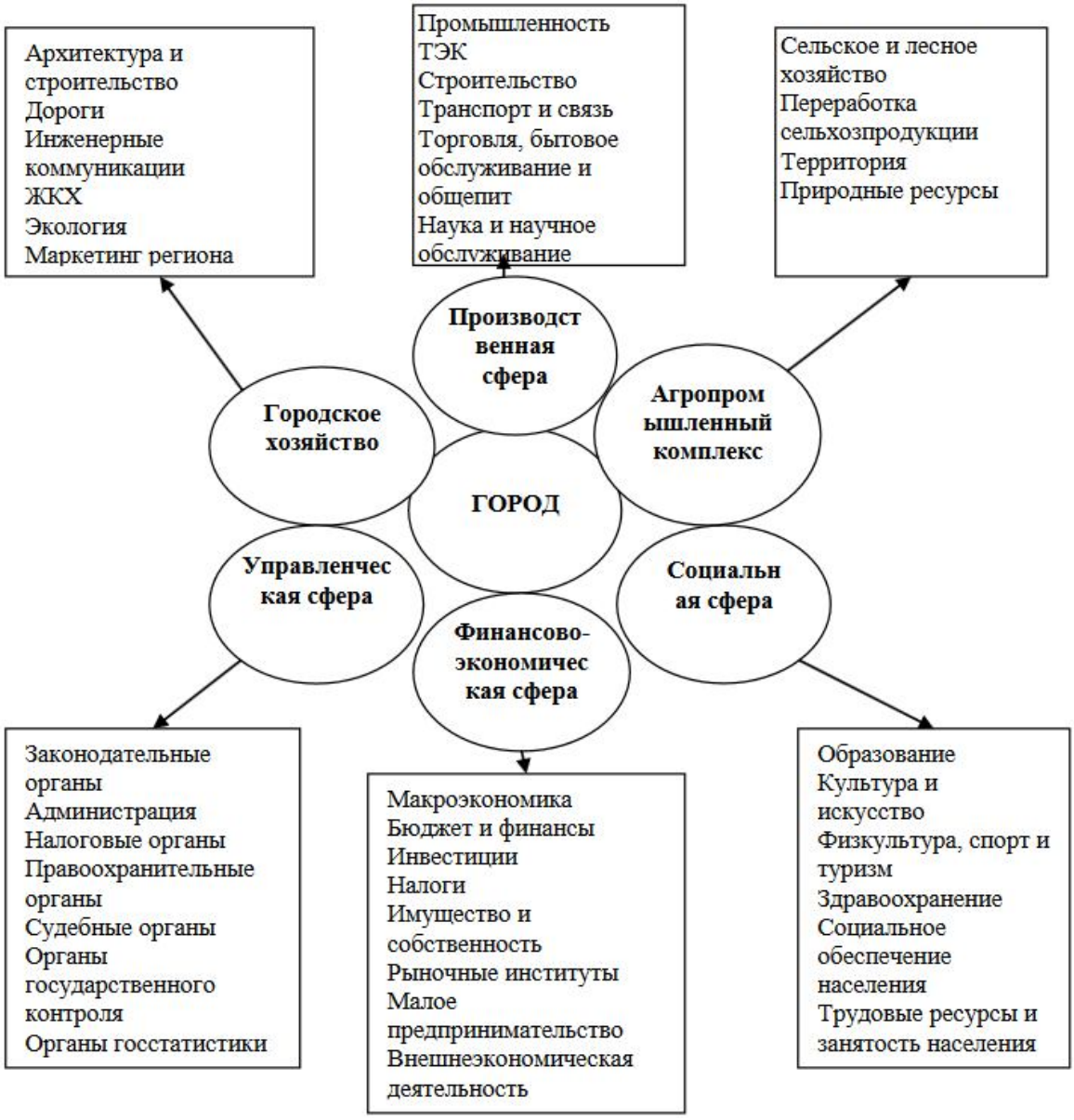

Рис1.Взаимосвязь макросистемы в регионе

В нашем регионе утверждена Стратегия социально-экономического развития Волгоградской области до 2025 года. Главной целью этого документа является определение приоритетов развития области до 2025 года:

1. улучшение демографической ситуации, а следовательно повышению рождаемости и снижению смертности;
2.повышение уровня жизни населения, увеличение доходов, развитие социальной инфраструктуры, улучшение здравоохранения, образования;
3. обеспечение доступным жильем;
4. развитие промышленных производств, агропромышленного и строительного комплексов;
5. расширение транспортной инфраструктуры;
6. обеспечение энергетической безопасности региона;

7. снижение уровня загрязнения окружающей среды и обеспечение экологической безопасности региона.

Комплексный характер Стратегии-2025 предусматривает мониторинг социально-экономического развития региона, позволяющий оценить эффективность проводимой региональной политики. При необходимости принимаются соответствующие корректировки и организационные меры.

По результатам проведенного исследования, можно сделать вывод, что для достижения поставленных стратегических целей, необходим переход региона на инновационный сценарий социально-экономического развития. Это будет способствовать ускоренному развитию высокотехнологичных отраслей, повышению инвестиционной привлекательности региона.

Список литературы

1. Забазнова Т.А., Ерохина Е.А., Секачева Т.В. Стратегия устойчивого развития регионов – Экономика и предпринимательство. 2017. № 4-2 (81-2). С. 1094-1100

АКЦИОНИРОВАНИЕ И ЕГО РОЛЬ В ИНВЕСТИЦИОННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПРЕДПРИЯТИЯ

Секачева Т.В., Землянская Е.В.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Инвестиционная деятельность связана с риском, поэтому важно тщательно выбирать форму инвестирования. В статье рассматривается один из методов инвестирования – акционирование.

Abstract

Investment activity involves risk, so it is important to carefully choose the form of investment. The article deals with one of the investment methods – corporatization.

Ключевые слова: *инвестиционная деятельность, риск, свободные финансовые ресурсы, эффективный инструмент.*

Keywords: *investment activity, risk, free financial resources, effective tool*

Актуальность темы состоит в том, что инвестиционная деятельность – это одна из важнейших составляющих деятельности предприятия, позволяющая наращивать объемы производства, обновлять имеющуюся материально-техническую базу, осваивать новые виды деятельности.

В современных условиях рыночной экономики имеется множество форм инвестирования. Перед предприятиями стоит сложный выбор. Они имеют ограниченные свободные финансовые ресурсы, которые доступны для инвестирования. Инвестиционная деятельность связана с риском, поэтому важен обдуманный подход при выборе форм инвестирования. Одним из методов инвестирования является акционирование.

Акционирование – это организационно-экономический и правовой механизм, используемый для объединения финансовых и имущественных активов физических и юридических лиц для создания и функционирования объектов деятельности, целью которых является получение максимального дохода, отвечающего интересам акционеров и устойчивого развития общества.

Акционирование активно используется для привлечения средств путем выпуска акций с целью увеличения капитала. При этом, если прежние акционеры отказываются покупать дополнительные акции, то выпущенные акции предлагаются новым владельцам. Средства, полученные от продажи, должны быть инвестированы таким образом, чтобы дивиденд на одну акцию был не ниже прежнего.

Еще одним способом увеличения собственного капитала является капитализация части нераспределенной прибыли. В этом случае, определенную долю нераспределенной прибыли, не выплачивают владельцам обыкновенных акций в виде дивидендов, а осуществляет инвестирование в акции, ожидая в будущем рост их рыночной стоимости и как следствие – получение ими повышенного дохода. Это более дешевый и простой способ увеличить капитал.

Со стороны эмитента акционирование – это удобный источник получения капитала. Он применим к любой сфере коммерческой деятельности, и представляет для эмитента меньший риск. Акционирование ускоряет мобилизацию ресурсов для капиталовложений. Однако эмиссия акций имеет ряд рисков и недостатков:

- эмиссия и размещение акций связаны с затратами;
- чрезмерная эмиссия акций увеличивает риск их не реализовать, затрудняет управление, может нарушить структуру уставного капитала и привести к распылению акций и потери контроля;
- дополнительная эмиссия может привести к снижению спроса на размещенные акции, что влияет на капитализацию акционерного общества;
- завышенный номинал уменьшает число потенциальных инвесторов, и, наоборот, заниженный номинал приводит к необоснованному росту издержек эмиссии и нежелательному распылению капитала;

- риск потери курсовой стоимости акций и, как следствие, снижения потенциальных доходов акционеров.

К достоинствам акционерного финансирования можно отнести:

- альтернатива кредитному финансированию;
- выплаты за пользование инвестиционными ресурсами зависят от прибыли общества (кроме эмиссии привилегированных акций);
- использование инвестиционных ресурсов не ограничено сроками.

Таким образом, можно сделать вывод, что акционирование рассматривается как метод инвестирования. Эмиссия акций может выступать в качестве эффективного инструмента финансирования крупных инвестиционных проектов предприятий.

Список литературы

1. Федеральный закон от 25.02.1999 N 39-ФЗ «Об инвестиционной деятельности в Российской Федерации, осуществляемой в форме капитальных вложений» / Собрание законодательства РФ, 01.03.1999, № 9, ст. 1096
2. Федеральный закон от 26.12.1995 N 208-ФЗ «Об акционерных обществах» / Собрание законодательства РФ, 01.01.1996, № 1, ст. 1

РЕГИОНАЛЬНЫЙ МАРКЕТИНГ

Рыжова О.А.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В настоящей работе изучены возможности разработки конкурентной политик областей, политики рыночной деятельности.

Ключевые слова: региональный маркетинг, бенчмаркетпнг, конкуренция, стратегия маркетинга.

Основным методом политики регионов в странах, собравших огромный опыт в этой сфере является региональный маркетинг. Регионы при этом следует определять как своеобразные корпорации, конкурирующие за ресурсы и потребителей. Следовательно, целесообразно выразиться о том, что появилась необходимость формирования конкурентной политики регионов, политики рыночной деятельности. В данном случае, целесообразно говорить о маркетинге регионов как главной части политики регионов России.

Маркетинг Волгоградской области вместе с существующими подходами следует определить как вариант установления, создания, поддержания таких отношений с разнообразными субъектами рынка, которые способствуют установлению выгодных

позиции регионов и помогают достичь ими полного удовлетворения целей участников этих отношений. Можно сказать, что маркетинг области ориентирован на определение потребностей контрагентов региона, объединение этих интересов с интересами всей области и получении с помощью этого конкурентных преимуществ и повышение социально-экономических показателей Волгоградской области.

Определим основные целей регионального маркетинга:

Все участники регионального маркетинга обязаны достичь этих целей, являющихся выгодами для каждого региона.

Соответственно, разработка стратегии маркетинга региона должна включать:

Маркетинговые стратегии индивидуальны для всех регионов, но в них должны присутствовать обязательные разделы:

Существуют следующие методы регионального маркетинга:

М е т о д ы:

1. Метод создания инновационного парка или промышленного парка.	*2. Дифференцированный маркетинг.*	*3. Кластерный метод.*	*4. Метод, стимулирующий миграцию регионов*	*5. Активное привлечения туристов в область или город.*	*6. Маркетинг, ориентированный на экологические проблемы области.*	*7. Региональный бенчмаркетинг.*	*8. Метод привлечения сотрудничающих организаций.*

Рассмотрим подробнее каждый метод.

1. *Метод создания инновационного парка или промышленного парка.* Его сущность в том, что необходимо создать производственные и информационные инфраструктуры в месте, специально выбранном, чтобы привлечь инвесторов со стороны. Существующий метод позволяет решить следующее: для предприятий – экономия на накладных издержках при создании инфраструктуры, а для областей – увеличение занятости, борьба с безработицей, подъем доходов населения, процветание и развитие бизнеса.

2. *Дифференцированный маркетинг*. Существующий метод является универсальным и доступным. С его помощью области решают задачи, как привлечения производства, так и его выталкивания (демаркетинг).

3. *Кластерный метод*. Самый трудный метод, которому предшествовало формирование промышленных комплексов. Сущность его в том, что необходимо

разработать и выполнить план повсеместного размещения предприятий на выбранной территории, изучив ее ресурсы и возможности.

4. *Метод, стимулирующий миграцию регионов*. В данный момент, в части стран сохранилась преобладание национальных меньшинств, что способствует сепаратизму. Поэтому необходимо привлечь представителей национальности данной страны, где существуют зачатки сепаратизма.

5. *Активное привлечения туристов в область или город*. Этого можно добиться с помощь проведения международных спортивных, культурных, политических мероприятий с привлечением местной власти и предприятий.

6. *Маркетинг, ориентированный на экологические проблемы области*. В данном случае, необходимо изучить природную среду региона и сохранить ее в первозданном виде.

7. *Региональный бенчмаркетинг*. Этот метод поиска лучших образцов работы органов власти и способов сотрудничества власти и населения в других регионах страны и за рубежом. Применение данного метода позволяет сотрудничать внутри региона и между регионами.

8. *Метод привлечения сотрудничающих организаций* с помощью привлечения предприятий для решения местных проблем.

В результате можно сказать, что маркетинговый подход к развитию области или города способствует выявления уникальности, является вариантом реализации конкурентной политики. Маркетинг региона способствует кардинальному изменению его имиджа.

Список литературы

1. Маркетинг: общий курс: учеб.пособие для студентов вузов, обучающихся по направлению «Экономика» / под ред. Н.Я. Калюжновой, А.Я. Якобсона. – 4-е изд., стер. – М.: Издательство «Омега –Л» , 2018. – 476с.: ил., табл. – (Высшее экономическое образование).

ПОНЯТИЕ И СУЩНОСТЬ ИНВЕСТИЦИОННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПРЕДПРИЯТИЯ

[1] Секачева Т.В., [1] Землянская Е.В., [2] Забазнова А.Ф.

[1] Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
[2] Северо-Западный институт управления РАНХиГС, Санкт-Петербург

Аннотация

В статье даны основные характеристики инвестиций и инвестиционной деятельности. Рассмотрены внешние и внутренние источники финансирования инвестиций.

Abstract

The article presents the main characteristics of investments and investment activities. External and internal sources of investment financing are considered.

Ключевые слова: *инвестиции, инвестиционная деятельность, риск, конкурентоспособность*

Keywords: *investment, investment activity, risk, competitiveness*

В Федеральном законе от 25.02.1999 N 39-ФЗ «Об инвестиционной деятельности в Российской Федерации, осуществляемой в форме капитальных вложений» под инвестиционной деятельностью понимается вложение инвестиций и осуществление практических действий в целях получения прибыли и (или) достижения иного полезного эффекта. В этом же законе даётся определение инвестициям. Инвестиции – это денежные средства, ценные бумаги, иное имущество, в том числе имущественные права, иные права, имеющие денежную оценку, вкладываемые в объекты предпринимательской и (или) иной деятельности в целях получения прибыли и (или) достижения иного полезного эффекта [1]. Поэтому, инвестиции очень важны для развития и эффективной работы предприятия. Они выступают главным инструментом реализации инновационной политики и условием роста стоимости предприятия.

В качестве индивидуальных инвесторов могут выступать как физические, так и юридические лица, уполномоченные органы государственной власти, а также нерезиденты страны. Источниками инвестиций служат разнообразные активы (финансовые, материальные, нематериальные). В основном источниками инвестиций выступают свободные или заёмные денежные средства. Источники финансирования инвестиций принято подразделять на внутренние (собственные) и внешние (заёмные) источники (рис.1).

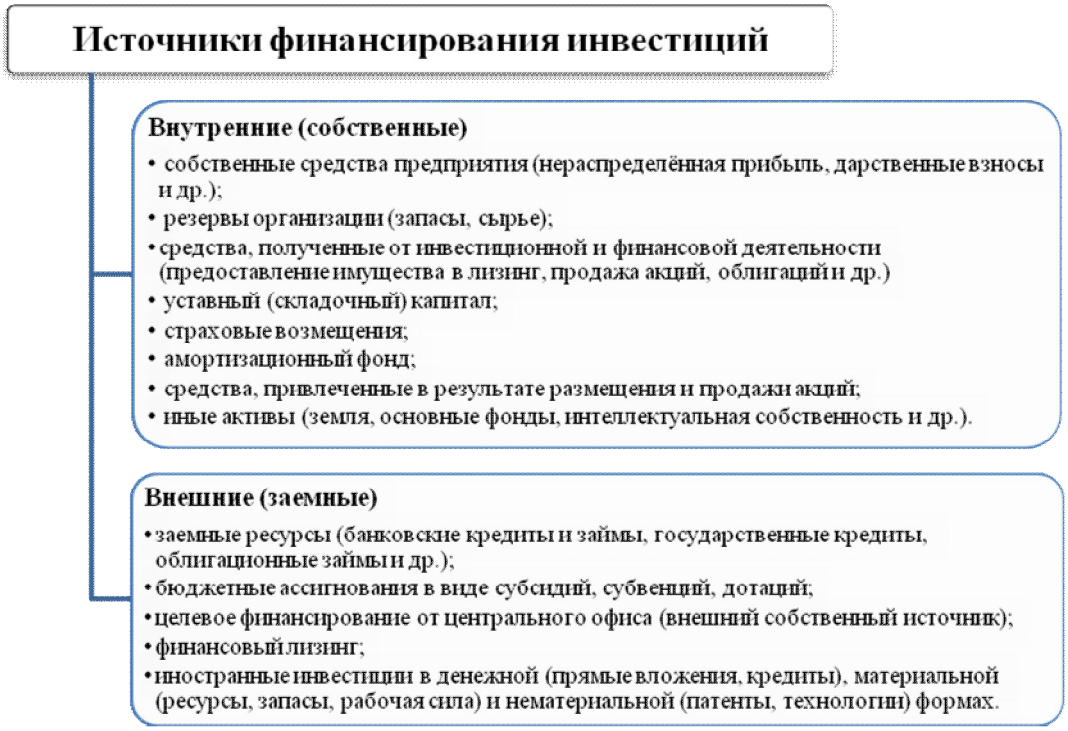

Рис. 1 Внутренние и внешние источники финансирования инвестиций

В базовой классификации инвестиции по объектам вложения подразделяют на реальные (капиталообразующие) и финансовые. Реальные инвестиции — это материальные и нематериальные вложения непосредственно в воспроизводство, создание и приобретение основных фондов, патентов, торговых знаков и т.п. Финансовые инвестиции связаны с приобретением различных финансовых инструментов (активов), формированием инвестиционного портфеля, кредитованием, предоставлением услуг по лизингу.

Инвестиционная деятельность направлена на формирование и привлечение капитала, поиск эффективных методов хозяйствования, отыскание объектов, финансирование которых позволит получить значимую финансовую отдачу. С её помощью предприятия имеют возможность расширить свой экономический потенциал. Инвестиционная деятельность предприятия представляет собой процесс изыскания инвестиционных возможностей и ресурсов, выбора и обоснования наиболее эффективных направлений инвестирования, формирования инвестиционной стратегии, разработки инвестиционной программы и обеспечения ее реализации. Она осуществляется в соответствии с разработанной инвестиционной политикой. Инвестиционная политика — это модель принятия решений и совокупность действий, обеспечивающих выбор и реализацию наиболее эффективных форм инвестиций.

Важно понимать, что инвестиционная деятельность носит долгосрочный характер. Между расходованием средств и получением прибыли проходит большой промежуток времени. Поэтому в этот период инвестиционные средства высвобождаются из оборота компании, что необходимо учитывать перед инвестированием.

Важно понимать, что инвестиционная деятельность носит долгосрочный характер. Между затратами и получением прибыли проходит длительный промежуток времени. Следовательно, в этот период инвестированные средства высвобождаются из оборота предприятия, что необходимо учитывать, перед тем как вложиться. Кроме того, инвестиционной деятельности присущи высокие риски (нестабильность законодательства, экономической и политической ситуации; колебания рыночной конъюнктуры, валютных курсов, цен; производственно-технологические изменения и др.). Инвестиционный риск — это существующая вероятность частичной или полной утраты собственных вложений. Зачастую высокие риски сопряжены с высокодоходными инвестиционными инструментами. Чем ниже риски, тем меньше отдача от вложений.

Таким образом, инвестиционная деятельность является одним из важных аспектов функционирования предприятия. Эффективные инвестиции позволяют формировать капитал, обновлять материально-техническую базу, осваивать новые виды деятельности, наращивать объемы производства, расширять и развивать хозяйствующий субъект.

Список литературы

1. Федеральный закон от 25.02.1999 N 39-ФЗ «Об инвестиционной деятельности в Российской Федерации, осуществляемой в форме капитальных вложений» / Собрание законодательства РФ, 01.03.1999, № 9, ст. 1096

ОСОБЕННОСТИ ЦИФРОВИЗАЦИИ РОССИЙСКОЙ ЭКОНОМИКИ

[1] Секачева Т.В., [1] Попова И.И. [2] Забазнова А.Ф.

[1] Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
[2] Северо-Западный институт управления РАНХиГС, Санкт-Петербург

Аннотация

В статье анализируется влияние цифровых технологий на современное состояние российской экономики. Сформулированы задачи и рекомендации развития цифровой экономики в России.

Abstract

The article analyzes the impact of digital technologies on the current state of the Russian economy. Tasks and recommendations for the development of the digital economy in Russia are formulated.

Ключевые слова: *цифровизация; трансформация; экономический рост*
Keywords: *digitalization; transformation; economic growth.*

Основной чертой последней технологической революции во главе с цифровыми технологиями является модифицирование в методах производства по всему миру, что вносит глубокие изменения в глобальную структуру как мирового производства, так и инвестиций, торговли. Хотя, это изменения все еще находится на первоначальном этапе развития и несут в себе большую неопределенность, человечество активно использует цифровые возможности.

Цифровизация экономики определяется как создание информационных и цифровых платформ на всех уровнях экономики для решения экономических задач. Цифровизация сопровождается изменениями в бизнес-процессах: от потребительских роботов до производства встраиваемых цифровых технологических продуктов.

Поскольку цифровые технологии стали реальностью нашей жизни, предприятия мотивированы применять цифровые сети и перестраивать инфраструктуру производственной деятельности, распределяя ресурсы вокруг новых факторов. Поэтому происходит сдвиг в методах производства в сторону инноваций. Кроме того, спрос на рынке стимулируется с помощью внедрения Интернета и искусственного интеллекта.

Цифровая трансформация компаний будет способствовать повышению конкурентоспособности нашей страны. В настоящее время цифровая революция оказывает глубокое влияние и преобразует не только экономическую форму общества, но и образ жизни людей. Сейчас существуют умные отрасли, которые улучшают производительность различных производств.

Россия, с помощью цифровизации, выходит на новый экономический уровень. Стремительное развитие Интернета привело к быстрому росту влияния инноваций на экономику. Мобильность инновационных ресурсов повысилась, а, следовательно, появилась возможность их использования в глобальных масштабах.

Современную российскую экономику можно охарактеризовать глобализацией рынков, наличием конкуренции, применением и изменением деловой практики. Новая технологическая революция требует качественных изменений в экономической сфере, и в то же время создает повышенный спрос на высококвалифицированную рабочую силу. Кроме того, цифровизация коснулась и управленческих процессов. Одним из главных современных требований к административно-управленческому персоналу, является формирование цифровых компетенций, позволяющих получать и аккумулировать, анализировать и использовать данные. Все перечисленное позволит российским предприятиям следовать стратегии инновационного развития.

Рассмотрим задачи экономической политики России на 2018-2024 годы, в том числе, связанные с развитием цифровой экономики:

1) создание правовой инфраструктуры;

2) необходима разработка образовательных программ по переквалификации кадров для овладения цифровыми технологиями;

3) развитие системы механизмов выбора перспективных направлений исследований в области цифровых технологий;

4) разработка системы безопасности в информационной структуре.

Для развития цифровизации российской экономики созданы определенные рекомендации:

1) развитие цифровой культуры в стране;

2) государственное финансирование в обучении населения цифровым навыкам;

3) создания высокоэффективных секторов экономики за счет внедрения цифровых технологий, таких как цифровые платформы, 3D-печать, 5D-печать робототехника, искусственный интеллект, нейронные сети, блокчейн для повышения конкурентоспособности.

Таким образом, потенциал цифровых технологий в России в настоящее время существует и развивается, хотя очень сильно недооценивается. Бизнес-процессы, которые появляются в современном мире, требуют постоянного обновления всех процессов экономики в цифровой форме. Цифровизация экономики в России развивается довольно быстрыми темпами, но все еще существует значительное отставание от цифровых лидеров, особенно таких, как Япония. США, страны ЕС. Эта тенденция, вероятно, прослеживается из-за недостаточного финансирования государством мероприятий цифровой экономики.

Цифровизация экономики неизбежно ведет к трансформации всего общества: здоровой конкуренции, появлению новых подходов к бизнес-проектам. Она напрямую влияет на экономический рост, и является той «точкой роста», тем новым ресурсом, который сможет перестроить российскую экономику.

Список литературы

1.Авдеева И.Л. Анализ перспектив развития цифровой экономики в России и за рубежом//Цифровая экономика и «Индустрия 4.0»: проблемы и перспективы: труды научно-практической конференции с международным участием. Санкт-Петербург, 2017. С.19-25.

СТРАТЕГИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ МАЛЫХ ГОРОДОВ

Токарева О.Б., Барышникова Н.Б.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В данной статье представлена разработка стратегических направлений развития малых городов России для усиления конкуренции и обеспечения стабильности социально-экономической ситуации в регионе.

Abstract

This article presents the development of strategic directions for the development of small cities in Russia to strengthen competition and ensure the stability of the socio-economic situation in the region.

***Ключевые слова**: малые города, стратегическое управление, миссия города, приоритетные направления деятельности.*

***Keywords**: small towns, strategic management, city mission, priority areas of activity.*

По нашему мнению, одним из главных условий достижения важных целей малых городов является разработка стратегии обеспечения их безопасности. Стратегическое управление малым городом включает: анализ внутренней и внешней среды, а также формулирование миссии, определение главных целей, разработку стратегий и стратегического плана развития города.

Анализ внутренней и внешней среды даёт большой объём самой различной информации, из которой пока можно использовать только небольшую часть. Это происходит, главным образом, потому, что миссия и цели города чаще всего понимаются «как само собой разумеющееся» и подразумеваются на «интуитивном уровне», но не имеют чёткой формулировки и не известны населению.

В процессе анализа особенно необходимо изучить угрозы и возможности, которые необходимо использовать. Среди внутренних факторов следует изучить сильные и слабые стороны города. Чтобы разработать хороший план стратегического развития города, необходимо четко сформулировать его миссию. Миссия города – это утверждение о том, для чего данный город существует, в чем смысл его существования. Она позволяет выработать критерии оценки степени достижения поставленных целей, согласовать интересы всех жителей города, сформировать смысл и содержание их деятельности, а также чувство принадлежности к достижениям или неудачам. Итак, в первую очередь необходимо увеличить инвестиционный и потребительский спрос, а также развивать рыночно- ориентированные отрасли. [1]

Для малых городов наиболее предпочтительной может быть следующая формулировка миссии: «Обеспечить более высокое, по сравнению с большими городами, качество жизни жителей». Содержание понятия «качества жизни» должно включать следующие факторы: более высокий, чем в крупных городах, уровень заработной платы; обеспеченность жильём по нормам более высоким, чем в крупных городах; обеспечение возможности получать образование, включая высшее, не выезжая за пределы города; обеспечение работой, в которой можно реализовать свои способности и возможности, обеспечение другими социальными благами и т.п. Одним из наиболее важных факторов качества жизни является высокий уровень безопасности жителей. При этом следует понимать безопасность не только от аварий, катастроф, стихийных бедствий, но и от политических, экономических, социальных и других факторов. Чётко сформулированная миссия позволит выбрать цели развития города.

Наиболее важными из них являются следующие: социальные, рыночные, производственные, организационные, финансовые и вопросы безопасности. Формулируя цели, вы должны обращать внимание на их согласованность, взаимозависимость и взаимозависимость. Иерархия выбранных целей также должна быть особенно важной. Процесс формулирования городских целей может осуществляться в следующие этапы.

1.Выявить и проанализировать тенденции развития внешней среды. Администрация города должна научиться прогнозировать тенденции развития внешней среды, определять вероятность политических, экономических, социальных, природных и

техногенных кризисов и чрезвычайных ситуаций, формулировать цели в соответствии с этими прогнозами.

2.Определить возможности, которыми располагает город, и спрогнозировать его развитие. Определите место города в развитии региона, промышленности и экономики страны.

3.Сформировать миссию города в максимально расширенной и престижной трактовке, в которой интересы жителей и их качество жизни должны стоять на первом месте. Таковы должны быть предлагаемые критерии достижения этой главной цели.

4. Выстроить иерархию целей на всех уровнях управления городом.

5.Сформулировать цели каждой организации, учреждения и предприятия, которые должны поддерживать систему целей города.

6. Формулировать индивидуальные цели руководителей и сотрудников всех уровней, указывая каждому свое место и вклад в общее дело. Как только цели сформулированы, необходимо разработать и принять соответствующую стратегию.

Под стратегией развития города в данном случае понимается детальный комплексный план приоритетных направлений деятельности и развития всех предприятий, организаций, учреждений, предназначенный для достижения всех основных целей города. Описанный по этапам процесс достижения главной цели развития не может быть достигнут лишь по желанию или постановлению руководства администрации города. Здесь должна быть развёрнута большая пропагандистская, организаторская и управленческая работа. Значительная роль в этом принадлежит администрации города, которая должна создать команду для организации разработки стратегических направлений развития города и осуществления координации развития каждой его организации.

Список литературы

1. *Токарева О.Б., Барышникова Н.Б.* СТРАТЕГИЧЕСКОЕ РАЗВИТИЕ МАЛЫХ ГОРОДОВ – МАРКЕТИНГОВЫЙ ПОДХОД. Инновационное развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». Волгоград, 2020. С. 252-253

SEBRYAKOVSKY QUARRY – ONE OF THE LARGEST TECHNOGENIC LANDFORMS OF THE VOLGOGRAD REGION

Liberovskaya A. N., Gurina O. A., Kosov D. A.

Sebryakovsky Branch of the Volgograd State Technical University

Аннотация

Рассмотрено значение для экономики города и региона, а также перспективы развития ОАО «Себряковцемент», работа которого основана на Себряковском месторождении мела и глины.

Annotation

The importance for the economy of the city and the region, as well as the prospects for the development of JSC “Sebryakovcement”, which is based on the Sebryakovsky Deposit of chalk and clay, is considered.

Ключевые слова. Себряковское месторождение мела и глины, среднегодовой объем добычи цементного сырья.

Keyword. Sebryakovsky Deposit of chalk and clay, the average annual production of cement raw materials.

In order to restore the ruined hero city of Stalingrad, the construction of the Volgo-Don shipping channel, the cascade of hydroelectric power plants on the Volga, for example, Volga, Kuibyshev, and other important construction sites of our country and the development of industry in our region in March 1948, the Council of Ministers of the USSR adopted a resolution on the construction of a cement plant in Mikhailovka, Stalingrad Region, which later became one of the largest cement plants in the country. In 1949, the construction of the Sebryakovsky cement plant began. This day is considered to be the birth day of the Sebryakovsky cement plant. The plant was built in 1953, and in 2023 will celebrate its 70 the anniversary.

OAO «Sebryakovcement» is acity-forming enterprise of Mikhailovka (57447 people as of 01.01.2020), which within the administrative-territorial structure is a city of regional importance and the center of the Mikhailovka district of Volgograd region.

OAO «Sebryakovcement» is currently one of the largest cement producers in Russia (about 6% of the total amount of cement produced in our country).

The cement plant uses cement raw materials (chalk, clay) of the Sebryakovsky field in production, and the extraction of chalk and clay is made in a quarry area of about 7 km^2.

Within our region there are 111 deposits of solid minerals, which are open mining of building materials, for example, limestone, chalk, gaize, construction sand, construction and molding clay, etc.

The total production of solid minerals in our region is about 10 million tons per year. The annual performance of the quarry on chalk and clay exceeds 5 million tons.

The importance of the Sebryakovsky production field for the Volgograd region is huge: more than 90% of all the reserves of cement raw materials in the region is concentrated here.

The Sebryakovsky quarry is the largest man-made form of relief in Volgograd region. It is located on the right bank of the Medvedica river, 3.5 km north of the Sebryakovo railway station at the western end of the Dono-Medvedica shaft [8; 10; 11].

For almost 70 years of operation the Sebryakovsky quarry has become one of the largest man-made forms of relief in the region, the area of which reaches 6.5 km^2, the depth – up to 60 m., along with the dissected – up to 100 m. The geological structure of this production field involves quaternary, neogenary and upper sediments [5; 6; 7; 8].

In August 2006, the project for further development of the Sebryakovsky field was approved, providing for the expansion of the quarry boundaries in the north direction by 250 meters by 2025 and 400 meters in the west. Together with the «Uralgiproruda» institute, a program for further development of the field has been developed: the production capacity for chalk production will be 5 million tons per year, clay – 1.2 million tons per year.

In the quarry there are 4 stages, up to 12 m. high each, on which railway tracks are laid.

Cement raw materials are multi-component, so the quarry is divided into three sites: Northern (clay mining), Western and Southern (mining of chalk), in the eastern part of the quarry – the only deposit of hard clays in the region (ceramic products production); in the south-west part of the quarry is the storage of the upper fertile layer.

The power of the open rocks is variable (up to 33 m), chalk sediments – up to 50 m, clay – up to 35 m. Natural humidity of chalk – 23%, clay – 17%.

In its central part of the quarry can be considered developed, but the underlying rock on the day surface is not visible. According to its external characteristics: the walls of the quarry – slope to 900, developed scree, cracked, developed landslide processes, the bottom of the quarry – overgrown with grassy vegetation, small shrubs, also in the process of chalk extraction, at the opening of aquifers, formed two ponds – by the cut of water which (54 m) can be judged on the position of the soles of the chalk.

The average annual production volume (according to the mining plant management) in 2001 was: chalk – 3350 thousand tons, clay – 870 thousand tons. According to the project, the production capacity of the quarry for chalk production by 2025 will be 5 million tons per year, clay – 1.2 million tons [2; 3; 4].

Thus, the production volumes of all raw materials will only increase, especially given the increasing demand in the construction industry not only of our region, but the Southern Federal District, where the share of the production of the "Sebriakovcement" plant in the commodity market of building materials is up to 70% [1].

Список литературы

1. Брылев В. А., Дьяченко Н. П., Пряхин С. И., Серегина Н. М. Крупнейшие карьеры Волгоградской области и их геоэкологическое состояние // Известия Волгоградского государственного педагогического университета. 2007. № 6 (24). С. 69-75.

2. Князев А.П. ОАО «Себряковцемент» и его влияние на экономику и экологию г. Михайловка // В сборнике: Энерго- и ресурсосбережение в строительной индустрии. Организационно-экономические и социальные проблемы хозяйствования в строительстве. 2010.

3. Князев А.П. Техногенные ландшафты и техногенные воздействия (на примере карьерно-отвального типа) // В сборнике: Энерго- и ресурсосбережение в строительной индустрии. Организационно-экономические и социальные проблемы хозяйствования в строительстве. 2010.

4. Князев А.П. Экология малых городов (на примере г. Михайловка) // В сборнике: Социально-экономические и технологические проблемы развития строительного комплекса региона. Наука. Практика. Образование. 2008.

5. Князев А.П., Агафонов С.Г., Карпилович Л.И. Литогенная основа и рельеф южной части Окско-Донской равнины // В сборнике: Инновационное развитие строительства Волгоградской области. 2013.

6. Князев А.П., Крапчетова Т.В.Геологическое строение и гидрогео-логические условия объекта строительства ОАО «Себряковцемент» // Цифровая наука. 2020. № 8.

7. Князев А.П., Пристансков А.А. Инженерно-геологический обзор южной части Окско-Донской равнины // В сборнике: Инновационное развитие строительного комплекса региона: задачи, состояние, перспективы. Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». Редколлегия: С.Е. Карпушова (отв. Ред.) [и др.]. Волгоград, 2020.

8. Князев Ю.П., Князев А.П. Геоэкологическая характеристика карьерно-отвальных комплексов г. Михайловки // В книге: XI Региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. Тезисы докладов. 2007.

9. Пристансков А.А., Лепилина В.А., Князев А.П. Гидрологическая характеристика северо-западной части Волгоградской области // В сборнике: Инновационное развитие строительства Волгоградской области. 2013.

10. Рогачев С.П. ОАО «Себряковцемент» одно из ведущих предприятий промышленности стройматериалов // Журнал «Горная Промышленность» №5 (67) 2006
11. KnyazevA.P., AgafonovS.G., KnyazevaG.N., NevolinaG.L., LikhachevV.N. Problems of protection of historical industrial landscapes // Всборнике: Материалы III Всероссийской научно-технической интернет-конференции СФ ВолгГАСУ. 2016.

КОМПЛЕКСНАЯ МЕТОДИКА ОЦЕНКИ УРОВНЯ ЦИФРОВИЗАЦИИ ОРГАНИЗАЦИЙ

Ерохина Е.А., Щукина Н.В.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Цифровая трансформация меняет традиционные бизнес-модели организаций, позволяя им занимать выгодные ниши на мировых рынках, повышая престижность бизнеса и государства в целом. В современных условиях уровень цифровизации иллюстрирует степень конкурентоспособности компаний и является определяющим при разработке стратегии развития. Поэтому для любого бизнеса становится стратегически важным инвестировать в свои цифровые активы и регулярно диагностировать уровень собственной цифровизации. В статье представлен подход к оценке уровня цифровизации организаций в условиях глубокого проникновения цифровых технологий в материальный сектор экономики. Разработанная пошаговая методика позволяет оценить степень использования систем решений на основе современных информационно-коммуникационных технологий при осуществлении различных бизнес-процессов организаций и определить уровень их цифровизации.

Abstract

Digital transformation changes traditional business models of organizations, allowing them to occupy profitable niches in world markets, increasing the prestige of business and the state as a whole. In modern conditions, the level of digitalization illustrates the degree of competitiveness of companies and is crucial when developing a development strategy. Therefore, it becomes strategically important for any business to invest in its digital assets and regularly diagnose the level of its own digitalization. The article presents an approach to assessing the level of digitalization of organizations in the conditions of deep penetration of digital technologies in the material sector of the economy. The developed step-by-step method allows you to assess the degree of use of decision systems based on modern information and communication technologies in the implementation of various business processes of organizations and determine the level of their digitalization.

Ключевые слова: цифровая экономика, цифровая трансформация, цифровизация организаций, уровень цифровизации организаций, методика оценки уровня цифровизации.

Keywords: digital economy, digital transformation, digitalization of organizations, level of digitalization of organizations, methodology for assessing the level of digitalization.

Цифровизация как процесс лежит в основе цифровой экономики. И первичной в этом словосочетании является экономика [2], так как именно благоприятная экономическая среда позволяет с успехом внедрять и использовать цифровые технологии.

Цифровизация делаетвозможным использование новейших технологий для лучшего и более быстрого выполнения операций, а также позволяет использовать технологии для деятельности, которая в прошлом была невозможна [7] . По прогнозам ведущих специалистов в области цифровизации, цифровая трансформация в ближайшие несколько лет затронет четверть мировой экономики. Основной задачей цифровизации выступает повышение эффективности деятельности стран, индустрий, предприятий [5]. Управление цифровой трансформацией – сложный процесс, необходимым условием успешности которого является наличие четкой стратегии цифровой трансформации. Такая стратегия призвана задать направление преобразований, определяющее ассортиментный портфель организаций, взаимодействие с контрагентами по всей цепочке создания ценности и выявить необходимые для этого информационные технологии. В соответствии со сформированной стратегией определяется целевой уровень цифровой зрелости организации, который необходим для ее успешной реализации. Для преодоления несоответствия между текущим и целевым уровнями цифровой зрелости организации разрабатывается дорожная карта цифровой трансформации, в соответствии с которой формируется портфель проектов, обеспечивающий сбалансированность технологических и нетехнологических инноваций и достижение стратегических целей компании [3; 4].

Кроме того, цифровая трансформация меняет традиционные бизнес-модели организаций, позволяя им занимать выгодные ниши на мировых рынках, повышая престижность бизнеса и государства в целом. В современных условиях уровень цифровизации иллюстрирует степень конкурентоспособности компаний и является определяющим при разработке стратегии развития. Поэтому важно инвестировать в цифровые активы организации и регулярно диагностировать уровень его цифровизации.

Степень цифровизации можно рассматривать на национальном [5], региональном, отраслевом и организационном уровнях (рис. 1).

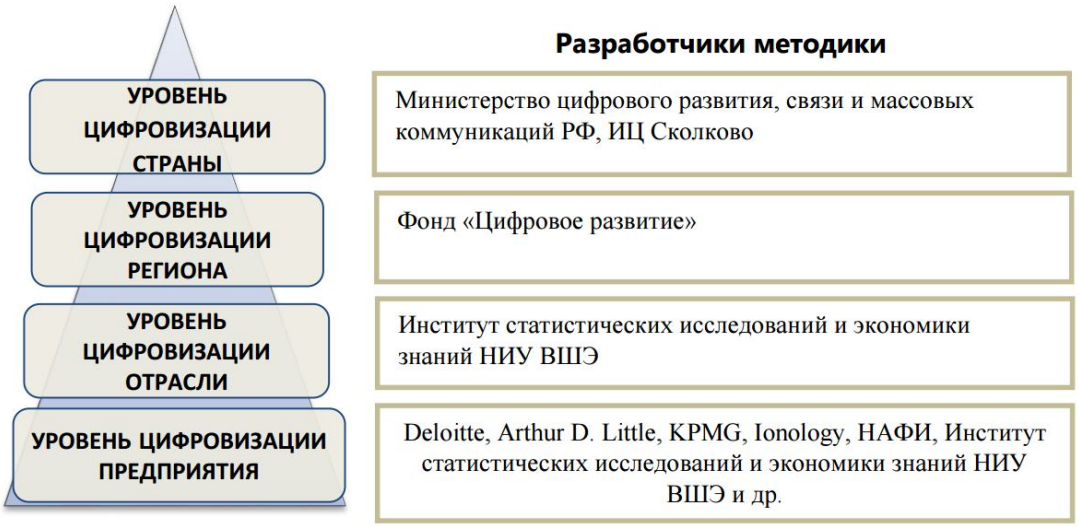

Рисунок 1. Уровни цифровизации социально-экономических систем

На сегодняшний день отечественными и зарубежными учеными предложено множество методик для определения уровня цифровизации. Большинство методик

основаны на анализе статистических данных, связанных с оценкой уровня информатизации, автоматизации и цифровой зрелости, а статистика не всегда точна, и многие ученые соглашаются, что основная проблема – сбор правдоподобных данных [6]. В последние два года предложено множество методик оценки уровня цифровизации исключительно предприятий (табл. 1), отличие которых заключается в наборе групп показателей, формировании оценки (либо простая сумма баллов, либо выделение оценочных уровней), способах проведения оценки (самооценка, экспертное оценивание, сравнительная оценка). Согласно программе «Цифровая экономика Российской Федерации» [4], утвержденной распоряжением Правительства РФ № 1632-р 27 июля 2017 г., основными сквозными цифровыми технологиями являются: большие данные, нейротехнологии и искусственный интеллект, системы распределенного реестра, квантовые технологии, новые производственные технологии, промышленный интернет, компоненты робототехники и сенсорика, технологии беспроводной связи, технологии виртуальной и дополненной реальностей. Предприятиям необходимо использовать имеющиеся возможности данных технологий и стремиться повышать эффективность деятельности посредством цифровизации бизнес-процессов.

Таблица 1. Сравнительная характеристика методик оценки степени цифровизации предприятия.

Название методики	Авторы методики	Группы показателей оценки / общее количество показателей
Оценка уровня цифровизации промышленного предприятия	Бабкин А.В., Пестова А.Ю. (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого)	Трудовые ресурсы, материально-техническое обеспечение, цифровая инфраструктура предприятия, программное обеспечение, финансовые ресурсы, организационно-управленческие показатели / 19 показателей
Оценка цифровой трансформации	Центр цифрового бизнеса MIT (MIT Center for Digital Business) и Capgemini Consulting	Клиентский опыт, операционные процессы и бизнес-модели / 9 показателей
Модель цифровой зрелости	Компания Deloitte	Потребители, стратегия, технологии, производство, структура и культура организации / 179 показателей
Индекс цифровой трансформации	Аналитическое агентство Arthur D. Little	Стратегия и руководство; продукты и сервисы; управление клиентами; операции и цепочки поставок; корпоративные сервисы и контроль; информационные технологии; рабочее место и культура / 23 показателя
Модель оценки цифровых способностей	Компания KPMG	Видение и стратегия, цифровые таланты, ключевые цифровые процессы, гибкие источники и технологии, руководство / нд
Цифровое пианино	Глобальный центр трансформации цифрового бизнеса	Бизнес-модель, организационная структура, сотрудники, процессы, ИТ-возможности, предложения, модель взаимодействия / нд
Цифровые преобразования	Компания Ionology	Стратегия и культура, персонал и клиенты, процессы и инновации, технологии, данные и аналитика / нд
Индекс зрелости Индустрии 4.0 Acatech	Национальная академия наук и техники Германии	Ресурсы, информационные системы, культура и организационная структура
Оценка стратегических преобразований в процессе цифровой трансформации	Компания Команда-А (KMDA)	Клиентоцентричность, коллаборации, данные, инновации, ценность, люди

Для оценки уровня цифровизации организаций предлагается пошаговая методика (рис. 2), позволяющая оценить степень использования систем решений (сервисов, услуг, приложений и пр.) на основе современных информационно-коммуникационных технологий (далее – ИКТ) при осуществлении различных бизнес-процессов организаций и определить уровень цифровизации организаций. Бизнес-процессы можно конкретизировать подпроцессами, которые, в свою очередь, могут выполняться с помощью специализированного программного обеспечения и специальных сервисов. Методика предполагает участие организаций различных форм собственности, размеров [8] и сфер деятельности, так как без цифровых технологий в настоящее время не может развиваться ни одна компания. Методика выделяет шесть укрупненных бизнес-процессов, каждый из которых уточнен рядом подпроцессов (управление персоналом, производство / выполнение работ / оказание услуг, маркетинг, логистика, финансы и бухгалтерия, общехозяйственная деятельность). Распределение бизнес-процессов на основные, управленческие и вспомогательные не осуществлялось, так как целью исследования была оценка степени цифровизации всего объема выполняемых в организации процессов и подпроцессов.

Так, например, бизнес-процесс «Управление персоналом» разбивается на восемь подпроцессов (планирование потребности в персонале; подбор персонала; адаптация персонала; кадровый документооборот; оценка/аттестация персонала; формирование кадрового резерва (планирование карьерного развития); повышение квалификации персонала и переподготовка кадров (обучение сотрудников); разработка и внедрение системы стимулирования персонала, управление вовлеченностью), которые в дальнейшем оцениваются на предмет использования средств ИКТ.

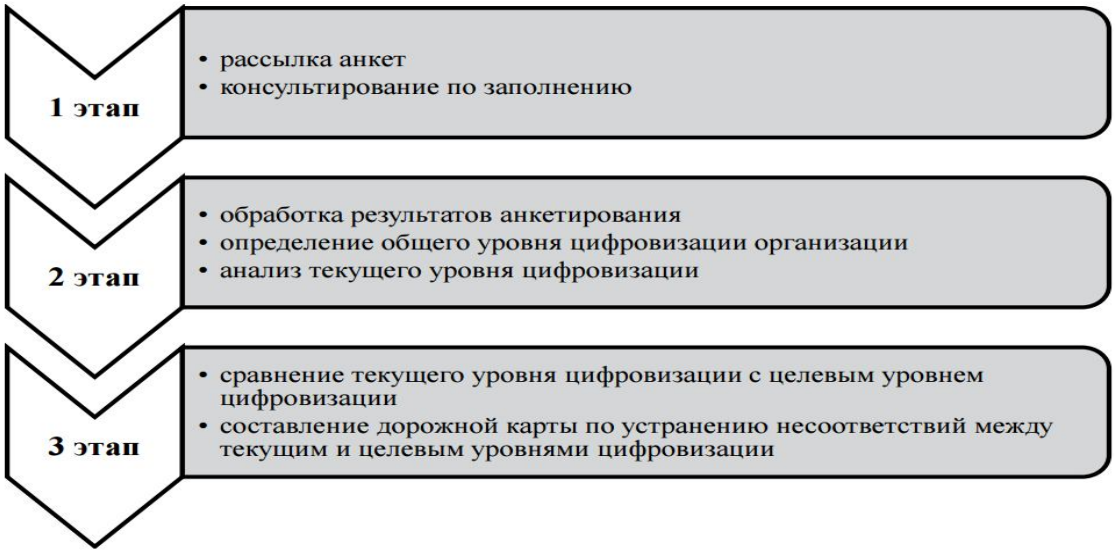

Рисунок 2. Алгоритм оценки уровня цифровизации организации

Как видно из рисунка 2, логика исследования заключается в выполнении трех последовательных этапов.

Этап 1. Топ-менеджменту предлагается заполнить анкету и получить возможность провести самодиагностику уровня цифровизации своей организации. Заполняя анкету, респондент отмечает степень реализации бизнес-процесса (да/ нет). В случае если бизнес-процесс находится на аутсорсинге, указывается «нет». Далее указывается использование в реализуемых бизнес-процессах специализированного программного обеспечения и сервисов (да/нет). Использование текстовых редакторов, электронных таблиц и (или) почтовых агентов (например, Word, Excel, Outlook) не рассматривается как элемент цифровизации, и в соответствующей строке указывается «нет». Данные инструменты используются в организациях повсеместно и уже не формируют конкурентных преимуществ. Кроме того, респондент указывает, какое именно средство ИКТ реализовано в компании для этого бизнес-процесса.

Этап 2. Процедуры сбора данных и обработки результатов анкетирования предприятий были автоматизированы в программе MS Excel. Для большего охвата исследуемой аудитории был разработан сайт (http://digital-index.ru), информирующий потенциальных респондентов о проводимом исследовании. По окончании заполнения анкеты топ-менеджмент имеет возможность увидеть уровень цифровизации своей организации (рис. 3).

Рисунок 3. Уровни цифровизации организации

Так, если только 30% бизнес-процессов организации работают на основе современных информационно-коммуникационных технологий, то предприятие имеет 1-й уровень цифрового развития – «Локальная цифровизация».

В том случае, если 80% бизнес-процессов используют в своей работе ИКТ, организации присваивается второй уровень – «Частичная цифровизация».

Уровень 3 – «Комплексная цифровизация» – определяется организациям, которые перевели 100% бизнес-процессов на современные ИКТ.

В современных условиях возникает необходимость и возможность взаимодействия с контрагентами в цифровом пространстве, поэтому в случае комплексной цифровизации исследуемой организации и реализации процессов взаимодействия с 50% контрагентов организацию можно отнести к 4-му уровню цифровизации – «Умная» организация».

Уровень 5 авторами назван как «Цифровая экосистема» и предполагает комплексную цифровизацию и реализацию процессов взаимодействия с 60–100% контрагентов.

Этап 3. Определив текущий уровень цифровизации организации, ее менеджменту предстоит задуматься о разработке или корректировке стратегии цифровизации. Сравнение текущего уровня с целевым – определенным стратегией цифровизации предприятия – или максимально возможным (по методике – 100%-ная цифровизация бизнес-процессов предприятия) позволит выявить отставания в цифровой трансформации и своевременно их устранить. При обеспечении репрезентативности выборки исследованных организаций по видам деятельности, их размеру (крупный/средний/малый бизнес) и региону могут быть построены соответствующие рейтинги (рис. 4):

рейтинг уровня цифровизации отраслей как на уровне отдельно взятого региона, так и на национальном уровне;

рейтинг уровня цифровизации в сегменте «микро и малый бизнес» как на уровне отдельно взятого региона, так и на национальном уровне;

рейтинг уровня цифровизации в сегменте «средний бизнес» как на уровне отдельно взятого региона, так и на национальном уровне; рейтинг уровня цифровизации в сегменте «крупный бизнес» как на уровне отдельно взятого региона, так и на национальном уровне; рейтинг уровня цифровизации регионов.

Рисунок 4. Иерархия рейтингов цифровизации, основанных на оценке уровня цифровизации организации

Предлагаемая авторами методика оценки уровня цифровизации отличается от существующих простотой работы с анкетой, малыми затратами времени на заполнение (до 30 минут), точностью результатов, так как респондентами являются менеджеры предприятий, владеющие необходимой информацией.

Рассмотренная методика, основанная на использовании достоверной информации, позволяет получить обобщенную оценку степени цифровизации отдельно взятой организации и отрасли в целом, контролировать измерения в области цифровизации, выявлять и развивать перспективные точки роста, а также определять ближайшие перспективы цифровой трансформации от отдельного бизнес-процесса до отрасли и региона в целом.

Полученные результаты также могут лечь в основу разработки целевых программ и проектов по развитию цифровой экономики и поддержке организаций в ходе развития цифровизации бизнес-процессов.

Список литературы

1. Акбердина В.В. Цифровая трансформация промышленного комплекса России. / Сборник докладов Санкт-Петербургского Международного Экономического Конгресса (СПЭК-2018) «Форсайт «Россия»: новое индустриальное общество. Будущее». – Санкт-Петербург, 2019. – 11-24 с.

2. Бабкин А.В., Пестова А.Ю. Алгоритм оценки уровня цифровизации промышленного предприятия. / Цифровая трансформация экономики и промышленности: сборник трудов научно-практической конференции с зарубежным участием, 20–22 июня 2019 г. / под ред. Д-ра экон. Наук, проф. А. В. Бабкина. – СПб. : ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2019. – 683-680 с.

3. Бабкин А.В., Пестова А.Ю. Показатели для оценки уровня цифровизации промыш- ленного предприятия // Всероссийское общество научно-исследовательских раз- работок: сборник трудов XIV международной научно-практической конференции 01-02 июня 2019. 2019. – с. 38-41.

4. Боркова Е.А., Борискина Е.В., Глазкова А.О. Уровень цифровизации экономики стран Европейского союза и Российской Федерации // Вопросы инновационной экономики. – 2019. – № 3. – с. 709-720. – doi: 10.18334/vinec.9.3.40906. 11. Гилева Т. А. Цифровая зрелость предприятия: методы оценки и управления // Вестник УГНТУ. Наука, образование, экономика. Серия экономика. – 2019. – № 1. – с. 38-52.

5. Куприянова М.В. Методологические подходы к оценке уровня цифровизации промышленного производства // Право, экономика и управление: актуальные во- просы: Сборник материалов Всероссийской научно-практической конференции с международным участием. 2019. – с. 28-34.

6. Программа «Цифровая экономика Российской Федерации» распоряжение Правительства РФ от 28 июля 2017 г. № 1632-р. [Электронный ресурс]. URL: http://

static.government.ru/media/files/9gFM4FHj4PsB79I5v7yLVuPgu4bvR7M0.pdf (дата обращения: 10.10.2020).

7. Цифровая трансформация в России — 2020. Аналитический отчет на базе опроса представителей российских компаний. [Электронный ресурс]. URL: https:// komanda-a.pro/projects/dtr_2020 (дата обращения: 10.10.2020).

8. Цифровая экономика – глобальные тренды и практика российского бизнеса // Официальный сайт Института менеджмента инноваций НИУ ВШЭ (ИМИ НИУ ВШЭ). [Электронный ресурс]. URL: https://imi.hse.ru/pr2017_1 (дата обращения: 09.10.2020).

ОЦЕНКА СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКОЙ СИТУАЦИИ (НА ПРИМЕРЕ МОНОГОРОДОВ ВОЛГОГРАДСКОЙ ОБЛАСТИ – ГОРОДСКОЙ ОКРУГ ГОРОД МИХАЙЛОВКА И ГОРОДСКОЙ ОКРУГ ГОРОД ФРОЛОВО)

Щукина Н.В., Ерохина Е.А.

Аннотация

В процессе исследования в статье приведен SWOT-анализ в виде матрицы, по результатам которого предложены для двух моногородов общие приоритетные направления, которые целесообразно учитывать при разработке стратегических документов. В статье также показано, что анализируемые территории занимают выгодное географическое месторасположение, достаточное наличие трудовых и природных ресурсов, будет способствовать реализации эффективной социально-экономическому политики.

Annotation

In the course of the research, the article presents a SWOT analysis in the form of a matrix, the results of which suggest common priority areas for two single-industry towns, which should be taken into account when developing strategic documents. The article also shows that the analyzed territories occupy a favorable geographical location, sufficient availability of labor and natural resources, and will contribute to the implementation of an effective socio-economic policy.

Ключевые слова: моногорода**,** SWOT-анализ, социально-экономическое развитие, Волгоградская область, сильные (преимущества) и слабые стороны (недостатки), возможности и угрозы, малые города

Keywords: single-industry towns, SWOT analysis, socio-economic development, Volgograd region,, strong (advantages) and weaknesses(disadvantages), opportunities and threats, small cities

Волгоградская область имеет выгодное географическое положение, являясь главными воротами на юг России с выходом на Иран, Ирак, Кавказ и Казахстан. Граничит с Саратовской, Ростовской, Астраханской, Воронежской областями и Республикой Калмыкия (Россия), а также с Республикой Казахстан.

На территории Волгоградской области сформирована многоотраслевая промышленность, ряд отраслей которой обладает внутренними резервами, имеются узкоспециализированные предприятия. По данным Волгоградстата, обрабатывающие производства занимают более 80,0% в промышленном объеме.

Также регион имеет развитое производство в сфере сельского хозяйства, являясь одним из крупных производителей сельскохозпродукции в России.

На территории Волгоградской области находятся два моногорода: городской округ город Михайловка и городской округ город Фролово согласно распоряжения правительства РФ от 29.07.2014 N 1398-р «Об утверждении перечня монопрофильных муниципальных образований Российской Федерации (моногородов)». [3].

Металлургическое производство и производство готовых металлических изделий является основой промышленности городского округа город Фролово. В моногороде проживает около 38,0 тыс. человек. Монопрофильность г. Фролово определяется тем, что 28,0 процентов населения в трудоспособном возрасте работает на предприятиях нефтедобычи, которые расположены за городской чертой; а также ЗАО «Волга-Фэст» занимало более 80,0 % выпуска продукции в указанном выше виде деятельности. [12].

Городской округ город Михайловка с численностью жителей 87,0 тыс.чел. является четвертым городом в Волгоградской области. На территории городского округа город Михайловка обеспечен выпуск строительных материалов: цемента, асбоцементных изделий, силикатного кирпича), тем самым являясь основным производителем продукции непосредственно используемой в строительной отрасли и, соответственно, играет немаловажную роль в экономике Волгоградской области.

Производство цемента осуществляется на АО «Себряковцемент», асбоцементные изделия выпускаются АО «СКАИ». Эти два предприятия обеспечивают около 70% объема выпуска промышленными предприятиями городского округа г. Михайловка. [11].

Как мы видим, экономика двух монопрофильных населенных пунктов Волгоградской области зависима от хозяйственной деятельности трех организаций и основополагающим критерием при принятии управленческих решений на данных территориях является расширение видов деятельности независящих от градообразующих предприятий.

Для определения перспективы развития территорий, принятий управленческих решений по выработке направлений устойчивого развития муниципальных образований, на наш взгляд, SWOT-анализ –один из эффективных инструментов стратегического планирования.

Как правило, SWOT-анализ заключается в выявлении взаимодействия факторов как внешней так и внутренней среды социально-экономического состояния исследуемой территории, комплексная оценка которых поможет выявить потенциал муниципалитетов

и сформулировать задачи по устойчивому развитию, а также своевременно отреагировать на возможные угрозы и риски.

Для исследования были использованы документы городского округа город Михайловка и городского округа город Фролово, находящиеся в открытом доступе, такие как годовые отчеты о социально-экономическом положении муниципалитетов, реализуемые муниципальные программы, а также участие в государственных программах Волгоградской области и федеральных целевых программах, проанализированы статистические показатели (данные Волгоградстата).

На территориях муниципалитетов на протяжении последних лет реализуются муниципальные программы в сфере образования, культуры, спорта, жилищно-коммунального хозяйства, молодежной политики и т.п. Муниципальные образования активно принимают участие в проектах «Формирование комфортной городской среды» и «Безопасные и качественные автомобильные дороги», которые позволяют осуществлять работу по благоустройству общественных пространств – скверы, парки, места отдыха горожан, а также ведется ремонт дорожного покрытия.

В рамках программ осуществляется финансовая и имущественная поддержка субъектов малого и среднего предпринимательства.

Немаловажное значение для местных органов власти имеет такой институт как территориальное общественное самоуправление, это одна из форм инициативного участия населения в осуществлении местного самоуправления, посредством которого граждане имеют возможность под свою ответственность решать свои жизненно важные проблемы, возникающие в процессе проживания на конкретной территории.

Изучив и проанализировав представленные данные, были сформированы обобщенные сильные и слабые стороны городского округа, а также возможности и угрозы в развитии городских территорий.

Таблица 1

SWOT-анализ социально-экономической ситуации моногородов Волгоградской области

Преимущества (сильные стороны)	Недостатки (слабые стороны)
- удобное географическое и транспортное положение (населенные пункты пересекает железнодорожная магистраль «Москва – Волгоград», по территории проходит автомобильная дорога федерального значения «Москва – Волгоград»; - наличие свободных трудовых ресурсов; - наличие свободных площадей и технологических мощностей для создания	- удаленность от областного центра; - недостаток кадров ряда рабочих профессий и управленческих кадров; - отток квалифицированных кадров; - снижение численности населения; - несоответствие спроса и предложения на рынке труда; - износ основных производственных фондов объектов ЖКХ;

новых производств; - наличие полезных ископаемых (мел, песок, глина, минеральная вода, руда); - наличие на территории городских округов возможностей для развития других видов экономической деятельности и самозанятости населения; - реализация муниципальных программ, направленных на повышение качества жизни населения; - развитая сеть образовательных учреждений (дошкольное, общее, средне-специальное, высшее); - достаточная оснащенность материально-технической базы учреждений здравоохранения; - наличие объектов историко-культурного наследия; - благоустроенные общественные места для отдыха и досуга;	- недостаточное оснащение материальной базы учреждений культуры; - дефицит узких специалистов в сфере здравоохранения; - устаревшие технологии, применяемые на большинстве предприятий промышленности; - зависимость местного бюджета от регионального бюджета (низкая бюджетная обеспеченность)
Возможности	Угрозы
- эффективное и рациональное использование имеющихся ресурсов (производственные площади, природные ресурсы) -поддержка моногородов один из приоритетов работы органов федеральной власти; - участие в федеральных целевых программах; - целевая подготовка кадров для учреждений образования и здравоохранения (в рамках программы моногородов) - развитие туризма - развитие и внедрение IT-технологий в производственные процессы; - развитие малого бизнеса за счет применения энергосберегающих технологий; - привлечение инвесторов за счет предоставляемых налоговых льгот и получения финансовой поддержки по программе моногородов; - расширение налогооблагаемой базы за счет создания новых производств	- неблагоприятная экологическая обстановка; - климатические условия (риски для ведения деятельности в сфере сельского хозяйства); - снижение спроса населения на продукцию предприятий местной промышленности и малого бизнеса в результате нестабильной работы градообразующих предприятий и снижение реальных доходов населения); - старение населения (повышение среднего возраста); - рост тарифов ЖКХ (как следствие снижение покупательского спроса); - невысокий уровень заработной платы; - дотационность бюджетов городских округов (снижение доли собственных доходов муниципалитета в общих доходах)

Результаты проведенного исследования позволяют сформулировать общие для моногородов Волгоградской области – городской округ город Михайловка и городской округ город Фролово, приоритетные направления, которые необходимо учитывать при разработке стратегий социально-экономического развития или долгосрочных прогнозов.

На наш взгляд, среди основных стратегических целей, которые будут направлены на повышение качества жизни населения муниципалитетов, можно выделить следующие: создание новых производств за счет повышения инвестиционной привлекательности и создания благоприятных условий для привлечения инвесторов; развитие туристической отрасли; эффективное использование имеющихся природных и производственных ресурсов; поддержка развития малых форм хозяйствования; увеличение доли занятых в сфере малого и среднего предпринимательства; реализация программ социальной политики, обеспечивающая поддержку талантливой молодежи, семей с детьми и т.д; внедрение в управленческие процессы элементов цифровой экономики; расширение возможностей использования IT-технологий в сфере образования и культуры; привлечение активных жителей городских округов к решению вопросов местного значения.

В заключение следует отметить, что при формировании долгосрочных планов целесообразно проводить SWOT-анализ, который зарекомендовал себя действенным механизмом исследования развития территорий.

Список литературы

1. Федеральный закон от 28.06.2014 №172-ФЗ «О стратегическом планировании в Российской Федерации» - [Электронный ресурс] /Режим доступа: http://www.consultant.ru/

2. Указ Президента РФ от 07 мая 2018 г. №204 « О национальных целях и стратегических задачах развития Российской Федерации на период до 2024 года» - [Электронный ресурс] /Режим доступа: http://www.consultant.ru/

3. Распоряжение Правительства Российской Федерации от 29.07.2014 №1398-р (ред. От 18.03.2019) «Об утверждении перечня монопрофильных муниципальных образований Российской Федерации» - [Электронный ресурс] /Режим доступа: http://www.consultant.ru/

4. Закон Волгоградской области от 21 ноября 2008 года N 1778-ОД «О Стратегии социально-экономического развития Волгоградской области до 2025 года» - [Электронный ресурс] / Режим доступа: http://www.consultant.ru/

5.Забазнова Т.А., Карпушова С.Е., Пацюк Е.В., Суркова О.А., Ерохина Е.А., Секачева Т..В., Щукина Н.В. Исследование инвестиционной привлекательности региона (на примере Волгоградской области) //Вестник Алтайской академии экономики и права. №4, 2018. С. 47-51

6. Паспорт приоритетного проекта «Комплексное развитие моногородов» - [Электронный ресурс] /Режим доступа: http://government.ru/news/25595/

7. Правительство РФ – [Электронный ресурс] /Режим доступа: http://government.ru/docs/

8. Министерство экономического развития РФ – [Электронный ресурс] /Режим доступа: http://economy.gov.ru/minec/main

9. Комитет экономической политики и развития Волгоградской области – [Электронный ресурс] /Режим доступа: http://economics.volgograd.ru/

10. Администрация городского округа город Михайловка Волгоградской области – [Электронный ресурс] / Режим доступа: http://mihadm.com/

11. Администрация городского округа город Фролово – [Электронный ресурс] / Режим доступа: http://frolovoadmin.ru/

12. Территориальный орган Федеральной службы государственной статистики по Волгоградской области. - [Электронный ресурс] / Режим доступа: http://volgastat.gks.ru/

ИПОТЕЧНОЕ КРЕДИТОВАНИЕ В ГОСУДАРСТВЕННЫХ БАНКАХ РОССИИ

Решетникова М.В., Землянская Е.В.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Статья посвящена актуальной теме, связанной с развитием ипотечного кредитования в России. Рассмотрена роль государства, цели и задачи. Выявлены основные меры государственной поддержки в сфере ипотечного кредитования. Проведено сравнение лидирующих банков и их предлагаемых продуктов в сфере ипотеки.

Abstract

The article is devoted to a topical topic related to the development of mortgage lending in Russia. The role of the state, goals and objectives are considered. The main measures of state

support in the field of mortgage lending are identified. The comparison of leading banks and their offered products in the field of mortgage is made.

Ключевые слова: ипотека, ипотечное кредитование, банки, льготные программы, государственная политика.

Keywords: mortgage, mortgage lending, banks, preferential programs, government policy.

Актуальность исследования продиктована одной из главных проблем и задач государства – решением жилищного вопроса граждан страны. Доступность жилья в значительной мере характеризует уровень развития общества. Роль государства в развитии и становлении ипотечного кредитования неоспоримо велика. На разных этапах истории она носила как позитивный, так и негативный характер. С 1754 года в России официально было дано начало кредитования под залог. За отсутствием опыта нововведение не дало ожидаемого результата и значительно сократило бюджет страны. Неоднократно ипотечное кредитование законодательно запрещалось, что существенно влияло на темпы его развития. Становление современного ипотечного кредитования началось в 90-х гг. прошлого столетия посредством проведения ипотечной политики, создания нормативно-правовой базы и инфраструктуры ипотечного кредитования.

В процессе развития ипотеки место государства в системе ипотечного кредитования претерпевало изменения. В настоящее время государство выступает в роли законодательного регулятора ипотечных отношений, проводит ипотечную политику, а также осуществляет государственную поддержку населения при приобретении жилья.

В настоящее время в России действует федеральный проект «Ипотека», утверждённый протоколом заседания проектного комитета по национальному проекту «Жильё и городская среда» от 21 декабря 2018 года № 3. Целевым ориентиром для федерального проекта «Ипотека» служит Указ Президента Российской Федерации В.В.Путина от 7 мая 2018 года № 204 «О национальных целях и стратегических задачах развития Российской Федерации на период до 2024 года», в котором намечены следующие цели и задачи в сфере ипотечного кредитования:

- обеспечение доступным жильём семей со средним достатком, в том числе создание возможностей для приобретения (строительства) ими жилья с использованием ипотечного кредита, ставка по которому должна быть менее 8 процентов;

- совершенствование механизмов финансирования жилищного строительства, в том числе посредством развития рынка ипотечных ценных бумаг и поэтапного перехода от привлечения денежных средств для долевого строительства многоквартирных домов и

иных объектов недвижимости к другим формам финансирования жилищного строительства, обеспечивающим защиту прав граждан и снижение рисков для них;

- применение новых механизмов развития и эксплуатации дорожной сети, включая использование инфраструктурной ипотеки, контрактов жизненного цикла, наилучших технологий и материалов.

Цель федерального проекта «Ипотека» заключается в создании возможностей для приобретения (строительства) гражданами жилья с использованием ипотечного кредита. В рамках проекта планируется понизить среднюю ставку по ипотечному кредиту к 2024 году, за счет:

- повышения ликвидности и снижения кредитного риска для банков;
- оперативного рефинансированию кредитов, предоставленных на приобретение жилья на первичном рынке;
- стандартизации рынка ипотечного жилищного кредитования.

Федеральным проектом «Ипотека» также предусматривается:

- решение проблемы «обманутых дольщиков» за счёт механизма эскроу-счетов;
- перевод рынка ипотеки в электронный формат;
- переход на проектное финансирование и счета эскроу;
- формирование ликвидного инвестиционно-привлекательного рынка ипотечных ценных бумаг.

Федеральный проект «Ипотека» включен в государственную программу Российской Федерации от 30 декабря 2017 года № 1710 «Обеспечение доступным и комфортным жильем и коммунальными услугами граждан Российской Федерации», утвержденную постановлением Правительства Российской Федерации. В данную государственную программу также входят:

1) Мероприятие федерального проекта «Финансовая поддержка семей при рождении детей», направленное на увеличение количества кредитных организаций, предоставляющих ипотечные кредиты (займы) семьям, имеющим 2 и более детей, по ставке 6% годовых;
2) Приоритетный проект «Ипотека и арендное жилье», направленный на улучшение жилищных условий граждан России путем обеспечения высоких темпов ввода жилья.

На основании государственных программ, проектов и постановлений разрабатываются меры государственной поддержки. Рассмотрим основные меры

государственной поддержки в сфере ипотечного кредитования (табл.1). Приведённый список мер господдержки не является исчерпывающим.

Таблица 1

Основные меры государственной поддержки в сфере ипотечного кредитования

Постановление Правительства Российской Федерации	Господдержка
от 30 декабря 2017 г. № 1711 «Об утверждении Правил предоставления субсидий из федерального бюджета российским кредитным организациям и акционерному обществу «Агентство ипотечного жилищного кредитования» на возмещение недополученных доходов по выданным (приобретенным) жилищным (ипотечным) кредитам (займам), предоставленным гражданам Российской Федерации, имеющим детей»	Ставка по ипотечному кредиту 6% для семей с 2 и более детьми или с ребенком-инвалидом.
От 30 ноября 2019 г. № 1567 «Об утверждении Правил предоставления субсидий из федерального бюджета российским кредитным организациям и акционерному обществу «ДОМ.РФ» на возмещение недополученных доходов по выданным (приобретенным) жилищным (ипотечным) кредитам (займам), предоставленным гражданам Российской Федерации на строительство (приобретение) жилого помещения (жилого дома) на сельских территориях (сельских агломерациях)»	Для сельских территорий (сельских агломераций). Процентная ставка по льготному ипотечному кредиту (займу) не менее 0,1% и не более 3% годовых. Размер кредита (займа): до 3 млн. рублей для сельских территорий (сельских агломераций) субъектов Российской Федерации, за исключением Ленинградской области и субъектов Российской Федерации, входящих в состав Дальневосточного федерального округа; до 5 млн. рублей для жилых сельских территорий (сельских агломераций) Ленинградской области и субъектов Российской Федерации, входящих в состав Дальневосточного федерального округа;
от 7 декабря 2019 г. № 1609 «Об утверждении условий программы «Дальневосточная ипотека» и внесении изменений в распоряжение Правительства Российской Федерации от 2 сентября 2015 г. № 1713-р»	Ставка 2% годовых. Размер кредита не более 6 млн. рублей, не более 80% стоимости приобретаемого (строящегося) жилого помещения, либо стоимости приобретаемого жилого помещения с земельным участком, либо стоимости строящегося индивидуального жилого дома на земельном участке, либо стоимости приобретаемого земельного участка и строящегося на нем индивидуального жилого дома.

Постановление Правительства Российской Федерации	Господдержка
	Срок кредита – не более 20 лет. Заемщиками могут стать: супруги, возраст которых не превышает 35 лет; родитель в возрасте до 35 лет с несовершеннолетним ребенком; владелец «дальневосточного гектара».
От 20 апреля 2015 г. № 373 «Об основных условиях реализации программы помощи отдельным категориям заемщиков по ипотечным жилищным кредитам (займам), оказавшихся в сложной финансовой ситуации, и увеличении уставного капитала акционерного общества «ДОМ.РФ»»	Категории заёмщиков: имеющие несовершеннолетних детей или являющиеся опекунами (попечителями) несовершеннолетних детей; инвалиды или имеющие детей-инвалидов; ветераны боевых действий; граждане, на иждивении которых находятся лица в возрасте до 24 лет, являющиеся учащимися, студентами (курсантами), аспирантами, адъюнктами, ординаторами, ассистентами-стажерами, интернами и обучающиеся по очной форме обучения. Среднемесячный совокупный доход семьи заемщика, рассчитанный за 3 месяца, предшествующие дате подачи заявления о реструктуризации, после вычета размера планового ежемесячного платежа по кредиту (займу), не превышает на каждого члена семьи заемщика двукратной величины прожиточного минимума, установленного в субъекте Российской Федерации
от 30 декабря 2017 г. № 1710 «Об утверждении государственной программы Российской Федерации «Обеспечение доступным и комфортным жильем и коммунальными услугами граждан Российской Федерации»»	Предоставление субсидий молодым семьям. Размер субсидий, условия участия в программе и основания для выплаты устанавливаются на региональном уровне. Предусмотрены компенсации для молодых семей с детьми в размере 35% от стоимости квартиры, без детей – 30%. Супруги не должны быть старше 35 лет. Приоритетное право предоставлено многодетным семьям. Выплаты доступны в 83 регионах.
От 27 января 2009 г. № 63 «О предоставлении федеральным государственным гражданским служащим единовременной субсидии на приобретение жилого помещения»	Государственная субсидия гражданским служащим для решения жилищных проблем. Предусмотрено много условий, необходимых для получения единовременной субсидии.

Государство стремиться усовершенствовать систему ипотечного кредитования, сделать её более открытой и понятной, увеличить спрос и предложение на рынке недвижимости, обеспечить приток долгосрочных инвестиций. Приоритетным направлением является обеспечение доступным жильём семей со средним достатком за счёт снижения процентных ставок по ипотечным кредитам.

Все банки на территории Российской Федерации подразделяются на две категории: государственные и частные банки. При помощи банковских структур государство реализовывает ипотечную политику, как сказано выше. Банков с государственным участием насчитывается около 26, среди них есть банки косвенно, частично и полностью принадлежащие государству. В таблице 2 приведены государственные банки, принадлежащие Федеральному агентству по управлению государственным имуществом (Росимуществу) и Министерству финансов.

Таблица 2

Государственные банки, принадлежащие Росимуществу и Министерству финансов

Наименование банка	Доля участия государства, %
Россельхозбанк	100 (Росимущество)
Российский Национальный Коммерческий Банк	100 (Росимущество)
АО «ДОМ.РФ»	100 (Росимущество)
Сбербанк	52,32 (Министерство финансов РФ)
ВТБ (ПАО)	60,93 (Росимущество)

Все государственные банки из таблицы 2 предоставляют ипотечные кредиты. Сравним условия ипотечного кредитования (табл. 3). Данные для исследования возьмём с официальных сайтов банков.

Таблица 3

Ипотечные программы государственных банков

Ипотечные программы	Условия		
	Ставка,%	Срок, лет	Сумма, млн. рублей
Россельхозбанк			
Сельская ипотека	От 2.7	До 25	до 5
Дальневосточная ипотека	От 1.7	До 20	до 6
Ипотека с господдержкой 2020	От 5.9	До 30	До 12
Специальное предложение на приобретение квартиры по договору участия в долевом строительстве или по договору купли-продажи у ГК А101	От 2.55	До 10	До 60
Ипотечные каникулы (с отсрочкой платежей на	От 8.7	До 30	До 60

Ипотечные программы	Условия		
	Ставка,%	Срок, лет	Сумма, млн. рублей
первые 12 месяцев кредитования)			
Ипотечное жилищное кредитование	От 7.5	До 30	До 60
Рефинансирование военной ипотеки	От 7.5	До 27	До 2,7
Рефинансирование ипотеки	От 8.0	До 30	До 20
Ипотека с государственной поддержкой семей с детьми	От 4.6	До 30	До 12
Молодая семья и материнский капитал	От 7.5	До 30	До 60
Целевая ипотека	От 9.1	До 30	До20
Нецелевой кредит под залог жилья	От 9.7	До 10	До 10
Ипотека по двум документам	От 8.8	До 25	До 8
Военная ипотека	От 7.5	До 27	До 2,7
Российский Национальный Коммерческий Банк (РНКБ)			
Сельская ипотека	От 3.0	До 25	До 3
Господдержка 2020	От 5.5	До 25	До 6
Ипотека с господдержкой для семей с детьми	От 5.0	До 25	До 6
Новостройки	От 5.5	До 25	До 8
Ипотека на вторичном рынке	От 6.8	До 25	До 8
Ипотека для военных	От 8.65	До 25	До 2.946
Рефинансирование ипотечных кредитов	От 6	До 25	До 15
АО «ДОМ.РФ»			
Льготная ипотека на новостройки	От 5.9	До 30	До 12
Дальневосточная ипотека	От 1.2	До 20	До 6
Семейная ипотека	От 4.7	До 30	До 12
Квартира в новостройке	От 7.4	-	До 50
Готовое жилье	От 8.0	-	До 30
Строительство жилого дома	От 8.6	-	До 30
Покупка жилого дома	От 9.6	-	До 30
Военная ипотека	От 7.3	-	До 3.31
Семейная для военных	От 4.9	-	До 4.031
Военная льготная ипотека	От 5.9	-	До 3.77
Льготная ипотека для регионов РФ	От 1,4	-	До 30
Бизнес-ипотека	От 7.5	До 10	До 50
Сбербанк			
Господдержка 2020	От 0.1	До 20	До 12
Приобретение строящегося жилья	От 0.9	До 30	-
Приобретение готового жилья	От 7.3	До 30	-
Рефинансирование ипотеки и других кредитов	От 7.9	До 30	-
Спецпрограмма по ипотеке на новостройки	От 1.0	До 30	-

Ипотечные программы	Условия		
	Ставка,%	Срок, лет	Сумма, млн. рублей
Ипотека с господдержкой для семей с детьми	От 0.1	До 30	До 12
Строительство жилого дома	От 8.8	До 30	-
Загородная недвижимость	От 8.0	До 30	-
Кредит на любые цели под залог недвижимости	От 10.4	До 20	До 10
Ипотека плюс материнский капитал	От 4.1	До 30	-
Ипотека по программе Приобретение готового жилья	От 7.9	До 30	-
Военная ипотека	От 7.9	До 25	До 3.141
ВТБ (ПАО)			
Господдержка 2020	От 6.1	До 30	-
Вторичное жильё	От 7.4	До 30	До 60
Новостройка	От 7.4	До 30	До 60
Рефинансирование ипотеки	От 7.4	До 30	До 30
Ипотека с господдержкой	От 5.0	До 30	До 12
Дальневосточная ипотека	От 1.0	До 19	До 6
Победа над формальностями	От 7.4	До 20	До 30

Ряд ипотечных программ исходит из рассмотренных ранее государственных программ, проектов и постановлений, в их числе «Дальневосточная ипотека». Наибольший спектр ипотечных программ у Россельхозбанка и АО «ДОМ.РФ». Наибольший порог суммы ипотечного кредита 60 млн. рублей. Наименьшая минимальная ставка 0,1% по программе Сбербанка «Господдержка 2020». Наибольшая минимальная ставка 10,4% по программе Сбербанка «Кредит на любые цели под залог недвижимости». Максимальный срок предоставления ипотечного кредита 30 лет. Сгруппируем схожие ипотечные программы, такие как: сельская ипотека; дальневосточная ипотека; господдержка 2020; ипотека с господдержкой; военная ипотека; семейная и материнский капитал (табл. 4).

Таблица 4

Схожие ипотечные программы государственных банков

Ипотечные программы	Банк	Условия		
		Ставка, %	Срок, лет	Сумма, млн. рублей
Сельская ипотека	Россельхозбанк	От 2.7	До 25	до 5
	РНКБ	От 3.0	До 25	До 3
Дальневосточная ипотека	Россельхозбанк	От 1.7	До 20	до 6
	АО «ДОМ.РФ»	От 1.2	До 20	До 6

Ипотечные программы	Банк	Условия		
		Ставка, %	Срок, лет	Сумма, млн. рублей
	ВТБ (ПАО)	От 1.0	До 19	До 6
Ипотека с господдержкой	Россельхозбанк	От 5.9	До 30	До 12
	РНКБ	От 5.5	До 25	До 6
	Сбербанк	От 0.1	До 20	До 12
	ВТБ (ПАО)	От 6.1	До 30	-
	ВТБ (ПАО)	От 5.0	До 30	До 12
Семейная ипотека и с материнским капиталом	Россельхозбанк	От 7.5	До 30	До 60
	АО «ДОМ.РФ»	От 4.7	До 30	До 12
	АО «ДОМ.РФ»	От 4.9	-	До 4.031
	Сбербанк	От 4.1	До 30	-
Ипотека с господдержкой для семей с детьми	РНКБ	От 5.0	До 25	До 6
	Сбербанк	От 0.1	До 30	До 12
Военная ипотека	Россельхозбанк	От 7.5	До 27	До 2,7
	РНКБ	От 8.65	До 25	До 2.946
	АО «ДОМ.РФ»	От 7.3	-	До 3.31
	Сбербанк	От 7.9	До 25	До 3.141

Из рассматриваемых государственных банков ипотечную программу «Сельская ипотека» имеют 2 банка, «Дальневосточная ипотека» - 3 банка, с господдержкой – 3 банка, для семей – 4 банка, военную – 4 банка. Наименьшая минимальная процентная ставка в группе «сельская ипотека» у Россельхозбанка (2,7%), «Дальневосточная ипотека» у Банка ВТБ (1,0%), «Ипотека с господдержкой» у Сбербанка(0,1%), «Семейная ипотека и с материнским капиталом» у Сбербанка(4,1%), «Военная ипотека» у АО «ДОМ.РФ» (7,3%). Наибольший порог суммы ипотечного кредита в группе «сельская ипотека» у Россельхозбанка (5 млн.руб.), «Семейная ипотека и с материнским капиталом» у Россельхозбанка (60 млн.руб.), «Военная ипотека» у АО «ДОМ.РФ» (3,31 млн.руб.).

Таким образом, государство через государственные банки реализовывает ипотечную политику. Необходимо учесть то, что исследованные государственные банки занимают лидирующие положения в банковской системе страны. По этой причине они являются отличными платформами для внедрения государственных программ льготного кредитования.

Список литературы

1. Указ Президента Российской Федерации от 7 мая 2018 года № 204 «О национальных целях и стратегических задачах развития Российской Федерации на период до 2024 года»

2. Постановление Правительства РФ от 30.12.2017 года в ред. От 18.09.2020 г. № 1710 «Обеспечение доступным и комфортным жильем и коммунальными услугами граждан Российской Федерации» // Собрание законодательства РФ. 15.01.2018. № 3. Ст. 546

3. Федеральный проект «Ипотека» от 21 декабря 2018 года № 3: утверждён протоколом заседания проектного комитета по национальному проекту «Жильё и городская среда»

4. Проскурякова, Н. А. Ипотека в Российской империи / Н.А. Проскурякова. – М.: НИУ ВШЭ, 2017. – 744 с.

5. Разумова, И. А. Ипотечное кредитование / И.А. Разумова. – М.: Питер, 2017. – 304 с.

6. Официальный сайт Банка России / статистика / Банковский сектор / Показатели рынка жилищного (ипотечного жилищного) кредитования. – Режим доступа: https://cbr.ru , свободный. – Дата обращения: 15.10.2020.

7. Официальный сайт АО «Банк ДОМ.РФ» / Ипотека. – Режим доступа: https://domrfbank.ru/ , свободный. – Дата обращения: 15.10.2020.

8. Официальный сайт АО «Россельхозбанк» / Ипотека. – Режим доступа: https://www.rshb.ru/ , свободный. – Дата обращения: 15.10.2020.

9. Официальный сайт Банка ВТБ (ПАО) / Ипотека. – Режим доступа: https://www.vtb.ru/ , свободный. – Дата обращения: 15.10.2020.

10. Официальный сайт ПАО Сбербанк / Ипотека. – Режим доступа: https://www.sberbank.ru , свободный. – Дата обращения: 15.10.2020.

11. Официальный сайт РНКБ Банк (ПАО) / Ипотека. – Режим доступа: https://www.rncb.ru , свободный. – Дата обращения: 15.10.2020.

12. Википедия – свободная энциклопедия / Ипотека в России. – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org , свободный. – Дата обращения: 15.10.2020.

13. Русипотека – аналитический Центр по ипотечному кредитованию / История ипотеки. – Режим доступа: http://rusipoteka.ru/ , свободный. – Дата обращения: 15.10.2020.

РОЛЬ ГОСУДАРСТВА В СТАНОВЛЕНИИ И РАЗВИТИИ ИПОТЕЧНОГО КРЕДИТОВАНИЯ

Решетникова М.В., Селиванов А.Ю.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Статья посвящена одной из актуальных на сегодняшний день тем, связанной с развитием ипотечного кредитования в России. Рассмотрена государственная поддержка в

решении жилищного вопроса. А также представлена роль государства в становлении и развитии ипотечного кредитования.

Abstract

The article is devoted to one of the current topics related to the development of mortgage lending in Russia. State support in solving the housing problem is considered. And also the role of the state in the formation and development of mortgage lending is presented.

Ключевые слова: ипотека; ипотечное кредитование; недвижимость; финансовая поддержка; льготные программы; субсидирование; государственная политика.

Keywords: mortgage; mortgage credit lending; the property; financial support; preferential programs; subsidies; public policy.

В современных условиях рыночной экономики ипотечное кредитование (кредитование под залог недвижимого имущества) приобретает все большую значимость, в связи с востребованной потребностью населения в жилье.

Ипотечное кредитование в нашей стране появилось в конце XIX века наряду с широким распространением первых кредитных организаций и по сегодняшний день является одним из актуальных видов кредита. Приобрести в настоящее время собственное жилье мечтает каждый житель России. Однако не всем это под силу. В результате отсутствия денежных средств на покупку недвижимости многим приходится прибегать к услугам банков и оформлять ипотеку. Поэтому жилищное кредитование сегодня считается особенно популярным.

На современном этапе экономического развития страны долгосрочное ипотечное кредитование населения определяется как целостная система при непосредственном участии государства. Важной задачей, стоящей перед государственными органами, является установление оптимального баланса прав, делающего систему кредитования рентабельной и наименее рискованной для банков, а также доступной и безопасной для граждан – заемщиков.

В процессе формирования рыночной системы жилищного кредитования государство пытается создавать определенные стимулирующие условия для ее развития, возлагая на себя часть рисков. Как показывает практика, государственная власть способствует развитию ипотечного кредитования не только путем совершенствования нормативно – правовой базы, но и путем оказания финансовой поддержки, как кредитным организациям, так и населению в целом.

В нашей стране Правительством РФ разрабатываются льготные программы ипотечного кредитования, помогающие достичь снижения процентной ставки и сроков по

ипотеке. Перечень программ и возможностей получения этих льгот ежегодно расширяется.

Государственные жилищные программы позволяют населению приобретать по невиданным ставкам желаемое собственное жилье, поддерживать строительную отрасль в тяжелые для России времена и помогают заработать банкам.

В настоящее время получить ипотечный кредит предоставляется возможность практически в любом кредитном учреждении. Однако условия получения будут серьезно варьироваться в зависимости от типа кредита. Понять данную ситуацию и разобраться в ней поможет расположенная ниже таблица, характеризующая основные условия ипотечного кредитования с господдержкой в пяти ведущих российских банках.

Таблица 1

Сводная таблица ведущих российских банков по основным условиям получения ипотечного кредита с господдержкой в 2019 г.

Банки / Условия кредитования	Сбербанк	ВТБ 24	Газпромбанк	Россельхоз банк	Альфа – Банк
1	2	3	4	5	6
Ипотечная ставка, в % годовых	от 10,2%	от 6%	от 11%	от 4,7%	от 9,39%
Первоначальный взнос, в % от цены жилого объекта	от 20%	от 20%	от 20%	от 20%	от 20%
Срок займа	от 1 года до 30 лет	до 30 лет	до 30 лет	до 30 лет	до 30 лет
Сумма	от 300 тыс. руб.	от 500 тыс. руб. до 8 млн. руб.	от 500 тыс. руб. до 8 млн. руб.	от 100 тыс. руб. до 12 млн. руб.	от 600 тыс. руб.
Возраст	21 – 75 лет	21 – 65 лет	20 – 65 лет	21 – 75 лет	21 – 70 лет

В каждом банке, как показывает таблица, ипотечные кредитные продукты, предлагаемые по программе ипотека с государственной поддержкой, имеют свои критерии. У представленных банков совпадения наблюдаются лишь по первоначальному взносу – 20% и срокам займа от 1 года до 30 лет, а в остальном прослеживаются различия.

Соответственно, население, желающее приобрести жилье, выбирает тот банк, который предоставляет ипотеку на более выгодных для них условиях.

Исследуя развитие ипотечного кредитования важно также отметить, что сумма субсидирования государством не бесконечна, она имеет свои границы. Все выделенные суммы равномерно распределяются между банками участвующими в программе господдержки по ипотеке. И как только эта сумма будет исчерпана, ее действия прекратятся.

Иными словами, ипотека с господдержкой – это такой специальный проект, разработанный государством, для оказания помощи нуждающимся в улучшении жилищных условий гражданам со средним уровнем дохода. Суть государственного ипотечного кредитования заключается в выделении Правительством РФ средств из Пенсионного фонда для поддержки ипотеки.

В последнее время государственное регулирование жилищного сектора экономики приобретает первостепенное значение. Государственная политика, проводимая в сфере ипотечного кредитования, направляется на обеспечение системной стабильности и создание необходимых условий для развития рынка ипотечного кредитования в условиях здоровой конкуренции. То есть государство, несомненно, играет существенную роль в становлении и развитии ипотечного кредитования.

Следовательно, политика государства, связанная с поддержанием жилищной ипотеки, должна быть максимально продуманной, так как развитие сектора жилой недвижимости создает мультипликативный эффект развития на всю национальную экономику.

Таким образом, на основе всего вышесказанного можно сделать вывод о том, что ипотечный кредит в настоящее время является одним из актуальных видов кредита.

На сегодняшний день решение жилищного вопроса стало одной из приоритетных задач российского правительства. Власти оказывают поддержку ипотечному жилищному кредитованию с целью помочь строительной отрасли и банкам в период экономического спада, а также посодействовать гражданам нашей страны в приобретении желаемой недвижимости.

Ипотека, подкрепленная господдержкой, с каждым годом приобретает все большую значимость среди населения. Ведь благодаря ей облегчается кредитное бремя граждан, вынужденных покупать квартиры в кредит.

В современных условиях рыночной экономики ипотечное кредитование также выступает существенным фактором, определяющим экономический потенциал страны. Его развитие позитивно сказывается на состоянии реального сектора экономики и положительно воздействует на преодоление социальной нестабильности в стране.

Сводная таблица ведущих российских банков по основным условиям получения ипотечного кредита с господдержкой в 2017г.

Банки / Условия кредитования	Сбербанк	ВТБ 24	Газпромбанк	Россельхоз банк	Альфа – Банк
Ипотечная ставка, в % годовых	от 11%	от 11,4%	от 10,6%	от 10,9%	от 6,19%
Первоначальный взнос, в % от цены жилого объекта	от 20%	от 20%	от 15%	от 20%	от 10%
Срок займа	от 1 года до 30 лет	до 30 лет	до 30 лет	до 30 лет	до 20 лет
Сумма	от 300 тыс. руб.	от 600 тыс. руб. до 8 млн. руб.	от 500 тыс. руб.	от 100 тыс. руб. до 8 млн. руб.	от 600 тыс. руб.
Возраст	21 – 65 лет	21 – 65 лет	20 – 60 лет	21 – 65 лет	21 – 70 лет

Сводная таблица ведущих российских банков по основным условиям получения ипотечного кредита с господдержкой в 2018г.

Банки / Условия кредитования	Сбербанк	ВТБ 24	Газпромбанк	Россельхоз банк	Альфа – Банк
Ипотечная ставка, в % годовых	от 6% до 9,5%	от 5%	от 6,1%	от 4,6%	от 6,5%
Первоначальный взнос, в % от цены жилого объекта	от 20%	от 15%	от 15%	от 20%	от 15%
Срок займа	от 1 года до 30 лет	до 30 лет	до 20 лет	до 30 лет	до 30 лет
Сумма	от 300 тыс. руб. до 8 млн. руб.	от 500 тыс. руб. до 12 млн. руб.	от 100 тыс. руб. до 12 млн. руб.	от 100 тыс. руб. до 12 млн. руб.	от 600 тыс. руб.
Возраст	21 – 75 лет	21 – 70 лет	20 – 65 лет	21 – 65 лет	21 – 70 лет

Сводная таблица ведущих российских банков по основным условиям получения ипотечного кредита с господдержкой в 2019 г.

Банки / Условия кредитования	Сбербанк	ВТБ 24	Газпромбанк	Россельхоз банк	Альфа – Банк
Ипотечная ставка, в % годовых	от 10,2%	от 6%	от 11%	от 4,7%	от 9,39%
Первоначальный взнос, в % от цены жилого объекта	от 20%	от 20%	от 20%	от 20%	от 20%
Срок займа	от 1 года до 30 лет	до 30 лет	до 30 лет	до 30 лет	до 30 лет
Сумма	от 300 тыс. руб.	от 500 тыс. руб. до 8 млн. руб.	от 500 тыс. руб. до 8 млн. руб.	от 100 тыс. руб. до 12 млн. руб.	от 600 тыс. руб.
Возраст	21 – 75 лет	21 – 65 лет	20 – 65 лет	21 – 75 лет	21 – 70 лет

Список литературы

4. Алексанян, А.А. Роль государства в развитии системы ипотечного кредитования // Актуальные научные исследования в современном мире. – 2016 г.
5. Бочкарев, В.В., Казейкин В.С., Николаева Е.Л. Ипотечное кредитование в жилищном строительстве. – М.: Инфра-М, 2015 г.
6. Заборовская, А.Е., Заборовский В.Е. Развитие ипотечного кредитования в России // Фундаментальные исследования. – 2017 г.
7. Разумова, И.А. Ипотечное кредитование / И.А. Разумова // Питер. – 2015 г.
8. https://studbooks.net/1254736/bankovskoe_delo/rol_gosudarstva_podderzhke_zhilischnogo_ipotechnogo_kreditovaniya
9. https://posobie.help/kredit/ipoteka/ipoteka-s-gospodderzhkoj-chto-eto-znachit.html
10. https://studexpo.ru/142018/bankovskoe_delo/rol_gosudarstva_razvitii_ipotechnogo_kreditovaniya

III. Наука в образовании

ЛОКАЛЬНЫЕ ГЕОСИСТЕМЫ ХОЗЯЙСТВА «ДЁМИНСКОЕ» В ПРЕДЕЛАХ РАВНИННО-ВОДОРАЗДЕЛЬНЫХ МЕСТНОСТЕЙ

***Давыдов А.Э., *Косов Д.А., **Николко К.С.**

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
**Волгоградский государственный социально-педагогический университет

Аннотация

Проанализировано размещение локальных геосистем на уровне урочищ и равнинно-водораздельных местностей на примере хозяйства «Дёминское». Показана их зависимость от рельефа, микроклимата, почвенно-растительного покрова и антропогенной деятельности.

Annotation

The placement of local geosystems at the level of tracts and plain-watershed areas is analyzed on the example of the Deminskoe farm. Their dependence on topography, microclimate, soil and vegetation cover and anthropogenic activity is shown.

Ключевые слова. *Локальная геосистема, тип местности, урочище, антропогенное воздействие.*

Keyword. *Local geosystem, type of locality, natural boundary, anthropogenic impact.*

Хозяйство «Дёминское» находится на севере Новоаннинского района занимая площадь 28912 га [7].

Находясь в границах трех ландшафтов. Зональные ландшафты отнесены к Хопёрскому подрайону Окско-Донской провинции. Река Бузулук отнесена нами к третьему (интразональному) ландшафту заложившимся в среднем плейстоцене после ухода Донского ледника. Река протекает в речной долине выстланной четвертичными отложениями. В речной долине нами выделены надпойменно-террасовая и пойменная местности. Для зональных геосистем основные местности следующие [9; 13].

Плакорная местность. Нет эрозионных форм. Поверхность ровная с незначительными уклонами. Степные травостои представлены ковыльно-типчаковыми и кострово-разнотравными ассоциациями. Север хозяйства занимают обыкновенные черноземы мало и среднемощные, на остальной территории обычны черноземы южные. Почвообразующие породы: глины и тяжелые суглинки. Зеркало залегания грунтовых вод 6-7 м. Под антропогенным влиянием степные плакоры распаханы и заменены агроландшафтами.

Склоновая местность. Пологие склоны (1°-4°) пронизаны отвешками овражно-балочных систем. Это самая большая местность данного хозяйства. Почвы представлены

глинистыми и тяжелосуглинистыми черноземами южными. Ныне эта местность почти полностью распахана (до 90 %). С поверхности склоны сложены суглинками мощностью 2-5 м. Под суглинками обычна морена и флювиогляциальные пески – местные водоупоры [2; 4].

Особенность склоновой местности состоит в наличии уклона, доминировании горизонтального переноса обломочного материала над вертикальным, интенсивные эрозионные процессы. Для склоновой местности обычна микрозональность, наиболее ярко выраженная на склонах Бузулука и Паники. Микрозональность обусловлена геолого-геоморфологическими, ботаническими и почвенными факторами. Верхнесклоновая микрозона причленяется к периферии более древних эрозионных форм и характеризуется интенсивной денудацией. Обычны урочища слабопологих склонов с южными чернозёмами на четвертичных глинах или суглинках. Склоны южной экспозиции образуют комплексы с солонцами. Данная микрозона во многом распахана [1; 3; 12].

Среднесклоновая микрозона это область транзита веществ из верхней части склона к его подошве. Обычны примерно те же урочища, что и в верхней части склона.

Нижнесклоновая микрозона находится в нижней части склона, являет собой зону накопления обломочного материала делювиального и пролювиального генезиса. На конусах выноса сформировались локальные геосистемы остепненных дубрав.

Круто склоновая местность характерна для присетевых склонов Бузулука, Паники, покатых (4°-7°) и крутых склонов балок Швилева, Липяшки, оврага Иловатки. Обычны смытые почвы. Вблизи сел осуществляется перевыпас скота, склоны мало задернованы, растительный покров изрежен. Произошла активизация водно-эрозионных процессов [6].

Балочная местность представлена плейстоценовыми вторично степными балками прорезающими четвертичные породы. Крупнейшие из них: Романовская, Косая, Репная с выположенными днищами, и местами крутыми склонами. Зачастую они лишены деревьев, но обычны тревостои степных кустарников.

На территории хозяйства нами описаны две группы линейно-эрозионных систем:

11. Группа урочищ слабоврезанных ложбинно-лощинно-балочных суходольных систем долин Хопра и Паники. Обычны лощинообразная балка глубиной до 10 м, шириной – 150-200 м, длинной до 12-15 км. Ныне они приобрели облик суходолов, из-за вырубки байрачных лесов и перевыпаса. По бровкам и тальвегам обычны заросли кустарников, степного разнотравья.

В линейно-эрозионых системах созданы пруды возведенные в ранг антропогенных урочищ. Приверховые пруды сооружены в ложбинах и лощинах, характеризуются малыми размерами: длинна – 100-150 м, площадь – 0,5-1,5 га, глубина не более 1,5 м. Приустьевые пруды отличаются большими размерами: длина – 300-700 м, площадь 1,5-5 га, глубина более 1,5м. Наиболее запружены балки Репная (6 прудов), Косая (7), Большеголовая (12), Романовская (5). В 2020 г. на изучаемой территории был 21 пруд общей площадью 119 га, объемом – 2511 м^3 [5;11].

Рассмотрим пруд «Дёминский», как пример сформировавшегося комплекса. Создан в 1955 г. в балке Голой. Длинна водоема – 1,5 км, ширина – 265 м, предельная глубина – 2,3 м, площадь водного зеркала — 3,7 га. В шестидесятые годы вокруг водоёма высажены ясень, дуб, ильм, тополь, береза. Ныне они имеют следующие показатели: бонитет – 1-2, полнота – 0,9-1, высота – 16-18 м, диаметр до 28 см. Под пологом деревьев произрастают хвощ полевой, тысячелистник благородный, мятлик луговой, горец птичий, типчак, сурепка. Фации Мелководья представлены рогозом и тростником. Пелагиаль заросла осокой обыкновенной и роголистником [8; 10].

Иначе выглядят пруды-ловушки верховьев овражно-балочных систем. Например, Безымянный пруд (длинна 100-110 м, ширина 40-50 м, предельная глубина – 1,1 м, площадь водного зеркала – 0,29 га) сооруженный в бассейне балки Крутой. Плотина пруда раз в три-пять лет прорывается талыми водами. Формирующийся природный комплекс не сформирован. Побережье не облесено. Видами-доминантами прибрежной зоны стали горец птичий, пастушья сумка, ромашка, тысячелистник. Тут видовое разнообразие в два раза ниже, чем в облесённом водоеме.

2 Система сложных урочищ V-образных средневрезанных лощинно-овражно-балочных линейно-эрозионных систем бузулукского склона со слабо задернованными склонами, переменным водотоком, байрачными лесами и конусами выноса. Бузулукский склон испещрен активно растущими эрозионными системами. Склоны балок Черёмуховой, Рихляевской, Иловатки пронизаны отвершками оврагов. В балке Черёмуховой находятся байрачные леса, растущих оврагов мало. Основное звено этой системы – балка шириной до 250-300 м, глубиной 15-25 м. От неё отходят лощины переходящие в ложбины. Типичны ложбины стока длинной 1-2 км, шириной 100-150 м, глубиной 3-5 м, подходят прямо к бровкам балок, являясь причиной возникновения боковых и верховых оврагов длинной до 400-600 м, шириной 15-20 м, глубиной до 6-8 м. В приустьевой части обычны конусы выноса, на которых сформировались дубравы и разнотравные луга.

Опишем на примере балки Черёмуховой основные фации байрачных дубрав. Верхнесклоновая микрозона характеризуется большой крутизной поверхности (12-18°), распространены сильно- и средне смытые южные чернозёмы. Дуб невысокий, корявый, порослевой IV класса бонитета с примесью груши, клена. В травяном покрове – мятлик. Эта лесомятликовая дубрава возникла при перевыпасе скота. Подлесок вытоптан, растительность сбита. Средне склоновая микрозона сложена с поверхности делювиальным плащом, крутизна склона уменьшается до 10-14°. Высота дуба увеличивается до 5-6 м, он образует первый ярус. Второй ярус формируется за счёт клена, лещины, черёмухи, вяза. Травяной покров представлен орляком, вороньим глазом, купеной. Нижнесклоновая микрозона более полога (4-6°), увлажнена, за счёт разгрузки локально-донского моренного водоносного горизонта. Дуб уступает место чёрноольшанникам. Обычно высокое разнотравье (крапива двудомная и пр.) [4].

Список литературы

1. Князев А.П., Князев Ю.П. Современное состояние агроландшафтов Михайловского района // Вестник студенческого научного общества. Серия: Естественные, точные и технические науки. – Волгоград: Перемена, 2001. – № 16. – С. 88-90.

2. Князев А.П., Князев Ю.П. Экологические проблемы Кумылженского района // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 15-16.

3. Князев Ю.П. Эволюция ландшафтов бассейна Среднего и Нижнего Дона под антропогенным воздействием // Проблемы территориальной организации природы и общества. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2012. – С. 192-194.

4. Князев Ю.П. Геоэкологический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Формирование и реализация экологической политики на региональном уровне. – Ярославль, 2011. – С. 71-77.

5. Князев Ю.П. Оценка антропогенной нарушенности ландшафтов Волгоградской области // География: наука, методика, практика. – М., 2011. – С. 71-73.

6. Князев Ю.П. Эколого-гидрографический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Водные ресурсы, экология и гидрологическая безопасность. – М., 2010. – С. 221-224.

7. Князев Ю.П. Ландшафтный анализ территории средствами ГИС-технологий при планировании хозяйственной деятельности (на примере Нижнего Поволжья) // Системы географических знаний. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2008. – С. 137-140.

8. Князев Ю.П., Князев А.П. Парагенетический ландшафтный анализ природных комплексов Хоперского интразонального ландшафтного подрайона // Экология и экономика. Материалы круглого стола. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2005. – С. 201-205.

9. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное изменение // VII региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2003. – С. 67-68.

10. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное преобразование. Дис. … канд. Геогр. Наук. РГУ, 2003. – 190с.

11. Князев Ю.П. Геоэкологическое состояние гидрографической сети юга Окско-Донской равнины // Поволжский экологический вестник. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2001. – № 8. – С. 26-32.

12. Князев Ю.П., Князев А.П. Картографирование геоэкологических ситуаций в пределах Хоперско-Бузулукской равнины // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 14-15.

13. Ярыгин А.Н., Князев Ю.П., Князев А.П. Морфологическая структура ландшафтов Нижнехопёрского природного парка // Известия Дагестанского государственного педагогического университета. Естественные и технические науки. – 2010. – № 3 (12). – С. 111-116.

ЛОКАЛЬНЫЕ ГЕОСИСТЕМЫ ХОЗЯЙСТВА «СЕБРЯКОВСКОЕ» В ПРЕДЕЛАХ РАВНИННО-ВОДОРАЗДЕЛЬНЫХ И ДОЛИННЫХ МЕСТНОСТЕЙ

***Давыдов А.Э., *Косов Д.А., ** Фролова А.В.**

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
**Волгоградский государственный социально-педагогический университет

Аннотация

Проанализировано размещение локальных геосистем на уровне урочищ и типов местностей на примере хозяйства «Себряковское». Показана их зависимость от рельефа, микроклимата, почвенно-растительного покрова и антропогенной деятельности.

Annotation

The placement of local geosystems at the level of tracts and types of localities is analyzed on the example of the farm “Sebryakovskoe”. Their dependence on topography, microclimate, soil and vegetation cover and anthropogenic activity is shown.

Ключевые слова. *Локальная геосистема, тип местности, урочище, антропогенное воздействие.*

Keyword. *Local geosystem, type of locality, natural boundary, anthropogenic impact.*

Хозяйство «Себряковское» находится на территории Михайловского района занимая площадь 39747 га. Его территория расположена в границах двух ландшафтов, относящихся к разным физико-географическим районам. Водораздельные пространства отнесены к Бузулукскому подрайону Окско-Донской провинции в пределах подзоны разнотравно-типчаково-ковыльных степей. Долина Медведицы относится к Медведицкому ландшафтному району Донской интразональной провинции [1; 5; 8].

Водораздельные пространства занимает ландшафт примедведицких аккумулятивно-денудационных плато с южными черноземами преимущественно на четвертичных глинах и суглинках. Доминируют зональные ассоциации разнотравных степей с фрагментами «южного разнотравья». Для междуречных территорий характерны следующие местности [2; 4]:

Плакорная местность отличается отсутствием эрозионных систем, черноземными почвами. Вероятное залегание зеркала грунтовых вод не менее шести метров. В настоящее время плакоры полностью распаханы и зональные фитоценозы заменены однолетними культурными насаждениями.

Склоновая местность по занимаемой территории господствует над другими местностями. Пологие склоны (1°-4°) прорезаны потяжинами и ложбинами, это начальные звенья эрозионных систем. Почвы – маломощные черноземы разной степени смытости. Почвообразующие породы: четвертичные суглинки. Вероятное залегание зеркала грунтовых вод не менее трёх-шести метров, почти все пологие склоны распаханы. По бортам ряда балок местами выходят на дневную поверхность неогеновые пески, ледниковые отложения и мел оказывающие огромное воздействие на состав индивидуальных фаций, где они выполняют функцию субстрата.

Круто склоновая местность не типична для искомого ландшафта. В основном это присетевые надбровочные склоны Медведицы и ее притоков; покатые и крутые склоны балок Соленой, Кобылинской, Лисьей, Терновой, Чаплыжинской, Балобардина. Обычны смытые черноземовидные почвы на глинах делювия, суглинках, иногда на песках и супесях неогена (склоны балки Соленой), или меле турона. Местность прорезана молодыми, активно растущими оврагами и промоинами. Почти все отвершки оврагов возникли за истекшие полвека вследствие высокого уровня распашки (25-40 %) и не проведения противоэрозионных мелиораций. Повсеместны участки приовражных и прибалочных лесных полос.

Балочная местность маркируется обширными балками постледникового генезиса возраст многих из них не менее 300-400 тыс. лет. В балках Кобылинке и Солёной местами обнажаются неогеновые пески и супеси. Линейно-эрозионные системы западной и центральной частей полигона относятся к бассейну Кумылги (балки Чаплыжная, Лесная, Гремучая, Балобардина, Кобылинская). У них пологие склоны, широкие днища. Они не обладают постоянными водотоками, они сильно запружены цепочками прудов-ловушек. Борта балок поросли разнотравными степями, вблизи сёл зачастую в разных стадиях пастбищной дигрессии. По тальвегам обычны древостои тёрна, вишни, жостера [3; 6; 7].

Балки медведицкого склона (Лисья, Кобылинка, Лог Большой) характеризуются крутыми, местами обрывистыми склонами. Они глубоко врезаны в четвертичные глины и суглинки. Ряд эрозионных систем имеет выходы родников, временные водотоки.

В линейно-эрозионных системах созданы каскады прудов используемых для выращивания рыбы, ирригации, водопоя животных. Самые запруженные балки: Балобардина — 8 прудов, Кобылинка и Чаплыжная – по пять. Всего на территории хозяйства насчитывается 44 искусственных водоема. По дну находятся фрагменты дубрав с примесью вяза и клена. Коэффициент эрозионной расчлененности – 0,9-1,1 км/км^2. Балочная местность в границах изучаемой территории представлена двумя вариантами [9].

1. Сложные урочища V-образных линейно-эрозионных систем с крутыми склонами пронизанными молодыми растущими оврагами, промоинами, с выходами родников и ключей, фрагментами дубрав с примесью вяза и клена. В первую очередь это балки и овраги медведицких склонов.

2. Сложные урочища вторичностепных линейно-эрозионных систем. По тальвегам господствуют кустарники и остепнённые луга. Склоны балок мало задернованы, осложнены боковыми оврагами, отвершками, промоинами. В основном это линейно-эрозионные системы бассейна реки Кумылга.

Медведицкая долина выделяется в качестве особого ландшафтного района. Водоток течет в широкой долине, свидетельствующий о его былой многоводности.

Надпойменно-террасовые местности представлены рядом вариантов [10; 11]:

1. Натеррасный озёрно-луговой с ПТК озер и переувлажненных лугов. Широко распространен к востоку пос. Себрово (например, озера Большой и Малый Ильмень). Луговые ПТК зачастую отведены под сенокосы и относятся к категории мало измененных сообществ.

2. Натеррасовых остепнённых лугов с южными черноземами на делювии. Почвообразующие пород: пески, супеси, суглинки. Урочища ныне распаханы или используются в качестве выпасов. У пос. Себрово, перевыпас привёл к возникновению кластеров развеваемых песков.

3. Натеррасовых слабо закреплённых или развеваемых песков относящихся к периферии Сергиевских песков, возникших при отступании Донского ледника.

4. Наложенных на медведицкую террасу конусов выноса крупных балок. (Кобылинка, Лисья и т.д.). Это ПТК остепнённых лугов и дубрав. Территории используются в качестве пастбищ и сенокосов.

Пойменная местность в границах хозяйства представлена высокой поймой. Это ПТК старичных озер, дубрав и лугов. Они мало изменены антропогенной деятельностью и используются как сенокосы и объекты рекреации [8;12; 13].

Список литературы

1. Князев А.П., Князев Ю.П. Современное состояние агроландшафтов Михайловского района // Вестник студенческого научного общества. Серия: Естественные, точные и технические науки. – Волгоград: Перемена, 2001. – № 16. – С. 88-90.

2. Князев А.П., Князев Ю.П. Экологические проблемы Кумылженского района // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 15-16.

3. Князев Ю.П. Эволюция ландшафтов бассейна Среднего и Нижнего Дона под антропогенным воздействием // Проблемы территориальной организации природы и общества. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2012. – С. 192-194.

4. Князев Ю.П. Геоэкологический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Формирование и реализация экологической политики на региональном уровне. – Ярославль, 2011. – С. 71-77.

5. Князев Ю.П. Оценка антропогенной нарушенности ландшафтов Волгоградской области // География: наука, методика, практика. – М., 2011. – С. 71-73.

6. Князев Ю.П. Эколого-гидрографический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Водные ресурсы, экология и гидрологическая безопасность. – М., 2010. – С. 221-224.

7. Князев Ю.П. Ландшафтный анализ территории средствами ГИС-технологий при планировании хозяйственной деятельности (на примере Нижнего Поволжья) // Системы географических знаний. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2008. – С. 137-140.

8. Князев Ю.П., Князев А.П. Парагенетический ландшафтный анализ природных комплексов Хоперского интразонального ландшафтного подрайона // Экология и экономика. Материалы круглого стола. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2005. – С. 201-205.

9. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное изменение // VII региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2003. – С. 67-68.

10. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное преобразование. Дис. … канд. Геогр. Наук. РГУ, 2003. – 190с.

11. Князев Ю.П. Геоэкологическое состояние гидрографической сети юга Окско-Донской равнины // Поволжский экологический вестник. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2001. – № 8. – С. 26-32.

12. Князев Ю.П., Князев А.П. Картографирование геоэкологических ситуаций в пределах Хоперско-Бузулукской равнины // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 14-15.

13. Ярыгин А.Н., Князев Ю.П., Князев А.П. Морфологическая структура ландшафтов Нижнехопёрского природного парка // Известия Дагестанского государственного педагогического университета. Естественные и технические науки. – 2010. – № 3 (12). – С. 111-116.

АНТРОПОГЕННОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ГЕОСИСТЕМ ХОЗЯЙСТВА «СЕБРЯКОВСКОЕ»

***Давыдов А.Э., *Косов Д.А., **Джумагазиев Е.Г.**

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
**Волгоградский государственный социально-педагогический университет

Аннотация

Проанализировано антропогенное воздействие на локальные геосистемы на примере хозяйства «Себряковское» находящееся в одной из самой распаханной частей степной зоны Волгоградской области.

Annotation

Analyzed the human impact on the local landscape-for example, agriculture Sebryakovskiy located in one of the most cultivated parts of the steppe zone in Volgograd region.

Ключевые слова. *Локальная геосистема, тип местности, урочище, антропогенное воздействие.*

Keyword. *Local geosystem, type of locality, natural boundary, anthropogenic impact.*

Сильно изменённые и нарушенные ПТК занимают не менее 85% хозяйства, доминируют агроландшафты, на которые приходится не менее 80 %. До четверти пашни это распаханные и развеваемые супеси, покатые склоны, солонцы, каменистые угодья. Поля средних размеров, тянутся вдоль склонов [2; 5].

Пастбища занимают разнотравные, солонцовые, меловые и псаммофитные степи, зачастую находящиеся на разных стадиях деградации растительности. Пастбища занимают 7322 га (19 % хозяйства). В 70-80-х. гг. прошлого века крупнейшие участки выпасов приурочивались к овражно-балочным системам (балки Чаплыжная, Ломовская, Лесная), ГЛП Пенза – Каменск, к окраинам поселений, к псаммофитным и солонцовым степям. Вблизи поселений (хутора Сеничкин, Отруба, Катасонов) отмечена пастбищная дигрессия. Высокий по интенсивности выпас идет вдоль балок Чаплыжной (у х. Сеничкин), Кобылинки, Балобардина (х. Катасонов), Водинской и Петрушкина (х. Отруба) [1; 3]. Вдоль скотопрогонов, вблизи сёл и на расстоянии нескольких сотен метров от них, обычны сбитые полынковые выпасы. Господство полынка обусловлено его плохой поедаемостью скотом и большой репродуктивной способностью [1; 4].

Пастбища удаленные от поселений находятся на типчаковой стадии дигрессии. Более разнообразны пастбища склонов балок. На невыбитых склонах обычны ковыль или типчак, которые заменяются на более влажных участках лугово-степной и луговой растительностью, с включениями корневищных злаковников и лугового разнотравья. Выбитые склоны занимает полынок. Самой большой биологической продуктивностью отличаются пастбища днищ балок. Тут типичны луговые корневищные злаковники с

фрагментами разнотравья. С целинных или залежных сенокосов тальвегов балок собирается сена до 15 ц/г. Травостой тут более сохранный и быстрее вегетирует, из-за хорошего увлажнения и близости грунтовых вод. Сбитые днища балок заняты малосъедобными, несъедобными и сорными травостоями.

Участки пастбищ на песках и супесях расположены на юго-востоке хозяйства, это западная периферия Сергиевских песков. Травостой сильно вытоптан, разрежен, сочных трав мало. Продуктивность травостоя мала – в среднем 1-3 ц/га. Он образован вейником наземным, ковылем Иоанна, полынями белой и песчаной.

Пастбища на солонцах часто приурочены к склонам южной экспозиции. Они отличаются пятнистым характером растительности: чередованием злаковников, образующих густой травостой, с пятнами полыней. Микропонижения – западины и ложбины стока занимают злаковники. Ровные участки занимают полыни. Переходные зоны между злаковыми западинами и солонцами занимают типчак, ромашник, что свидетельствует о пастбищной дигрессии. На сбитых пастбищах преобладают полыни, по западинам – полынок. Видовое разнообразие мало [7; 8].

Малоизменённые ПТК сохранились в долине Медведицы, по эрозионным системам, на покатых склонах. Небольшие участки целины и залежи сохранились у ГЛП «Пенза – Каменск». Частями культурных ландшафтов выделены Государственная лесная полоса, лесополосы. Их площадь на территории хозяйства – 431 га, средняя облесенность – 2% [6, 11].

Селитьба занимает 548 га (ок. 1,5 % площади хозяйства). Это хутора Катасонов (266 га), Зиновьев (13 га), Отруба (79 га), Сеничкин (190 га). Большинство поселений раскинулось вдоль линейно-эрозионных систем. Например, хутор Сеничкин, тянется вдоль балки Чаплыжная, Катасонов – локализован вдоль балки Кобылинка, Отруба – тянется вдоль балки Водинской. После распада СССР и начала рыночных реформ в хозяйстве изменилась структура землепользования. Было выведено из севооборота не менее четверти всей пашни, оставшаяся засевается в основном подсолнечником. Безденежье не дает возможности проводить комплекс мелиоративных мероприятий, не менее четверти лесных полос сгорело в засушливые годы (1998-1999, 2001, 2010). Следовательно, сложившаяся структура природопользования нерациональна и требует оптимизации [12, 13].

Крупнейшие участки слабоизменённых ПТК находятся в пределах балочной, надпойменно-террассовой и пойменной местностей. ПТК разнотравных степей и лугов зачастую подвергаются перевыпасу и находятся на средней или начальной стадиях пастбищной дигрессии (вдали от поселений и мест водопоя КРС и МРС).

Список литературы

1. Князев А.П., Князев Ю.П. Современное состояние агроландшафтов Михайловского района // Вестник студенческого научного общества. Серия: Естественные, точные и технические науки. – Волгоград: Перемена, 2001. – № 16. – С. 88-90.

2. Князев А.П., Князев Ю.П. Экологические проблемы Кумылженского района // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 15-16.

3. Князев Ю.П. Эволюция ландшафтов бассейна Среднего и Нижнего Дона под антропогенным воздействием // Проблемы территориальной организации природы и общества. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2012. – С. 192-194.

4. Князев Ю.П. Геоэкологический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Формирование и реализация экологической политики на региональном уровне. – Ярославль, 2011. – С. 71-77.

5. Князев Ю.П. Оценка антропогенной нарушенности ландшафтов Волгоградской области // География: наука, методика, практика. – М., 2011. – С. 71-73.

6. Князев Ю.П. Эколого-гидрографический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Водные ресурсы, экология и гидрологическая безопасность. – М., 2010. – С. 221-224.

7. Князев Ю.П. Ландшафтный анализ территории средствами ГИС-технологий при планировании хозяйственной деятельности (на примере Нижнего Поволжья) // Системы географических знаний. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2008. – С. 137-140.

8. Князев Ю.П., Князев А.П. Парагенетический ландшафтный анализ природных комплексов Хоперского интразонального ландшафтного подрайона // Экология и экономика. Материалы круглого стола. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2005. – С. 201-205.

9. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное изменение // VII региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2003. – С. 67-68.

10. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное преобразование. Дис. … канд. Геогр. Наук. РГУ, 2003. – 190с.

11. Князев Ю.П. Геоэкологическое состояние гидрографической сети юга Окско-Донской равнины // Поволжский экологический вестник. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2001. – № 8. – С. 26-32.

12. Князев Ю.П., Князев А.П. Картографирование геоэкологических ситуаций в пределах Хоперско-Бузулукской равнины // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 14-15.

13. Ярыгин А.Н., Князев Ю.П., Князев А.П. Морфологическая структура ландшафтов Нижнехопёрского природного парка // Известия Дагестанского государственного педагогического университета. Естественные и технические науки. – 2010. – № 3 (12). – С. 111-116.

ЛОКАЛЬНЫЕ ГЕОСИСТЕМЫ ХОЗЯЙСТВА «ДЁМИНСКОЕ» В ПРЕДЕЛАХ РЕЧНЫХ ДОЛИН

***Давыдов А.Э., *Косов Д.А., ** Кораблина К.А.**

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
**Волгоградский государственный социально-педагогический университет

Аннотация

Проанализировано размещение локальных геосистем на уровне урочищ и пойменно-долинных местностей на примере хозяйства «Дёминское». Показана их зависимость от рельефа, микроклимата, почвенно-растительного покрова и антропогенной деятельности.

Annotation

The placement of local geosystems at the level of tracts and floodplain-valley areas is analyzed on the example of the De-Minskoe farm. Their dependence on topography, microclimate, soil and vegetation cover and anthropogenic activity is shown.

Ключевые слова. *Локальная геосистема, тип местности, урочище, антропогенное воздействие.*

Keyword. *Local geosystem, type of locality, natural boundary, anthropogenic impact.*

В интразональном ландшафте долины р. Бузулук нами описаны следующие местности [8]:

Надпойменно-террасовая местность представлена следующими подтипами:

1. Натеррасовый озерно-луговой с озерами и влажными разнотравными лугами. Крупнейшим водоемом является оз. Ильмень. Влажные луга используются как сенокосы.

2. Натеррассовых остепненных лугов на южных черноземах. Ныне данный подтип отведен под пашню, либо используется в качестве пастбищ.

3. Наложенных на бузулукскую террасу конусах выноса крупных балок. Господствуют разнотравные луга и дубравы. Ныне данный подтип отведен под пашню, либо используется в качестве пастбищ. На конусе выноса балки Швилева был основан хутор Мартыновский, конусе выноса балки Солонцовской – хутор Клейменовский.

4. Натеррассовых песков, возникших при отступлении Донского ледника. Натеррассовые пески находятся севернее хутора Клейменовский. Часть песков закреплена сосновыми лесонасаждениями [1; 3].

Пойменная местность. Определяющими признаками пойменно-луговых ПТК является: породы аллювиального генезиса (пески и супеси); периодическая заполняемость

долины полыми водами; близкое расположение грунтовых вод; господство травянистой луговой растительности. Литогенная основа пойменных ПТК определяется меандрированием Бузулука и периодическим отложением наилка. Молодая пойма формируется на выпуклой стороне меандров из-за отложения руслового аллювия. Более зрелые участки формирует пойменный аллювий.

Высотно в пойме различаются высокая (прирусловая), средняя (центральная) и низкая (притеррассовая) поймы. Каждая из них отличается «своим» увлажнением, где ведущую роль играет водный режим, связанный с высотой и длительностью весеннего паводка, залеганием грунтовых вод, выпадением осадков в теплое время года. По водообеспеченности выделяют остепнённые, сухие, влажные, сырые и болотные ПТК [2; 4].

На недеятельных наносах (участки пойм практически не затопляемые во время половодья) при относительно большой глубине залегания грунтовых вод образовались урочища разнотравных лугов с фациями разнотравно-псаммофитной растительности и сухих разнотравно-злаковых лугов на аллювиальных лугово-черноземных почвах. Местами сохранились урочища дубрав с фациями кустарников и разнотравных лугов [7; 12;13].

Низкую пойму формируют ПТК притеррасных зарастающих озер с переувлажнёнными разнотравно-осоковыми лугами на лугово-болотных почвах [6; 9;10].

Центральную пойму занимают ПТК лугов, озёр и лесов. Пологий рельеф с наносами, близкое залегание водного зеркала ведет высокому фиторазнообразию. Обычны урочища разнотравно-злаково-вейниковых лугов с пойменными озёрами. Для прирусловой поймы обычны ПТК разнотравных лугов на дерновых почвах. В условиях устойчивого увлажнения обычны щучка, осока, клубнекамыш, солодка. При переменном увлажнении – пырей ползучей, мятлик болотный, полевица побегообразующая [5; 8; 11].

Системное отложение ила слоем в несколько сантиметров способствует подавлению многих видов трав и ведет к доминированию корневищных злаков, к которым примешивается борщевик, пижма, щавель, молочай. Умеренный выпас скота ведет уменьшению рослых злаковников (костёр, пырей, тимофеевка), ряда бобовых и разнотравья. Перевыпас у поселений Мартыновское и Клеймёновское привел к доминированию несъедобного разнотравья и сорняков.

Список литературы

1. Князев А.П., Князев Ю.П. Современное состояние агроландшафтов Михайловского района // Вестник студенческого научного общества. Серия: Естественные, точные и технические науки. – Волгоград: Перемена, 2001. – № 16. – С. 88-90.

2. Князев А.П., Князев Ю.П. Экологические проблемы Кумылженского района // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 15-16.

3. Князев Ю.П. Эволюция ландшафтов бассейна Среднего и Нижнего Дона под антропогенным воздействием // Проблемы территориальной организации природы и общества. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2012. – С. 192-194.

4. Князев Ю.П. Геоэкологический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Формирование и реализация экологической политики на региональном уровне. – Ярославль, 2011. – С. 71-77.

5. Князев Ю.П. Оценка антропогенной нарушенности ландшафтов Волгоградской области // География: наука, методика, практика. – М., 2011. – С. 71-73.

6. Князев Ю.П. Эколого-гидрографический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Водные ресурсы, экология и гидрологическая безопасность. – М., 2010. – С. 221-224.

7. Князев Ю.П. Ландшафтный анализ территории средствами ГИС-технологий при планировании хозяйственной деятельности (на примере Нижнего Поволжья) // Системы географических знаний. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2008. – С. 137-140.

8. Князев Ю.П., Князев А.П. Парагенетический ландшафтный анализ природных комплексов Хоперского интразонального ландшафтного подрайона // Экология и экономика. Материалы круглого стола. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2005. – С. 201-205.

9. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное изменение // VII региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2003. – С. 67-68.

10. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное преобразование. Дис. … канд. Геогр. Наук. РГУ, 2003. – 190с.

11. Князев Ю.П. Геоэкологическое состояние гидрографической сети юга Окско-Донской равнины // Поволжский экологический вестник. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2001. – № 8. – С. 26-32.

12. Князев Ю.П., Князев А.П. Картографирование геоэкологических ситуаций в пределах Хоперско-Бузулукской равнины // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 14-15.

13. Ярыгин А.Н., Князев Ю.П., Князев А.П. Морфологическая структура ландшафтов Нижнехопёрского природного парка // Известия Дагестанского государственного педагогического университета. Естественные и технические науки. – 2010. – № 3 (12). – С. 111-116.

АНТРОПОГЕННОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ГЕОСИСТЕМ ХОЗЯЙСТВА «ДЁМИНСКОЕ»

*** Давыдов А.Э., * Косов Д.А., **Фролова А.В.**

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
**Волгоградский государственный социально-педагогический университет

Аннотация

Проанализированы антропогенные изменения локальных геосистем, на примере хозяйства «Дёминское». Показана их зависимость от рельефа, микроклимата, почвенно-растительного покрова и антропогенной деятельности.

Annotation

Anthropogenic changes in local geosystems are analyzed on the example of the Deminskoe farm. Their dependence on topography, microclimate, soil and vegetation cover and anthropogenic activity is shown.

Ключевые слова. *Культурные ландшафты, локальная геосистема, селитьба, пастбища.*

Keyword. *Cultural landscapes, local geosystem, settlements, pastures.*

Равнинный рельеф, благоприятные агроклиматические ресурсы, наличие плодородных черноземов привело к значительной распашке. Распаханы не только пологие склоны, но и крутые, а так же надпойменно-террасовая местность. Не менее 20 % пашни приходится на малопродуктивные земли, 12% пашни смыто. Поля, как правило, оконтурены лесополосами, зачастую одно поле не превышает размеров 1,5 на 0,5 км. Они расположены в шахматном порядке, вблизи эрозионноопасных склонов размещены поперек склона. Овраги и балки окаймлены пашней (например, балки Березовая, Романовская, Дубовская, Репная, Серёжкина, Косая и др.) [7; 9; 13].

Практически вся территория относятся (кроме пойм Бузулука и Паники), к измененным и нарушенным геосистемам. Около 90 % занимают агроландшафты, из них 70% приходится на пашню. Пастбища занимают 17,0 %. Дёминское было опорным центром ВНИАЛМИ на севере нашей области. За истекшие полвека выращен комплекс полезащитных лесонасаждений общей площадью 500 га, облесённость пашни превышает 2,5 % [12].

О структуре эрозионных процессов и о роли в этом человеческого фактора (особенно распашки и пастьбы скота) свидетельствуют схемы внутрихозяйственного землеустройства хозяйства М 1:50 000 за 1950 и 1979 гг. В 1950 г. бузулукские склоны были мало расчленены, в балках Черемуховой, Рихляевской, Иловатка находились дубравы [8; 11].

На схеме внутрихозяйственного землеустройства 1979 г. правый склон долины Бузулука был густо изрезан потяжинами и промоинами. Возникло пять новых оврагов, склон был прорезан до 40 потяжинами. Средняя скорость роста молодых оврагов достигала двух метров в год. Затухание эрозионных процессов происходило там, где проводились противоэрозионные мелиорации. У х. Клейменовский и Мартыновский склоны закреплены фруктовыми садами. Развитие линейно-эрозионных процессов произошло в 60-70-х гг. из-за распашки склоновых земель. В 80-х гг. их забросили, рост линейно-эрозионных систем сократился, но не исчез из-за чрезмерной пастьбы [10].

Пастбища представлены ПТК разнотравных и солонцовых степей в разных стадиях пастбищной дигрессии. В долине Бузулука крупнейшие территории пастбищ тяготеют к натеррасовым остепненным лугам. На пастбища приходится 5094 га или 16,9 %. Основные участки выпасов находятся у сёл (х. Дёминский, Косовский, Клеймёновский, Романовский), вдоль линейно-эрозионных систем (у балок Швилёва, Романовской, Большеголовой, Косой), на песчаных массивах террас Бузулука и Паники. Вдоль скотопрогонов, вблизи сёл и на расстоянии нескольких сотен метров от них, обычны сбитые полынковые выпасы. Господство полынка обусловлено его плохой поедаемостью скотом и большой репродуктивной способностью [1; 4].

Пастбища удаленные от поселений находятся на типчаковой стадии дигрессии. Более разнообразны пастбища склонов балок. На невыбитых склонах обычны ковыль или типчак, которые заменяются на более влажных участках лугово-степной и луговой растительностью, с включениями корневищных злаковников и лугового разнотравья. Выбитые склоны занимает полынок. Самой большой биологической продуктивностью отличаются пастбища днищ балок. Тут типичны луговые корневищные злаковники с фрагментами разнотравья. С целинных или залежных сенокосов тальвегов балок собирается сена до 15 ц/г. Травостой тут более сохранный и быстрее вегетирует, из-за хорошего увлажнения и близости грунтовых вод. Сбитые днища балок заняты малосъедобными, несъедобными и сорными травостоями.

Выпасы на солонцах приурочены к южным склонам балок. Типичны травостои таких солевыносливых растений как полынь и кохия. После распада СССР площадь выпасов выросла из-за забрасывания низко продуктивной пашни. Крупнейшие участки заброшенной пашни обнаружены вблизи поселений и на притерассовых склонах Бузулука и Паники [5; 6].

Селитьбой занято 1012 га (3,5 % от площади хозяйства). Это х. Дёмин-ский (236 га), Бол. Головский (124 га), Бол. Дубовский (81 га), Вихляевский (81 га), Клейменовский (59 га), Косовский (63 га), Мал. Дубовский (73 га), Мартыновский (236 га). Поселения тянутся вдоль линейно-эрозионных систем, в границах склоновой местности. Например, х. Романовский простирается вдоль балки Романовской, х. Бол. Головский — вдоль балки Большеголовской, х Косовский — вдоль балки Косая и т. Д. Байрачные леса сведены, существенные площади приходятся под сады (у х. Мартыновского, Клеймёновского, Деминского). Поселения Мартыновский и Клейменовский изначально располагались на

конусах выноса балок в долине Бузулука. Позже они расширились за счёт пойменной местности. Околицы хуторов используются как выпасы.

По данным Комитета по земельным ресурсам и землеустройству за последние четверть века площадь пашни в хозяйстве сократилась на 3.5 тыс. га, однако натурные наблюдения свидетельствуют, что площадь пашни сократилась значительно больше. Крупнейшие кластеры заброшенной пашни находятся в границах фермерских хозяйств, зачастую искажающих действительные сведения. В основном пашутся только продуктивные земли у сел или асфальтированных дорог. В настоящее время фиксируется рост распашки.

Крупнейшие участки зональных ПТК (2.5-4 га) встречаются у прибалочных территорий склона р. Бузулук. Из всех линейно-эрозионных систем бузукулского склона лишь в балке Черёмуховой локализованы значительные площади байрачных лесов. Иные линейно-эрозионные системы не обладают дубравами, в них произрастают кустарники. Но наличие малых водотоков подтверждает, что это вторично степные балки с вырубленными буераками [1; 4].

Крупнейшие участки квазиприродных геосистем локализованы в долинах Бузулука и Паники. Это луга, пойменные леса, ГЛФ (у х. Мартыновский), натеррасовые пески. Культурные ландшафты представлены садами (х. Клейменовский, в долине р. Паника, у х. Бол. Дубовский), насаждениями сосновых боров [2; 3].

Список литературы

1. Князев А.П., Князев Ю.П. Современное состояние агроландшафтов Михайловского района // Вестник студенческого научного общества. Серия: Естественные, точные и технические науки. – Волгоград: Перемена, 2001. – № 16. – С. 88-90.

2. Князев А.П., Князев Ю.П. Экологические проблемы Кумылженского района // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 15-16.

3. Князев Ю.П. Эволюция ландшафтов бассейна Среднего и Нижнего Дона под антропогенным воздействием // Проблемы территориальной организации природы и общества. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2012. – С. 192-194.

4. Князев Ю.П. Геоэкологический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Формирование и реализация экологической политики на региональном уровне. – Ярославль, 2011. – С. 71-77.

5. Князев Ю.П. Оценка антропогенной нарушенности ландшафтов Волгоградской области // География: наука, методика, практика. – М., 2011. – С. 71-73.

6. Князев Ю.П. Эколого-гидрографический анализ водных ландшафтов бассейна Среднего Дона // Водные ресурсы, экология и гидрологическая безопасность. – М., 2010. – С. 221-224.

7. Князев Ю.П. Ландшафтный анализ территории средствами ГИС-технологий при планировании хозяйственной деятельности (на примере Нижнего Поволжья) // Системы географических знаний. – Иркутск: Изд-во Ин-та географии СО РАН, 2008. – С. 137-140.

8. Князев Ю.П., Князев А.П. Парагенетический ландшафтный анализ природных комплексов Хоперского интразонального ландшафтного подрайона // Экология и экономика. Материалы круглого стола. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2005. – С. 201-205.

9. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное изменение // VII региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2003. – С. 67-68.

10. Князев Ю.П. Ландшафты южной части Окско-Донской равнины и их антропогенное преобразование. Дис. … канд. Геогр. Наук. РГУ, 2003. – 190с.

11. Князев Ю.П. Геоэкологическое состояние гидрографической сети юга Окско-Донской равнины // Поволжский экологический вестник. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2001. – № 8. – С. 26-32.

12. Князев Ю.П., Князев А.П. Картографирование геоэкологических ситуаций в пределах Хоперско-Бузулукской равнины // V региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области. – Волгоград: Перемена, 2001. – С. 14-15.

13. Ярыгин А.Н., Князев Ю.П., Князев А.П. Морфологическая структура ландшафтов Нижнехопёрского природного парка // Известия Дагестанского государственного педагогического университета. Естественные и технические науки. – 2010. – № 3 (12). – С. 111-116.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРОТОНИРОВАНИЯ МЕТИЛЕНЦИКЛОПЕНТАНА МЕТОДОМ MNDO

Шишков Д.А.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования метиленциклопентана классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция

экзотермична и имеет без барьерный характер. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α-углеродный атом равен 504 кДж/моль. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

Summary

For the first time it is researched of classical quantum chemical method MNDO of modeling mechanism protonizataion of methylencyclopentane – monomer of cationic polymerization. Showing, that he considerate some self usual mechanism connection proton to olefin corresponding Morkovnikov's rule. Reaction exothermic and carry without a barrier character. Prize energy in result of reaction – 504 kDg/mol.

***Ключевые слова**: механизм протонирования, метод MNDO, метиленциклопентан, правило Марковникова.*

***Keywords**: mechanism protonizataion, method MNDO, methylencyclopentane, Markovnikov's rule.*

Цель настоящей работы – квантово-химическое исследование механизма протонирования метиленциклопентана классическим полуэмпирическим методом MNDO .

Методическая часть

Используя классические представления о механизме инициирования катионной полимеризации в присутствии различных каталитических комплексов [1-3], для изучения механизма протонирования был выбран квантовохимический поуэмпирическиий метод MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [4-5], в связи с тем, что этот метод специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … C_6H_{10} (метиленциклопентан) 17 атомов, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M-мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$

Для исследования механизма протонирования метиленциклопентана выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с метиленциклопентаном, по методике, аналогичной [8-17]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. По полученным данным значений энергий вдоль координат реакции строилась эквипотенциальная поверхность взаимодействий протона метиленциклопентаном (см. рис. 4.). Исходная модель атаки протона молекулы метиленциклопентана показана на рис. 1.

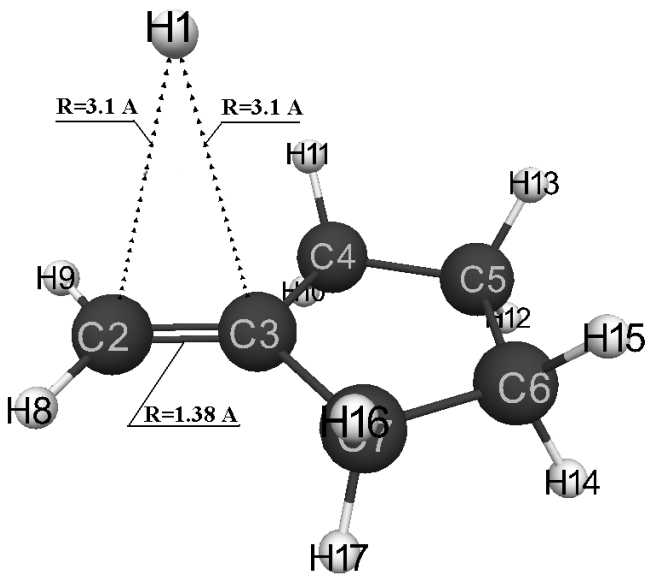

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы метиленциклопентана

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt [6].

Результаты расчетов

Значения энергий молекулярной системы H^+ … C_6H_{10} вдоль координат реакций R_{H1C2} и R_{H1C3} показаны в таблице 1. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома метиленциклопентана (C_2) и разрыва двойной связи метиленциклопентана представлена на рис. 2. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома метиленциклопентана (C_3) и разрыва двойной связи $C_2 = C_3$ показана на рис. 3. Заряды на атомах конечных моделей сформированных карбкатионнов представлены в табл. 2. Изменение общей энергии при протонизации метиленциклопентана показано в табл. 1, из которой видно, что на всем пути движения протона (инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы H^+ … C_6H_{10} (E_0) неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона (см. рис. 4) и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β- углеродные атомы метиленциклопентана. Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 89 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β-углеродного атома, что находится в полном соответствии с классическим правилом Марковникова. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α- углеродный атом равен 504 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 415 кДж/моль.

Более того, по $pKa=42{,}11-147{,}18q_{max}^{H+}$[7] ($q_{max}^{H+}$ = +0,11- максимальный заряд на атоме водорода, pKa- универсальный показатель кислотности), находим значение кислотной силы сформированных карбкатионов, равное pKa = 26

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы метиленциклопентана свидетельствует о том, что

механизм протонирования катионной полимеризации метиленциклопентана идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования метиленциклопентана квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

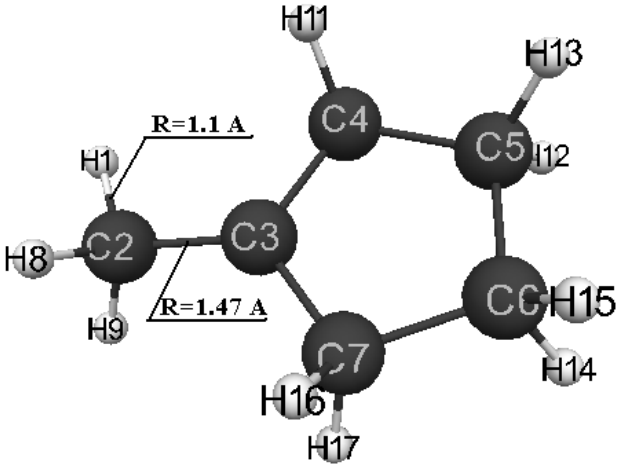

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома метиленциклопентана (C_2)

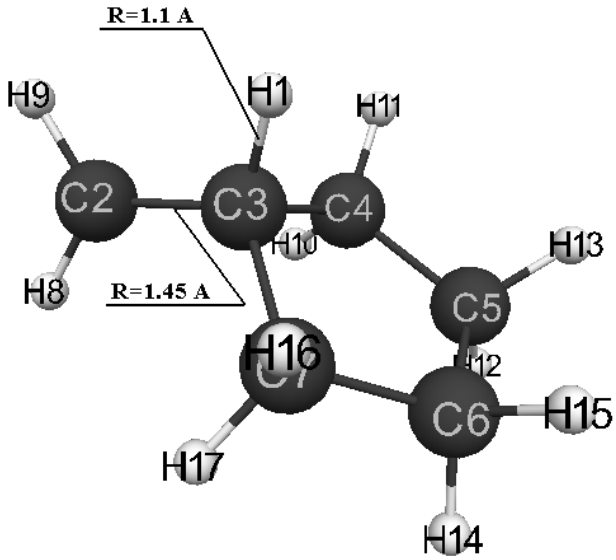

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома метиленциклопентана (C_3)

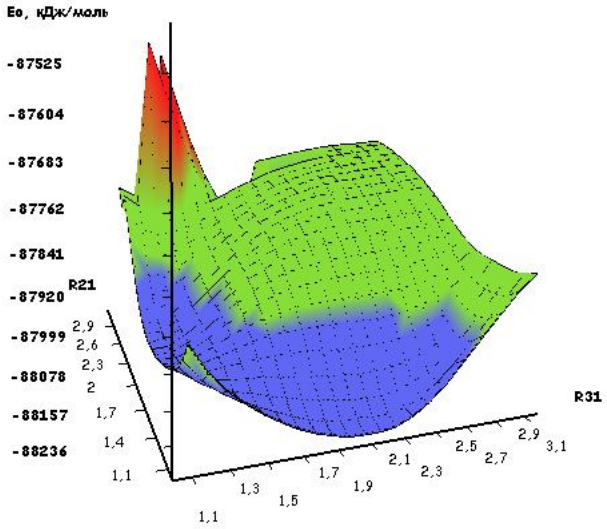

Рис. 4 – Потенциальная поверхность энергий взаимодействий протона с метиленциклопентаном

Таблица 1 – Изменение общей энергии молекулярной системы H^+ ... C_6H_{10} – E_o (в кДж/моль) вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} (в А)

1C3	R_{H1C2}										
	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
3,1	0	-3	-8	-16	-24	-32	-43	-56	-71	-87	-105
3,0	-3	-6	-11	-19	-27	-35	-45	-58	-74	-92	-113
2,9	-6	-8	-14	-22	-29	-37	-48	-61	-77	-95	-119
2,8	-8	-14	-19	-24	-32	-40	-50	-63	-79	-100	-121
2,7	-11	-16	-22	-27	-35	-45	-56	-69	-85	-103	-127
2,6	-16	-22	-27	-32	-40	-48	-58	-71	-87	-105	-129
2,5	-22	-336	-32	-40	-45	-56	-63	-77	-92	-111	-132
2,4	-29	-329	-40	-48	-53	-61	-71	-85	-98	-116	-137
2,3	-37	-321	-50	-56	-63	-71	-82	-92	-105	-121	-142
2,2	-45	-308	-61	-69	-77	-85	-92	-103	-116	-132	-150
2,1	-53	-289	-74	-85	-92	-100	-108	-119	-129	-142	-161
2,0	-250	-266	-92	-100	-111	-119	-127	-134	-145	-158	-174
1,9	-208	-234	-108	-121	-132	-142	-150	-158	-168	-179	-192
1,8	-153	-190	-129	-145	-158	-168	-176	-184	-195	-203	-216
1,7	-79	-129	-148	-168	-187	-200	-210	-218	-226	-234	-242
1,6	18	-50	-161	-192	-216	-231	-245	-255	-263	-268	-276
1,5	131	49	-168	-210	-242	-266	-281	-292	-300	-308	-313
1,4	249	165	-171	-221	-263	-295	-316	-329	-339	-347	-350
1,3	-148	286	-166	-224	-273	-313	-342	-363	-373	-381	-386
1,2	-140	-190	-150	-205	-263	-313	-352	-381	-397	-405	-407
1,1	-116	-161	-119	-168	-224	-281	-329	-368	-394	-410	-415

Продолжение таблицы 1

R_{H1C3}	R_{H1C2}									
	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
3,1	-127	-145	-161	-174	-179	-179	-179	-179	-174	-155
3,0	-134	-161	-184	-208	-224	-234	-237	-234	-224	-195
2,9	-142	-171	-200	-229	-258	-279	-289	-289	-276	-245
2,8	-148	-179	-210	-247	-281	-313	-334	-342	-331	-297
2,7	-153	-184	-218	-258	-297	-336	-368	-386	-384	-352
2,6	-155	-187	-224	-266	-308	-352	-392	-418	-426	-405
2,5	-161	-192	-229	-271	-316	-363	-407	-441	-460	-447
2,4	-163	-195	-231	-273	-321	-368	-415	-455	-481	-478
2,3	-168	-197	-234	-276	-321	-371	-421	-463	-491	-497
2,2	-174	-203	-237	-276	-323	-371	-421	-465	-491	-504
2,1	-182	-210	-242	-279	-323	-371	-418	-463	-486	-504
2,0	-195	-218	-247	-284	-323	-368	-415	-457	-491	-502
1,9	-208	-229	-255	-287	-326	-365	-410	-449	-481	-491
1,8	-229	-247	-268	-297	-329	-365	-405	-441	-470	-478
1,7	-253	-268	-287	-308	-334	-365	-399	-431	-455	-460
1,6	-284	-295	-308	-323	-344	-368	-394	-421	-436	-436
1,5	-318	-323	-331	-342	-358	-373	-392	-407	-418	-410
1,4	-355	-358	-360	-365	-371	-378	-389	-397	-394	-378
1,3	-386	-386	-386	-384	-384	-384	-384	-381	-368	-342
1,2	-410	-407	-402	-397	-389	-381	-371	-358	-334	-295
1,1	-413	-410	-402	-392	-378	-363	-342	-318	-281	-229

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому метиленциклопентана

Таблица 2 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому метиленциклопентана

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,70	2,70	2,60	2,60	2,60
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(5)-C(4)	1,54	1,54	1,54	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(6)-C(5)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54
C(7)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(7)-C(6)	1,54	1,54	1,54	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(10)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(11)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(12)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Продолжение таблицы 2

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-H(1)	2,50	2,50	2,50	2,40	2,40	2,40	2,30	2,30	2,30	2,20	2,10
C(3)-C(2)	1,41	1,41	1,42	1,42	1,43	1,44	1,45	1,46	1,48	1,48	1,48
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,50	1,50	1,50	1,50
C(5)-C(4)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(6)-C(5)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,55	1,55	1,55	1,55
C(7)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,50	1,50	1,50	1,50
C(7)-C(6)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11
H(10)-C(4)	1,11	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(11)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,12	1,12	1,12
H(12)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,12	1,12	1,12
H(17)-C(7)	1,11	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12

Таблица 3 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому метиленциклопентана

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	76	76	75	79	83	82	86	90
C(4)-C(3)-C(2)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125
C(5)-C(4)-C(3)	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107
C(6)-C(5)-C(4)	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108
C(7)-C(3)-C(2)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125
C(7)-C(6)-C(5)	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108
H(8)-C(2)-C(3)	123	123	123	123	123	122	122	122	122	122
H(9)-C(2)-C(3)	123	123	123	123	123	122	122	122	122	122
H(10)-C(4)-C(3)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(11)-C(4)-C(3)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(12)-C(5)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	110	110	110
H(13)-C(5)-C(4)	111	111	110	110	110	110	110	110	110	110
H(14)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(3)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(17)-C(7)-C(3)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110

Продолжение таблицы 3

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	89	93	97	95	100	104	102	107	112	110	108
C(4)-C(3)-C(2)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125
C(5)-C(4)-C(3)	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107
C(6)-C(5)-C(4)	108	108	108	108	108	108	107	107	107	107	107
C(7)-C(3)-C(2)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125
C(7)-C(6)-C(5)	108	108	108	108	108	108	107	107	107	107	107
H(8)-C(2)-C(3)	122	121	121	120	119	118	117	115	113	112	111
H(9)-C(2)-C(3)	122	121	121	120	119	118	117	115	113	112	111
H(10)-C(4)-C(3)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(11)-C(4)-C(3)	111	111	111	111	111	111	111	111	110	110	110
H(12)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(13)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(14)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(3)	111	111	111	111	111	111	111	111	110	110	110
H(17)-C(7)-C(3)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110

Таблица 4 – Изменение зарядов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому метиленциклопентана

Атом	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)	0,559	0,544	0,526	0,507	0,485	0,468	0,451	0,424	0,403	0,381
C(2)	0,058	0,060	0,063	0,067	0,071	0,051	0,030	0,032	0,007	-0,019
C(3)	-0,053	-0,048	-0,043	-0,037	-0,030	-0,003	0,026	0,040	0,074	0,110
C(4)	-0,010	-0,011	-0,013	-0,016	-0,018	-0,021	-0,025	-0,028	-0,034	-0,039
C(5)	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025
C(6)	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025	-0,025
C(7)	-0,010	-0,011	-0,013	-0,016	-0,018	-0,021	-0,025	-0,028	-0,034	-0,039
H(8)	0,082	0,084	0,086	0,088	0,090	0,091	0,092	0,095	0,096	0,097
H(9)	0,082	0,084	0,086	0,088	0,090	0,091	0,092	0,095	0,096	0,097
H(10)	0,065	0,066	0,068	0,069	0,069	0,071	0,073	0,074	0,076	0,079
H(11)	0,028	0,030	0,032	0,034	0,036	0,040	0,044	0,047	0,052	0,057
H(12)	0,048	0,048	0,049	0,050	0,050	0,050	0,050	0,051	0,051	0,052
H(13)	0,029	0,030	0,031	0,032	0,034	0,036	0,038	0,039	0,041	0,043
H(14)	0,048	0,048	0,049	0,049	0,050	0,050	0,050	0,051	0,051	0,052
H(15)	0,029	0,030	0,031	0,033	0,034	0,036	0,038	0,039	0,041	0,043
H(16)	0,028	0,030	0,032	0,034	0,036	0,040	0,044	0,047	0,052	0,057
H(17)	0,065	0,066	0,068	0,068	0,069	0,071	0,073	0,074	0,076	0,079

Продолжение таблицы 4

Атом	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)	0,349	0,324	0,300	0,264	0,240	0,217	0,186	0,168	0,152	0,078	0,065
C(2)	-0,020	-0,048	-0,074	-0,074	-0,095	-0,110	-0,100	-0,103	-0,097	-0,079	-0,059
C(3)	0,131	0,172	0,213	0,237	0,275	0,309	0,325	0,347	0,363	0,371	0,365
C(4)	-0,044	-0,051	-0,058	-0,064	-0,072	-0,079	-0,083	-0,089	-0,094	-0,096	-0,096
C(5)	-0,026	-0,026	-0,026	-0,027	-0,027	-0,028	-0,028	-0,029	-0,029	-0,029	-0,029
C(6)	-0,026	-0,026	-0,026	-0,027	-0,027	-0,028	-0,028	-0,028	-0,029	-0,029	-0,029
C(7)	-0,044	-0,051	-0,058	-0,064	-0,072	-0,079	-0,083	-0,089	-0,094	-0,098	-0,098
H(8)	0,100	0,101	0,102	0,103	0,102	0,099	0,098	0,093	0,087	0,108	0,108
H(9)	0,100	0,101	0,102	0,103	0,102	0,099	0,098	0,093	0,087	0,107	0,106
H(10)	0,081	0,085	0,088	0,091	0,095	0,099	0,102	0,105	0,107	0,109	0,109
H(11)	0,061	0,067	0,074	0,078	0,085	0,091	0,095	0,100	0,104	0,109	0,110
H(12)	0,052	0,053	0,054	0,055	0,056	0,056	0,057	0,058	0,058	0,058	0,058
H(13)	0,044	0,046	0,048	0,050	0,052	0,053	0,054	0,056	0,057	0,058	0,058
H(14)	0,052	0,053	0,054	0,055	0,056	0,056	0,057	0,058	0,058	0,058	0,058
H(15)	0,044	0,046	0,048	0,050	0,052	0,053	0,055	0,056	0,057	0,058	0,058
H(16)	0,061	0,067	0,074	0,078	0,085	0,091	0,095	0,100	0,104	0,108	0,107
H(17)	0,081	0,085	0,088	0,091	0,095	0,099	0,102	0,105	0,107	0,108	0,107

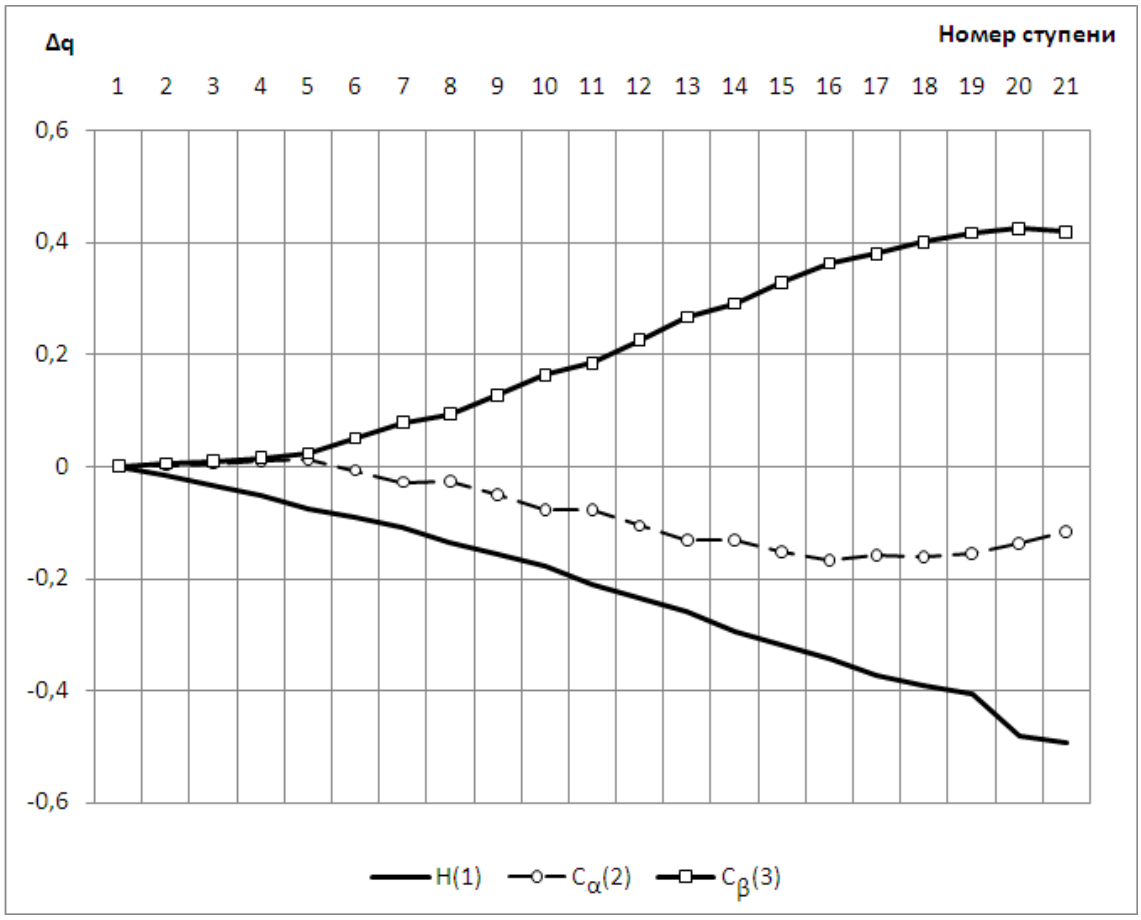

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому метиленциклопентана

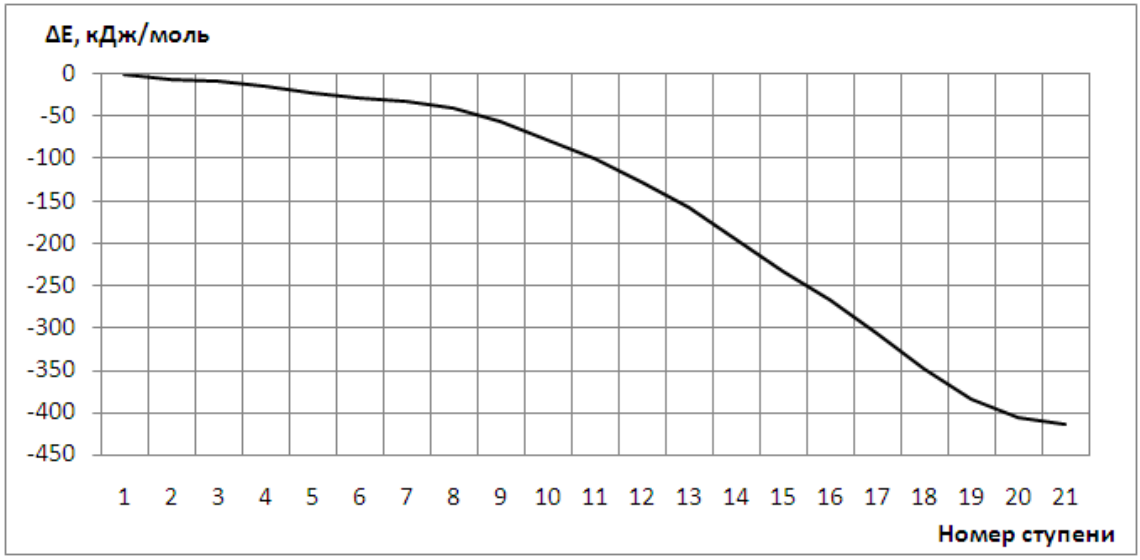

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому метиленциклопентана

Таблица 5 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому метиленциклопентана

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	3,00	3,00	2,90	2,90	2,90	2,90	2,80	2,70
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(5)-C(4)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(6)-C(5)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54
C(7)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(7)-C(6)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(10)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(11)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(12)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Продолжение таблицы 5

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20	2,20	2,20	2,10	2,10	2,10	2,10
C(3)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-C(2)	1,40	1,41	1,41	1,42	1,42	1,43	1,43	1,44	1,45	1,46	1,46
C(4)-C(3)	1,52	1,53	1,53	1,53	1,53	1,54	1,54	1,55	1,55	1,56	1,59
C(5)-C(4)	1,55	1,55	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54
C(6)-C(5)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54
C(7)-C(3)	1,52	1,53	1,53	1,53	1,53	1,54	1,54	1,55	1,55	1,56	1,57
C(7)-C(6)	1,55	1,55	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(10)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(11)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(12)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Таблица 6 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому метиленциклопентана

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	72	68	68	64	59	55	55	54
C(4)-C(3)-C(2)	125	125	125	125	125	125	125	124	124	124
C(5)-C(4)-C(3)	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107
C(6)-C(5)-C(4)	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108
C(7)-C(3)-C(2)	125	125	125	125	125	125	125	124	124	124
C(7)-C(6)-C(5)	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108
H(8)-C(2)-C(3)	123	123	123	123	123	123	123	123	123	122
H(9)-C(2)-C(3)	123	123	123	123	123	123	123	123	123	122
H(10)-C(4)-C(3)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(11)-C(4)-C(3)	111	111	111	111	111	112	112	112	112	112
H(12)-C(5)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(13)-C(5)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	110
H(14)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(3)	111	111	111	111	111	112	112	112	112	112
H(17)-C(7)-C(3)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110

Продолжение таблицы 6

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	54	53	52	51	51	47	43	42	38	34	30
C(4)-C(3)-C(2)	124	124	123	123	123	122	121	120	119	117	111
C(5)-C(4)-C(3)	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107
C(6)-C(5)-C(4)	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108	109
C(7)-C(3)-C(2)	124	124	123	123	123	122	121	120	119	117	115
C(7)-C(6)-C(5)	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108
H(8)-C(2)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	123
H(9)-C(2)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	121
H(10)-C(4)-C(3)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	111
H(11)-C(4)-C(3)	112	112	112	111	111	111	111	111	111	110	108
H(12)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(13)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(14)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(3)	112	112	112	111	111	111	111	111	111	110	109
H(17)-C(7)-C(3)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	111	111

Таблица 7 – Изменение зарядов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому метиленциклопентана

Атом	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)	0,559	0,544	0,539	0,534	0,515	0,509	0,502	0,495	0,470	0,443
C(2)	0,058	0,060	0,078	0,099	0,106	0,130	0,157	0,187	0,204	0,223
C(3)	-0,053	-0,048	-0,063	-0,079	-0,076	-0,095	-0,115	-0,137	-0,140	-0,143
C(4)	-0,010	-0,011	-0,011	-0,011	-0,012	-0,012	-0,011	-0,009	-0,009	-0,008
C(5)	-0,025	-0,025	-0,026	-0,026	-0,026	-0,027	-0,028	-0,029	-0,028	-0,028
C(6)	-0,025	-0,025	-0,026	-0,026	-0,026	-0,027	-0,028	-0,029	-0,028	-0,028
C(7)	-0,010	-0,011	-0,011	-0,011	-0,012	-0,012	-0,010	-0,009	-0,009	-0,008
H(8)	0,082	0,084	0,085	0,086	0,088	0,090	0,091	0,092	0,094	0,096
H(9)	0,082	0,084	0,085	0,086	0,088	0,090	0,091	0,092	0,094	0,096
H(10)	0,065	0,066	0,067	0,067	0,067	0,066	0,065	0,063	0,062	0,061
H(11)	0,028	0,030	0,029	0,028	0,030	0,030	0,029	0,029	0,031	0,032
H(12)	0,048	0,048	0,049	0,050	0,051	0,052	0,053	0,053	0,053	0,053
H(13)	0,029	0,030	0,029	0,028	0,030	0,029	0,028	0,028	0,030	0,032
H(14)	0,048	0,048	0,049	0,050	0,051	0,052	0,052	0,053	0,053	0,053
H(15)	0,029	0,030	0,029	0,028	0,030	0,029	0,029	0,028	0,030	0,033
H(16)	0,028	0,030	0,029	0,028	0,030	0,030	0,029	0,029	0,031	0,032
H(17)	0,065	0,066	0,067	0,067	0,067	0,066	0,065	0,063	0,062	0,061

Продолжение таблицы 7

Атом	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)	0,413	0,381	0,348	0,313	0,278	0,260	0,241	0,208	0,190	0,171	0,098
C(2)	0,244	0,267	0,291	0,316	0,340	0,390	0,436	0,456	0,492	0,520	0,518
C(3)	-0,146	-0,148	-0,150	-0,150	-0,149	-0,180	-0,206	-0,198	-0,213	-0,218	-0,210
C(4)	-0,007	-0,006	-0,004	-0,003	-0,001	0,004	0,008	0,010	0,012	0,014	0,049
C(5)	-0,027	-0,026	-0,025	-0,025	-0,024	-0,023	-0,023	-0,022	-0,022	-0,023	-0,024
C(6)	-0,027	-0,026	-0,025	-0,025	-0,024	-0,023	-0,023	-0,022	-0,022	-0,022	-0,023
C(7)	-0,007	-0,006	-0,004	-0,003	-0,001	0,004	0,009	0,010	0,012	0,010	0,022
H(8)	0,098	0,100	0,102	0,104	0,106	0,106	0,106	0,108	0,108	0,108	0,107
H(9)	0,098	0,100	0,102	0,104	0,106	0,106	0,106	0,108	0,108	0,107	0,106
H(10)	0,060	0,058	0,056	0,054	0,052	0,046	0,041	0,038	0,033	0,029	0,026
H(11)	0,034	0,036	0,038	0,040	0,041	0,041	0,041	0,043	0,044	0,046	0,055
H(12)	0,052	0,052	0,051	0,051	0,050	0,049	0,049	0,048	0,047	0,047	0,049
H(13)	0,034	0,036	0,038	0,040	0,041	0,042	0,042	0,043	0,044	0,045	0,051
H(14)	0,052	0,052	0,051	0,051	0,050	0,049	0,048	0,048	0,047	0,046	0,047
H(15)	0,035	0,036	0,038	0,040	0,041	0,042	0,042	0,044	0,044	0,045	0,049
H(16)	0,034	0,036	0,038	0,040	0,041	0,041	0,041	0,043	0,044	0,046	0,053
H(17)	0,060	0,058	0,056	0,054	0,052	0,046	0,040	0,038	0,033	0,029	0,027

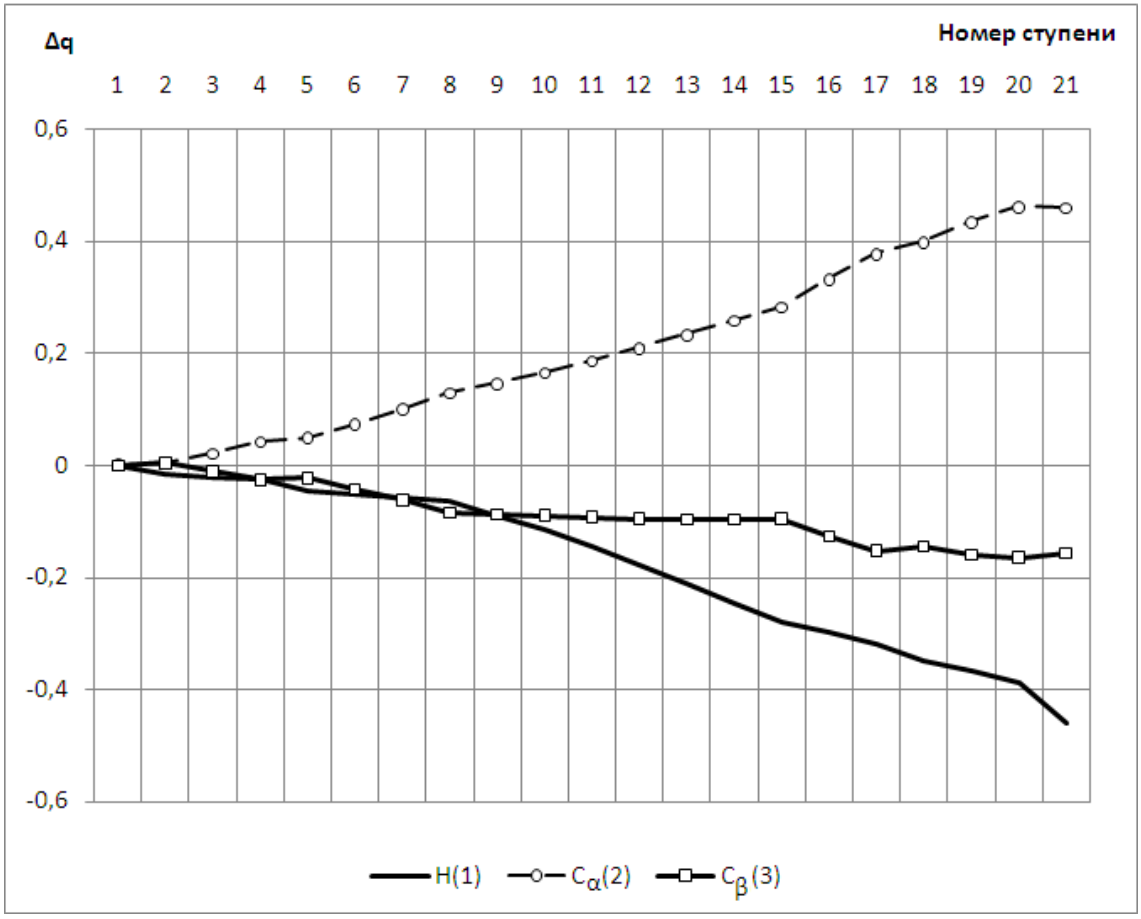

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому метиленциклопентана

Список литературы

1. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов /Дж. Кеннеди. – Изд-во «Мир»: М., 1978. – 431 с.
2. Сангалов, Ю. А. Полимеры и сополимеры 4-метилпентена-1 / Ю. А. Сангалов, К. С. Минскер. – Уфа, 2001. – 381 с.
3. Бабкин В.А. Квантовохимический аспект катионной полимеризации олефинов / В.А. Бабкин, Г.Е. Заиков, К.С. Минскер. – Изд-во «Гилем»: Уфа, 1996. – 182 с.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
7. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.

8. Бабкин В.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тетраметилстирола методом AB INITIO. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Титова Е.С. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – С. 22-28.
9. Бабкин В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации 1-метилен-4-винилциклогексана. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Овчарова В.А., Пристансков А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – № 4 (199). – С. 43-47.
10. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 164-170.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 170-186.
12. Овчарова В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации аллилциклогексана. / Овчарова В.А., Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Фомичёв В.Т., Федунов Р.Г., Стоянов О.В., Заиков Г.Е., Сангалов Ю.А. // В сборнике: Состояние, проблемы и перспективы развития социально-ориентированного строительного комплекса на региональном уровне. Материалы IV Всероссийской научно-технической интернет-конференции, посвящённой 15-летию Себряковского филиала ВолгГТУ. – 2017. – С. 116-129.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – № 4 (125). – С. 5-6.
14. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции. – 2017. – С. 17-22.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 107-112.
16. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // В сборнике:

Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 30-36.
17. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 36-42.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРОТОНИРОВАНИЯ 4-ВИНИЛЦИКЛОГЕКСЕНА МЕТОДОМ MNDO

Цыканов А.В.

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования 4-винилциклогексена классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция экзотермична и имеет без барьерный характер. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α-углеродный атом равен 496 кДж/моль. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

Summary

For the first time it is researched of classical quantum chemical method MNDO of modeling mechanism protonizataion of 4-vinylcyclohexene – monomer of cationic polymerization. Showing, that he considerate some self usual mechanism connection proton to olefin corresponding Morkovnikov's rule. Reaction exothermic and carry without a barrier character. Prize energy in result of reaction – 496 kDg/mol.

***Ключевые слова**: механизм протонирования, метод MNDO, 4-винилциклогексен, правило Марковникова.*

***Keywords**: mechanism protonizataion, method MNDO, 4-vinylcyclohexene, Markovnikov's rule.*

Цель настоящей работы – квантово-химическое исследование механизма протонирования 4-винилциклогексена классическим полуэмпирическим методом MNDO .

Методическая часть

Используя классические представления о механизме инициирования катионной полимеризации в присутствии различных каталитических комплексов [1-3], для изучения

механизма протонирования был выбран квантовохимический поуэмпирическиий метод MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [4-5], в связи с тем, что этот метод специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … C_8H_{13} (4-винилциклогексен) 22 атома, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M-мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$.

Для исследования механизма протонирования 4-винилциклогексена выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с 4-винилциклогексеном, по методике, аналогичной [8-17]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. По полученным данным значений энергий вдоль координат реакции строилась эквипотенциальная поверхность взаимодействий протона 4-винилциклогексеном (см. рис. 4.). Исходная модель атаки протона молекулы 4-винилциклогексена показана на рис. 1.

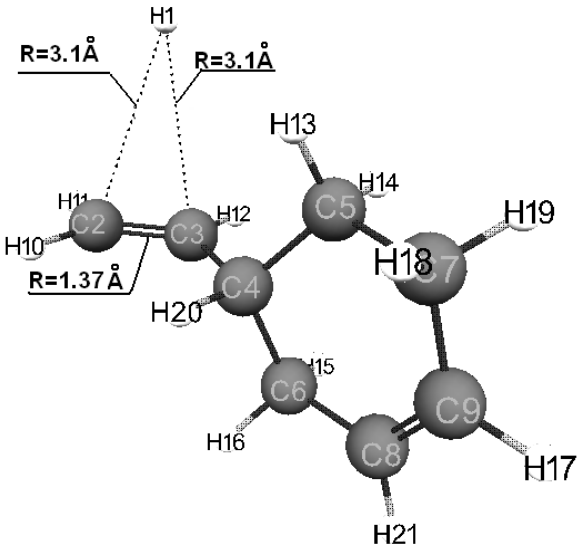

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы 4-винилциклогексена

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt[6].

Результаты расчетов

Значения энергий молекулярной системы H^+ … C_8H_{13} вдоль координат реакций R_{H1C2} и R_{H1C3} показаны в таблице 1. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома 4-винилциклогексена (C_2) и разрыва двойной связи 4-винилциклогексена представлена на рис. 2. Конечная структура

сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома 4-винилциклогексена (C_3) и разрыва двойной связи $C_2 = C_3$ показана на рис. 3. Заряды на атомах конечных моделей сформированных карбкатионнов представлены в табл. 2. Изменение общей энергии при протонизации 4-винилциклогексена показано в табл. 1, из которой видно, что на всем пути движения протона (инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы $H^+ \ldots C_8H_{13}$ (E_0) неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона (см. рис. 4) и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β- углеродные атомы 4-винилциклогексена. Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 60 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β-углеродного атома, что находится в полном соответствии с классическим правилом Марковникова. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α- углеродный атом равен 496 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 436 кДж/моль.

Более того, по $pKa=42{,}11-147{,}18q_{max}^{H+}$[7] ($q_{max}^{H+}$ = +0,108- максимальный заряд на атоме водорода, pKa- универсальный показатель кислотности), находим значение кислотной силы сформированных карбкатионов, равное pKa = 26.

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы 4-винилциклогексена свидетельствует о том, что механизм протонирования катионной полимеризации 4-винилциклогексена идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования 4-винилциклогексена квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

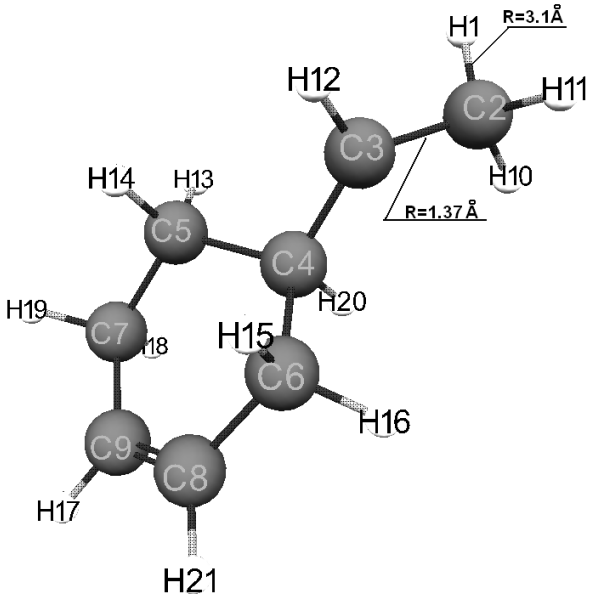

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома 4-винилциклогексена (C_2)

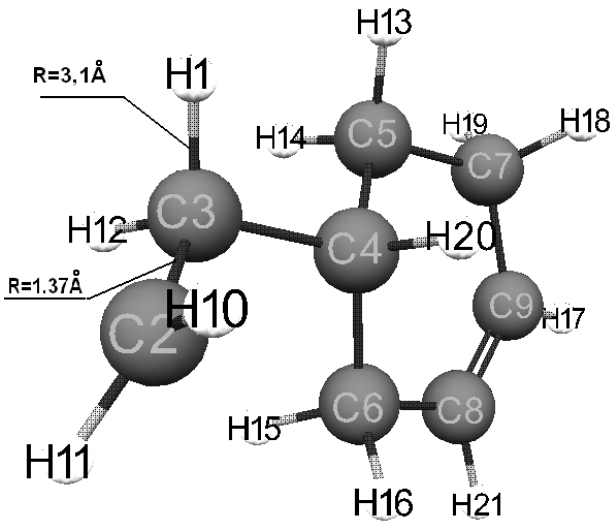

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома 4-винилциклогексена (C_3)

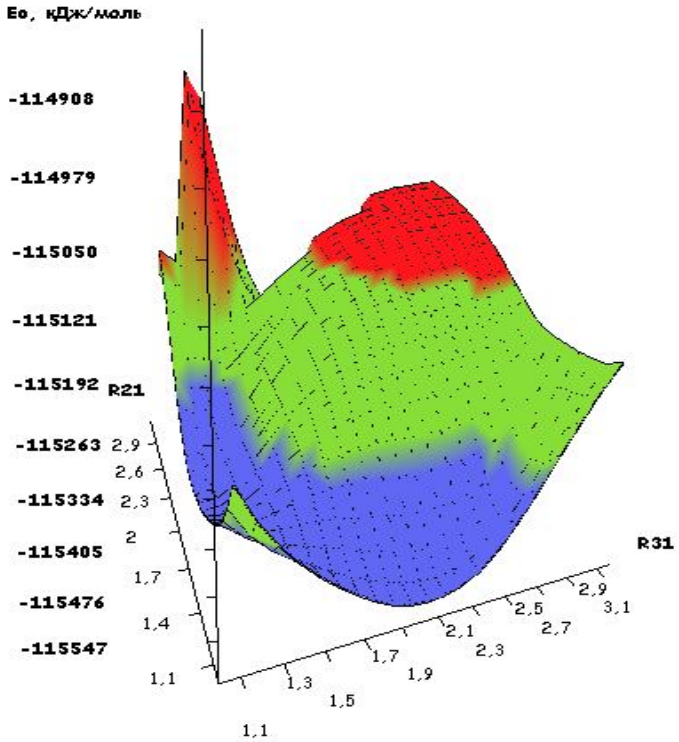

Рис. 4 – Потенциальная поверхность энергий взаимодействий протона с 4-винилциклогексеном

Таблица 1 – Изменение общей энергии молекулярной системы H^+ ... C_8H_{13} – E_o (в кДж/моль) вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} (в А)

R_{H1C3}	R_{H1C2}										
	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
3,1	0	-3	-8	-13	-21	-29	-39	-52	-66	-81	-100
3,0	-3	-8	-10	-16	-24	-32	-42	-55	-68	-87	-105
2,9	-8	-10	-13	-18	-26	-34	-45	-58	-71	-89	-110
2,8	-10	-16	-18	-24	-29	-37	-47	-60	-76	-92	-115
2,7	-18	-21	-24	-29	-34	-42	-52	-63	-79	-97	-118
2,6	-24	-26	-32	-34	-39	-47	-55	-68	-81	-100	-121
2,5	-362	-34	-39	-42	-47	-55	-63	-74	-87	-105	-126
2,4	-357	-357	-50	-52	-58	-63	-71	-81	-95	-110	-131
2,3	-349	-352	-60	-66	-68	-76	-81	-92	-102	-118	-137
2,2	-339	-341	-76	-79	-84	-89	-95	-105	-115	-129	-144
2,1	-325	-331	-92	-97	-102	-108	-113	-121	-129	-142	-157
2,0	-305	-312	-315	-118	-123	-129	-134	-142	-150	-160	-173
1,9	-278	-291	-291	-142	-150	-155	-160	-165	-173	-181	-192
1,8	-236	-257	-263	-165	-176	-184	-192	-197	-202	-210	-218
1,7	-173	-210	-220	-192	-207	-218	-226	-231	-236	-242	-249
1,6	-81	-142	-163	-215	-236	-252	-263	-270	-276	-281	-286
1,5	37	-42	-81	-234	-265	-286	-302	-312	-318	-323	-325
1,4	165	79	26	-247	-286	-315	-336	-349	-360	-365	-368
1,3	-197	210	150	-247	-297	-336	-365	-383	-394	-402	-404
1,2	-189	-131	-176	-231	-286	-336	-373	-402	-417	-425	-428
1,1	-163	-108	-144	-194	-249	-305	-352	-391	-417	-431	-436

Продолжение таблицы 1

R_{H1C3}	R_{H1C2}									
	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
3,1	-118	-137	-155	-165	-168	-168	-168	-165	-160	-142
3,0	-129	-152	-176	-197	-213	-223	-226	-220	-210	-181
2,9	-137	-163	-192	-220	-247	-268	-278	-278	-263	-231
2,8	-142	-171	-202	-236	-273	-302	-323	-331	-320	-283
2,7	-144	-176	-210	-249	-289	-325	-357	-375	-370	-339
2,6	-150	-178	-215	-257	-299	-344	-381	-410	-415	-388
2,5	-152	-184	-220	-260	-307	-354	-396	-431	-446	-433
2,4	-155	-186	-223	-265	-310	-360	-407	-446	-470	-465
2,3	-160	-189	-226	-265	-312	-362	-410	-454	-483	-483
2,2	-168	-194	-228	-268	-312	-362	-412	-457	-488	-493
2,1	-176	-202	-234	-270	-312	-360	-410	-454	-486	-496
2,0	-189	-213	-239	-273	-312	-357	-404	-449	-480	-493
1,9	-207	-226	-249	-278	-315	-354	-399	-438	-470	-483
1,8	-228	-244	-263	-289	-320	-354	-394	-431	-457	-467
1,7	-257	-268	-283	-302	-325	-357	-388	-417	-441	-446
1,6	-291	-297	-307	-320	-339	-360	-383	-407	-425	-423
1,5	-328	-331	-336	-344	-354	-368	-383	-396	-404	-396
1,4	-368	-368	-368	-370	-373	-378	-383	-386	-383	-365
1,3	-404	-402	-396	-394	-388	-386	-381	-375	-360	-328
1,2	-428	-425	-417	-410	-399	-388	-373	-354	-328	-283
1,1	-433	-428	-420	-407	-391	-373	-349	-320	-278	-223

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 4-винилциклогексена

Таблица 2 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 4-винилциклогексена

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-H(1)	3,10	3,10	3,00	3,00	2,90	2,90	2,80	2,80	2,70	2,70
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40
C(4)-C(3)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(5)-C(7)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54
C(5)-C(4)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56
C(6)-C(4)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,57	1,57	1,57
C(7)-C(9)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(8)-C(6)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(9)-C(8)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35
H(10)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(12)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(13)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(7)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(19)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(20)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(21)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Продолжение таблицы 2

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-H(1)	2,60	2,60	2,50	2,50	2,40	2,40	2,30	2,30	2,20	2,20	2,10
C(3)-C(2)	1,40	1,41	1,41	1,42	1,43	1,44	1,45	1,46	1,46	1,48	1,48
C(4)-C(3)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,48	1,48
C(5)-C(7)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54
C(5)-C(4)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,57	1,57	1,57
C(6)-C(4)	1,57	1,57	1,57	1,57	1,57	1,57	1,58	1,58	1,58	1,58	1,58
C(7)-C(9)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(8)-C(6)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(9)-C(8)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35
H(10)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11
H(11)-C(2)	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,12
H(12)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(13)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(7)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(20)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(21)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Таблица 3 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 4-винилциклогексена

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	81	81	84	84	88	87	91	90	95
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(5)-C(7)-C(9)	114	114	114	114	114	114	114	114	114	114
C(5)-C(4)-C(3)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(6)-C(4)-C(3)	111	111	111	111	111	111	110	110	110	110
C(7)-C(9)-C(8)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124
C(8)-C(6)-C(4)	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113
C(9)-C(8)-C(6)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124
H(10)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	124	124	123	123
H(11)-C(2)-C(3)	122	122	122	121	121	121	121	121	121	121
H(12)-C(3)-C(2)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(13)-C(5)-C(7)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(14)-C(5)-C(7)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(15)-C(6)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(16)-C(6)-C(4)	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108
H(17)-C(9)-C(8)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(18)-C(7)-C(9)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(19)-C(7)-C(9)	109	109	109	109	109	109	110	109	110	109
H(20)-C(4)-C(3)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(21)-C(8)-C(6)	115	115	115	115	115	115	115	115	115	115

Продолжение таблицы 3

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	94	98	97	101	100	104	103	107	105	110	108
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(5)-C(7)-C(9)	114	114	114	114	114	114	114	114	114	114	114
C(5)-C(4)-C(3)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	111
C(6)-C(4)-C(3)	110	110	110	110	109	110	109	110	110	110	110
C(7)-C(9)-C(8)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124
C(8)-C(6)-C(4)	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113
C(9)-C(8)-C(6)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124
H(10)-C(2)-C(3)	123	123	122	121	121	120	119	117	117	115	115
H(11)-C(2)-C(3)	120	120	119	118	118	116	115	113	112	110	110
H(12)-C(3)-C(2)	118	117	117	117	117	117	117	116	116	116	116
H(13)-C(5)-C(7)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(14)-C(5)-C(7)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	110	110
H(15)-C(6)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(16)-C(6)-C(4)	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108
H(17)-C(9)-C(8)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(18)-C(7)-C(9)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(19)-C(7)-C(9)	110	110	110	110	110	109	109	109	109	110	109
H(20)-C(4)-C(3)	109	109	109	109	109	109	109	110	110	110	110
H(21)-C(8)-C(6)	115	114	114	114	114	114	114	114	114	114	114

Таблица 4 – Изменение зарядов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 4-винилциклогексена

Атом	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)	0,582	0,573	0,556	0,544	0,523	0,508	0,482	0,463	0,433	0,411
C(2)	0,031	0,017	0,019	0,003	0,003	-0,016	-0,017	-0,040	-0,042	-0,068
C(3)	0,001	0,020	0,026	0,048	0,058	0,084	0,098	0,129	0,147	0,184
C(4)	-0,052	-0,056	-0,058	-0,061	-0,064	-0,068	-0,072	-0,077	-0,082	-0,089
C(5)	0,007	0,007	0,007	0,007	0,006	0,006	0,006	0,006	0,006	0,006
C(6)	0,051	0,052	0,052	0,052	0,053	0,054	0,054	0,055	0,056	0,057
C(7)	0,020	0,020	0,019	0,019	0,019	0,019	0,018	0,018	0,018	0,017
C(8)	-0,106	-0,107	-0,108	-0,109	-0,110	-0,111	-0,112	-0,113	-0,114	-0,115
C(9)	-0,075	-0,075	-0,074	-0,073	-0,072	-0,071	-0,070	-0,069	-0,068	-0,066
H(10)	0,092	0,092	0,094	0,094	0,096	0,097	0,099	0,100	0,102	0,102
H(11)	0,069	0,070	0,073	0,074	0,078	0,081	0,086	0,089	0,095	0,100
H(12)	0,072	0,074	0,076	0,078	0,080	0,083	0,085	0,087	0,089	0,091
H(13)	-0,010	-0,008	-0,007	-0,005	-0,003	-0,001	0,000	0,003	0,005	0,008
H(14)	0,011	0,012	0,013	0,015	0,016	0,017	0,018	0,019	0,020	0,021
H(15)	0,020	0,020	0,020	0,021	0,021	0,021	0,021	0,022	0,022	0,022
H(16)	0,024	0,024	0,024	0,024	0,024	0,025	0,025	0,025	0,026	0,026
H(17)	0,080	0,080	0,080	0,081	0,081	0,082	0,082	0,082	0,083	0,084
H(18)	0,027	0,027	0,027	0,027	0,028	0,028	0,028	0,029	0,030	0,030
H(19)	0,033	0,033	0,034	0,034	0,035	0,036	0,037	0,038	0,039	0,040
H(20)	0,042	0,043	0,044	0,045	0,046	0,047	0,049	0,050	0,052	0,055
H(21)	0,081	0,081	0,082	0,082	0,082	0,083	0,083	0,084	0,084	0,085

Продолжение таблицы 4

Атом	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)	0,377	0,351	0,314	0,286	0,249	0,223	0,190	0,170	0,144	0,130	0,107
C(2)	-0,072	-0,100	-0,103	-0,128	-0,127	-0,142	-0,132	-0,133	-0,116	-0,105	-0,084
C(3)	0,207	0,249	0,276	0,318	0,344	0,380	0,397	0,421	0,428	0,439	0,439
C(4)	-0,095	-0,103	-0,110	-0,120	-0,128	-0,137	-0,144	-0,151	-0,155	-0,160	-0,162
C(5)	0,006	0,007	0,007	0,008	0,008	0,010	0,011	0,013	0,014	0,017	0,018
C(6)	0,059	0,060	0,061	0,064	0,066	0,068	0,070	0,071	0,073	0,073	0,073
C(7)	0,017	0,016	0,016	0,015	0,014	0,013	0,013	0,012	0,012	0,012	0,012
C(8)	-0,116	-0,118	-0,119	-0,120	-0,122	-0,123	-0,124	-0,125	-0,126	-0,125	-0,125
C(9)	-0,064	-0,063	-0,061	-0,059	-0,057	-0,056	-0,054	-0,053	-0,052	-0,052	-0,052
H(10)	0,104	0,103	0,104	0,103	0,102	0,098	0,097	0,091	0,089	0,083	0,081
H(11)	0,106	0,110	0,116	0,119	0,122	0,122	0,121	0,118	0,116	0,110	0,109
H(12)	0,093	0,095	0,097	0,098	0,100	0,101	0,103	0,104	0,105	0,105	0,106
H(13)	0,010	0,012	0,014	0,017	0,019	0,022	0,023	0,025	0,026	0,027	0,028
H(14)	0,022	0,023	0,024	0,025	0,025	0,026	0,027	0,028	0,028	0,029	0,030
H(15)	0,023	0,023	0,023	0,024	0,024	0,025	0,025	0,026	0,026	0,027	0,027
H(16)	0,027	0,028	0,028	0,029	0,030	0,031	0,032	0,033	0,033	0,034	0,034
H(17)	0,085	0,085	0,086	0,087	0,088	0,089	0,090	0,090	0,091	0,091	0,092
H(18)	0,031	0,032	0,033	0,034	0,035	0,036	0,037	0,038	0,038	0,039	0,039
H(19)	0,041	0,042	0,043	0,044	0,045	0,047	0,048	0,049	0,049	0,050	0,051
H(20)	0,058	0,061	0,064	0,068	0,071	0,075	0,078	0,081	0,082	0,083	0,084
H(21)	0,086	0,087	0,088	0,089	0,090	0,091	0,092	0,093	0,094	0,094	0,094

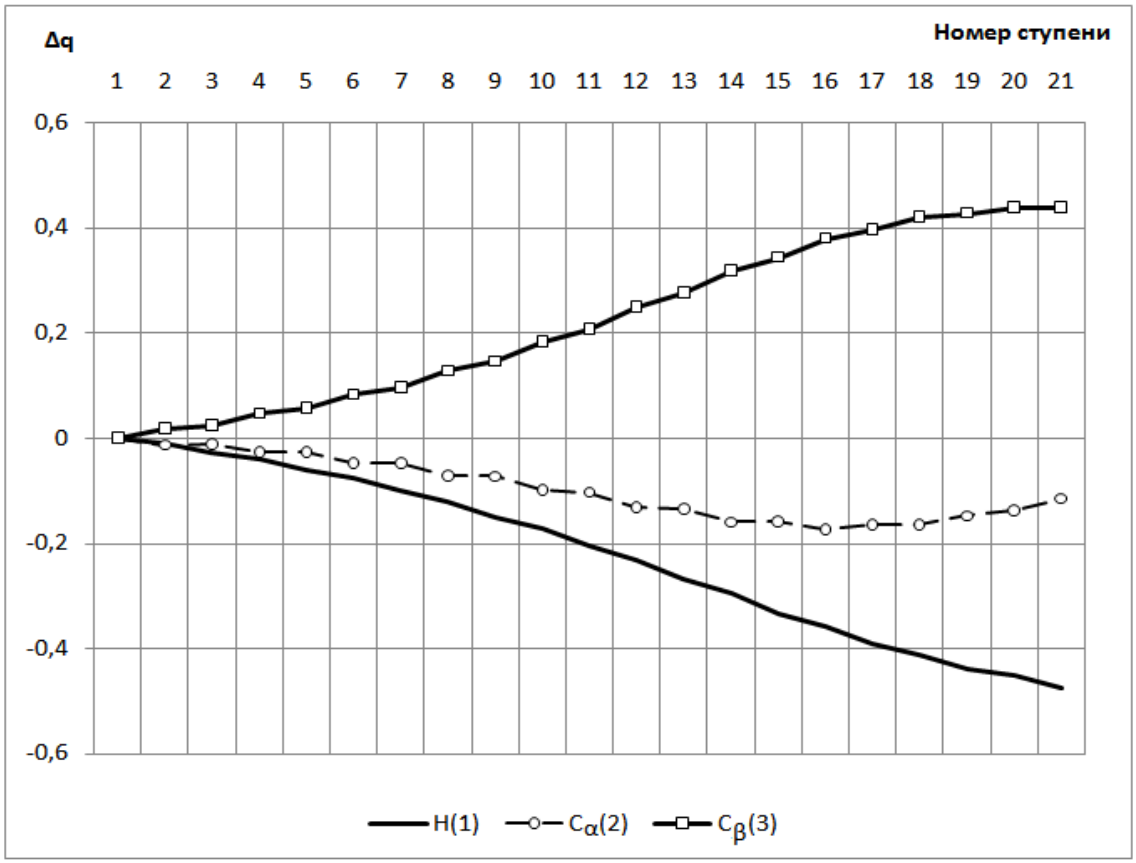

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому 4-винилциклогексена

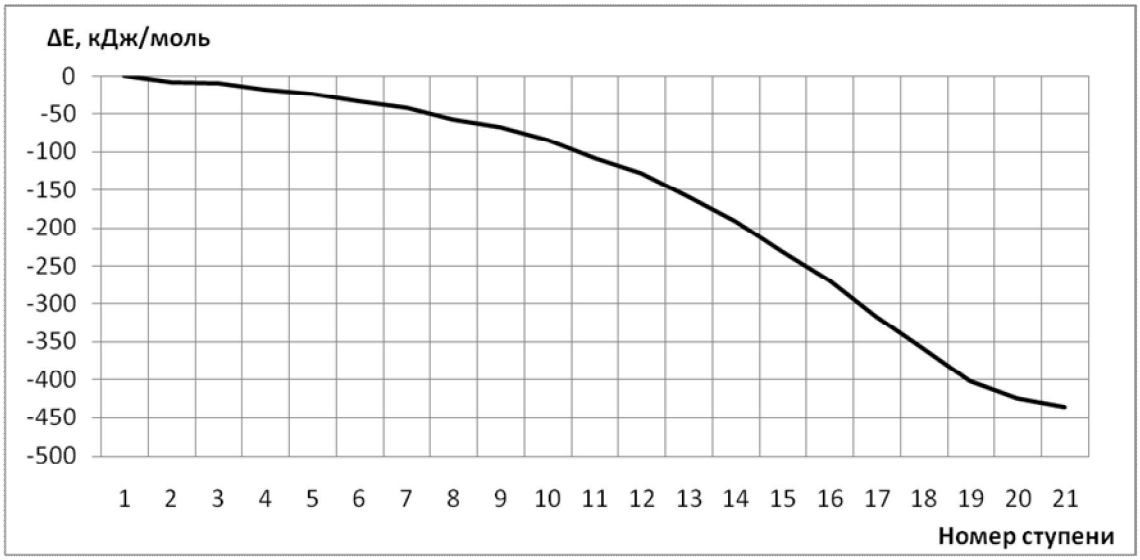

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 4-винилциклогексена

Таблица 5 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 4-винилциклогексена

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	3,00	2,90	2,90	2,80	2,80	2,70	2,70	2,70
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
C(4)-C(3)	1,50	1,50	1,50	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(5)-C(7)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54
C(5)-C(4)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,55
C(6)-C(4)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56
C(7)-C(9)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(8)-C(6)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(9)-C(8)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35
H(10)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(12)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(13)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12
H(14)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(7)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(19)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(20)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(21)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Продолжение таблицы 5

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,60	2,60	2,50	2,50	2,40	2,40	2,30	2,30	2,20	2,20	2,10
C(3)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-C(2)	1,40	1,40	1,41	1,41	1,42	1,43	1,44	1,45	1,45	1,46	1,46
C(4)-C(3)	1,51	1,52	1,52	1,53	1,53	1,54	1,54	1,55	1,55	1,58	1,59
C(5)-C(7)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54
C(5)-C(4)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(6)-C(4)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,55	1,55
C(7)-C(9)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(8)-C(6)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(9)-C(8)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35
H(10)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(12)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12
H(13)-C(5)	1,11	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11
H(16)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,12	1,12
H(17)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(7)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(19)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(20)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(21)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Таблица 6 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 4-винилциклогексена

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	72	72	68	67	63	63	58	54
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	125	125	125
C(5)-C(7)-C(9)	114	114	114	114	114	114	114	114	114	114
C(5)-C(4)-C(3)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(6)-C(4)-C(3)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
C(7)-C(9)-C(8)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124
C(8)-C(6)-C(4)	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113
C(9)-C(8)-C(6)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124
H(10)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124
H(11)-C(2)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
H(12)-C(3)-C(2)	118	118	118	118	118	118	118	117	117	117
H(13)-C(5)-C(7)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(14)-C(5)-C(7)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(15)-C(6)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(16)-C(6)-C(4)	108	108	108	108	108	108	108	108	108	109
H(17)-C(9)-C(8)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(18)-C(7)-C(9)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(19)-C(7)-C(9)	109	109	109	109	110	110	110	110	110	110
H(20)-C(4)-C(3)	109	109	109	109	109	108	108	108	108	108
H(21)-C(8)-C(6)	115	115	115	115	115	115	115	115	115	115

Продолжение таблицы 6

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	54	50	49	45	44	40	39	35	35	31	30
C(4)-C(3)-C(2)	125	124	124	123	123	121	121	119	118	114	113
C(5)-C(7)-C(9)	114	114	114	114	114	114	114	114	114	114	114
C(5)-C(4)-C(3)	112	112	112	112	112	112	112	112	111	111	110
C(6)-C(4)-C(3)	111	111	111	111	111	111	111	112	112	112	113
C(7)-C(9)-C(8)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124
C(8)-C(6)-C(4)	113	113	113	113	113	113	113	114	114	113	113
C(9)-C(8)-C(6)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124
H(10)-C(2)-C(3)	123	123	123	123	123	123	123	123	123	122	122
H(11)-C(2)-C(3)	122	121	121	121	121	121	121	121	121	122	122
H(12)-C(3)-C(2)	117	116	116	115	115	113	113	112	111	111	110
H(13)-C(5)-C(7)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(14)-C(5)-C(7)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(15)-C(6)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	111	111
H(16)-C(6)-C(4)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(17)-C(9)-C(8)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(18)-C(7)-C(9)	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109	109
H(19)-C(7)-C(9)	110	110	110	110	110	110	110	110	109	110	110
H(20)-C(4)-C(3)	108	108	108	107	107	107	107	107	107	106	105
H(21)-C(8)-C(6)	115	115	115	115	115	115	115	115	115	115	115

Таблица 7 – Изменение зарядов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 4-винилциклогексена

Атом	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)	0,582	0,567	0,561	0,543	0,535	0,513	0,504	0,479	0,467	0,453
C(2)	0,031	0,034	0,052	0,058	0,080	0,089	0,116	0,129	0,162	0,198
C(3)	0,001	0,006	-0,009	-0,005	-0,023	-0,020	-0,041	-0,040	-0,065	-0,092
C(4)	-0,052	-0,054	-0,053	-0,055	-0,054	-0,056	-0,054	-0,055	-0,053	-0,051
C(5)	0,007	0,007	0,006	0,006	0,005	0,005	0,004	0,003	0,002	0,001
C(6)	0,051	0,051	0,052	0,052	0,052	0,053	0,052	0,052	0,052	0,050
C(7)	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020
C(8)	-0,106	-0,107	-0,107	-0,108	-0,108	-0,109	-0,109	-0,110	-0,111	-0,111
C(9)	-0,075	-0,075	-0,075	-0,074	-0,074	-0,073	-0,073	-0,072	-0,072	-0,071
H(10)	0,092	0,093	0,094	0,096	0,097	0,098	0,099	0,101	0,102	0,103
H(11)	0,069	0,072	0,074	0,076	0,078	0,081	0,083	0,086	0,087	0,089
H(12)	0,072	0,074	0,074	0,076	0,077	0,080	0,082	0,086	0,089	0,093
H(13)	-0,010	-0,009	-0,010	-0,009	-0,011	-0,009	-0,010	-0,009	-0,010	-0,010
H(14)	0,011	0,011	0,011	0,012	0,012	0,013	0,013	0,014	0,015	0,016
H(15)	0,020	0,020	0,020	0,021	0,021	0,021	0,021	0,021	0,021	0,021
H(16)	0,024	0,025	0,025	0,024	0,024	0,024	0,023	0,022	0,021	0,020
H(17)	0,080	0,080	0,081	0,081	0,081	0,082	0,082	0,082	0,082	0,083
H(18)	0,027	0,027	0,027	0,028	0,028	0,028	0,028	0,028	0,028	0,028
H(19)	0,033	0,033	0,034	0,034	0,034	0,035	0,035	0,036	0,036	0,036
H(20)	0,042	0,043	0,043	0,044	0,044	0,044	0,043	0,043	0,042	0,041
H(21)	0,081	0,082	0,082	0,082	0,082	0,083	0,083	0,083	0,083	0,083

Продолжение таблицы 7

Атом	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)	0,422	0,405	0,370	0,349	0,311	0,288	0,250	0,227	0,194	0,142	0,106
C(2)	0,221	0,263	0,291	0,338	0,369	0,414	0,441	0,478	0,495	0,515	0,510
C(3)	-0,094	-0,123	-0,127	-0,155	-0,155	-0,177	-0,171	-0,182	-0,168	-0,168	-0,151
C(4)	-0,051	-0,049	-0,048	-0,046	-0,044	-0,042	-0,041	-0,039	-0,037	-0,004	0,004
C(5)	0,001	0,000	-0,001	-0,002	-0,002	-0,002	-0,002	-0,002	-0,002	-0,005	-0,006
C(6)	0,050	0,048	0,047	0,044	0,043	0,040	0,038	0,036	0,034	0,026	0,024
C(7)	0,019	0,019	0,019	0,018	0,018	0,017	0,016	0,016	0,015	0,013	0,013
C(8)	-0,112	-0,112	-0,113	-0,114	-0,115	-0,116	-0,117	-0,118	-0,119	-0,121	-0,121
C(9)	-0,070	-0,070	-0,068	-0,067	-0,065	-0,064	-0,062	-0,061	-0,060	-0,057	-0,057
H(10)	0,104	0,105	0,107	0,108	0,109	0,110	0,111	0,111	0,111	0,107	0,108
H(11)	0,092	0,093	0,096	0,097	0,100	0,101	0,103	0,104	0,106	0,110	0,109
H(12)	0,098	0,103	0,108	0,112	0,115	0,116	0,116	0,113	0,109	0,090	0,098
H(13)	-0,007	-0,007	-0,004	-0,002	0,002	0,004	0,008	0,010	0,013	0,022	0,025
H(14)	0,017	0,018	0,019	0,020	0,020	0,021	0,022	0,022	0,023	0,028	0,028
H(15)	0,021	0,021	0,020	0,020	0,019	0,018	0,018	0,018	0,018	0,024	0,025
H(16)	0,018	0,016	0,014	0,012	0,009	0,006	0,004	0,001	0,000	-0,001	0,001
H(17)	0,083	0,083	0,083	0,083	0,083	0,083	0,083	0,083	0,083	0,085	0,086
H(18)	0,028	0,028	0,028	0,028	0,028	0,028	0,029	0,029	0,029	0,031	0,032
H(19)	0,037	0,037	0,038	0,038	0,038	0,038	0,039	0,039	0,040	0,043	0,043
H(20)	0,040	0,039	0,038	0,036	0,035	0,034	0,034	0,034	0,033	0,037	0,037
H(21)	0,083	0,082	0,082	0,082	0,082	0,081	0,081	0,081	0,081	0,083	0,084

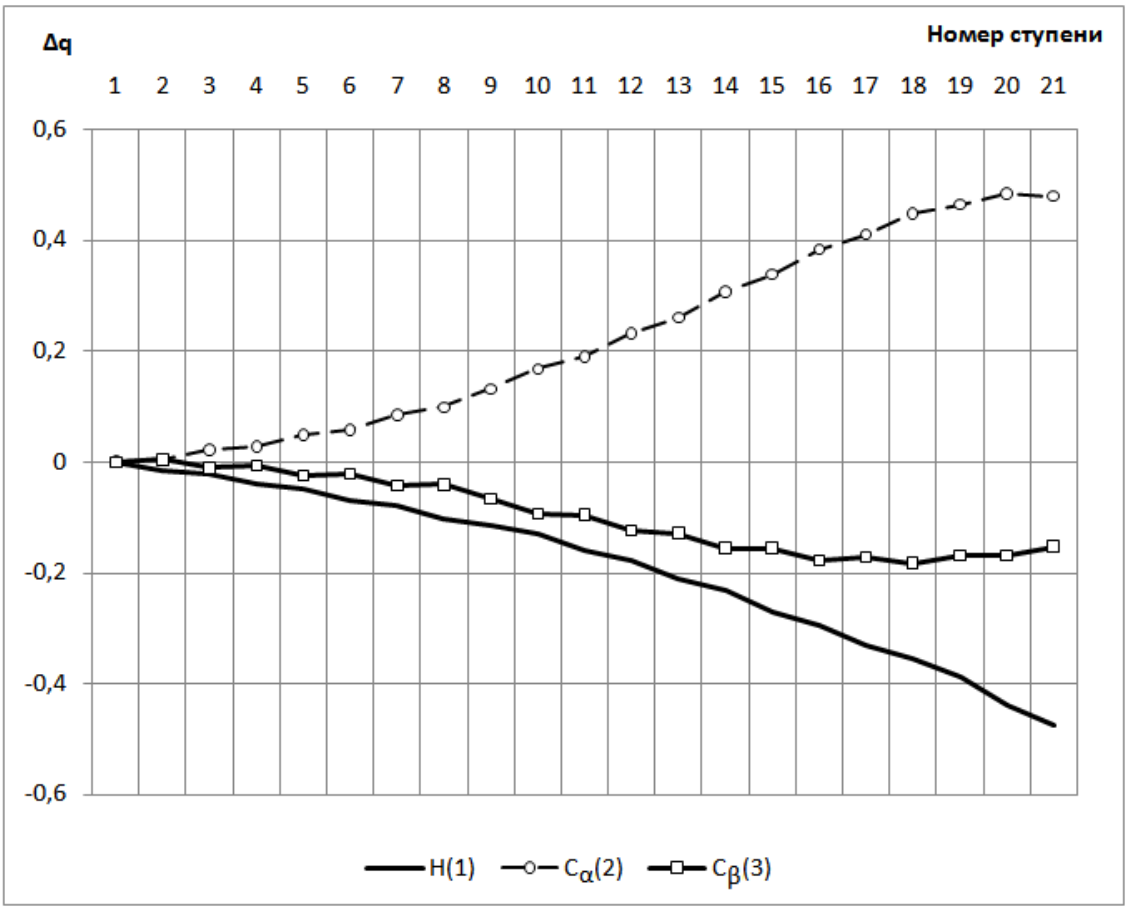

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 4-винилциклогексена

Список литературы

1. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов /Дж. Кеннеди. – Изд-во «Мир»: М., 1978. – 431 с.
2. Сангалов, Ю. А. Полимеры и сополимеры 4-метилпентена-1 / Ю. А. Сангалов, К. С. Минскер. – Уфа, 2001. – 381 с.
3. Бабкин В.А. Квантовохимический аспект катионной полимеризации олефинов / В.А. Бабкин, Г.Е. Заиков, К.С. Минскер. – Изд-во «Гилем»: Уфа, 1996. – 182 с.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
7. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.
8. Бабкин В.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тетраметилстирола методом AB INITIO. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Титова Е.С. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – С. 22-28.
9. Бабкин В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации 1-метилен-4-винилциклогексана. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Овчарова В.А., Пристансков А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – № 4 (199). – С. 43-47.
10. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 164-170.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 170-186.
12. Овчарова В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации аллилциклогексана. / Овчарова В.А., Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Фомичёв В.Т., Федунов Р.Г., Стоянов О.В., Заиков Г.Е., Сангалов Ю.А. // В сборнике: Состояние, проблемы и перспективы развития социально-ориентированного строительного комплекса на региональном уровне. Материалы IV Всероссийской научно-технической интернет-конференции, посвящённой 15-летию Себряковского филиала ВолгГТУ. – 2017. – С. 116-129.

13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – № 4 (125). – С. 5-6.
14. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции. – 2017. – С. 17-22.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 107-112.
16. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 30-36.
17. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 36-42.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРОТОНИРОВАНИЯ 3-ФЕНИЛБУТЕНА-1 МЕТОДОМ MNDO

Цыканов А.В.

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования 3-фенилбутена-1 классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция экзотермична и имеет без барьерный характер. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α-углеродный атом равен 533 кДж/моль. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

For the first time it is researched of classical quantum chemical method MNDO of modeling mechanism protonizataion of 3-phenylbutene-1 – monomer of cationic polymerization. Showing, that he considerate some self usual mechanism connection proton to olefin

corresponding Morkovnikov's rule. Reaction exothermic and carry without a barrier character. Prize energy in result of reaction – 533 kDg/mol.

Цель настоящей работы – квантово-химическое исследование механизма протонирования 3-фенилбутена-1 классическим полуэмпирическим методом MNDO .

Методическая часть

Используя классические представления о механизме инициирования катионной полимеризации в присутствии различных каталитических комплексов [1-3], для изучения механизма протонирования был выбран квантовохимический поуэмпирическиий метод MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [4-5], в связи с тем, что этот метод специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … $C_{10}H_{12}$ (3-фенилбутен-1) 23 атома, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M-мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$

Для исследования механизма протонирования 3-фенилбутена-1 выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с 3-фенилбутеном-1 по методике, аналогичной [8-17]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. По полученным данным значений энергий вдоль координат реакции строилась эквипотенциальная поверхность взаимодействий протона 3-фенилбутеном-1 (см. рис. 4). Исходная модель атаки протона молекулы 3-фенилбутена-1 показана на рис. 1.

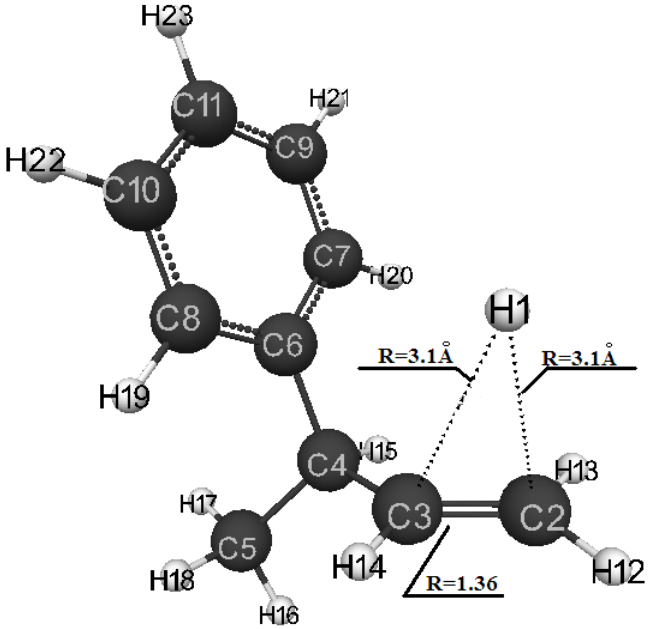

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы 3-фенилбутена-1

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt[6].

Результаты расчетов

Значения энергий молекулярной системы H^+ … $C_{10}H_{12}$ вдоль координат реакций R_{H1C2} и R_{H1C3} показаны в таблице 1. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома 3-фенилбутена-1 (C_2) и разрыва двойной связи 3-фенилбутена-1 представлена на рис. 2. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома 3-фенилбутена-1 (C_3) и разрыва двойной связи C_2 = C_3 показана на рис. 3. Заряды на атомах конечных моделей сформированных карбкатионнов представлены в табл. 2. Изменение общей энергии при протонизации 3-фенилбутена-1 показано в табл. 1, из которой видно, что на всем пути движения протона (инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы H^+ … $C_{10}H_{12}$ (E_0) неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона (см. рис. 4) и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β- углеродные атомы 3-фенилбутена-1. Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 102 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β- углеродного атома, что находится в полном соответствии с классическим правилом Марковникова. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α- углеродный атом равен 533 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 431 кДж/моль.

Более того, по pKa=42,11-147,18q_{max}^{H+}[7] (q_{max}^{H+} = +0,116- максимальный заряд на атоме водорода, pKa- универсальный показатель кислотности), находим значение кислотной силы сформированных карбкатионов, равное pKa = 25.

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы 3-фенилбутена-1 свидетельствует о том, что механизм протонирования катионной полимеризации 3-фенилбутена-1 идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования 3-фенилбутена-1 квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

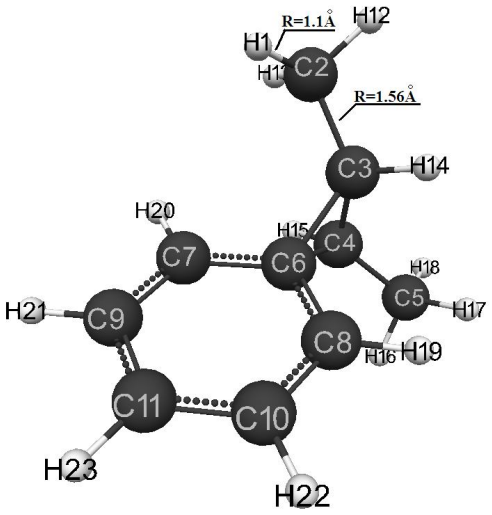

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α – углеродного атома 3-фенилбутена-1 (C_2)

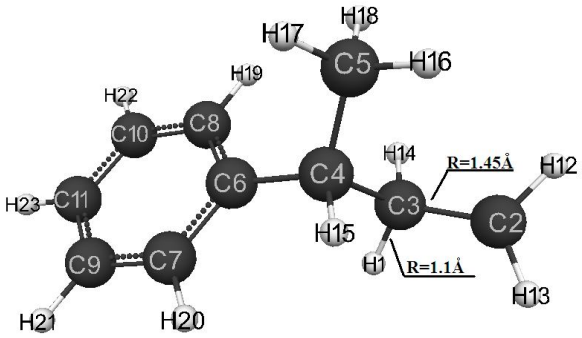

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β – углеродного атома 3-фенилбутена-1 (C_3)

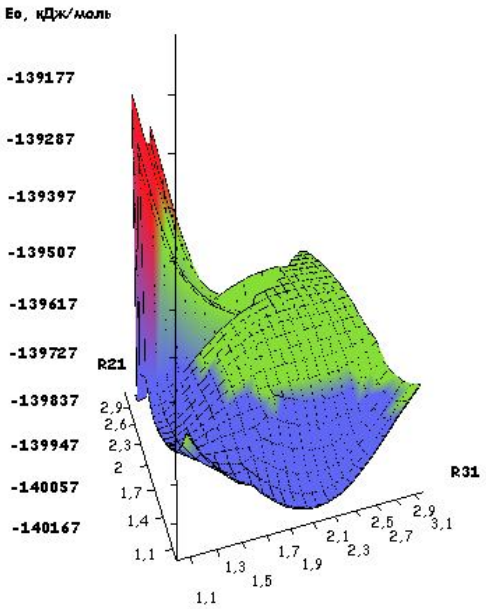

Рис. 4 – Потенциальная поверхность энергий взаимодействий протона с 3-фенилбутеном-1

Таблица 1 – Изменение общей энергии молекулярной системы H^+ ... $C_{10}H_{12}$ – E_o (в кДж/моль) вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} (в А)

R_{H1C3}	R_{H1C2}										
	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
3,1	0	-3	-8	-11	-16	-24	-34	-45	-58	-74	-92
3,0	-3	-6	-8	-13	-19	-27	-37	-48	-63	-79	-100
2,9	-297	-8	-11	-16	-21	-29	-40	-50	-66	-84	-105
2,8	-349	-210	-13	-19	-24	-32	-42	-53	-69	-87	-108
2,7	-397	-208	-323	-24	-29	-37	-45	-58	-71	-90	-113
2,6	-431	-205	-370	-21	-34	-40	-50	-61	-76	-95	-116
2,5	-457	-200	-410	-29	-197	-48	-56	-66	-82	-98	-119
2,4	-475	-195	-436	-40	-195	-195	-63	-74	-87	-103	-124
2,3	-483	-187	-457	-50	-189	-189	-74	-84	-95	-111	-129
2,2	-483	-176	-468	-66	-181	-181	-90	-98	-108	-121	-139
2,1	-475	-163	-468	-84	-171	-174	-402	-113	-124	-134	-150
2,0	-455	-145	-462	-105	-161	-163	-415	-134	-142	-153	-166
1,9	-423	-126	-444	-129	-145	-147	-420	-161	-166	-174	-187
1,8	-378	-92	-418	-155	-124	-129	-415	-189	-195	-202	-210
1,7	0	-40	-378	-181	-95	-105	-402	-226	-231	-237	-242
1,6	94	31	-323	-208	-58	-69	-378	-263	-268	-273	-279
1,5	212	131	68	-231	-8	-27	-347	-305	-310	-315	-318
1,4	341	252	173	-244	63	31	-307	-344	-352	-357	-360
1,3	464	383	299	-420	157	107	-357	-378	-389	-394	-397
1,2	-533	-533	430	-420	278	210	-368	-397	-415	-420	-423
1,1	-546	-546	559	-394	417	341	-347	-386	-412	-428	-431

Продолжение таблицы 1

R_{H1C3}	R_{H1C2}									
	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
3,1	-113	-132	-147	-161	-208	-221	-226	-226	-218	-195
3,0	-121	-145	-171	-192	-244	-268	-279	-281	-271	-242
2,9	-129	-155	-187	-216	-273	-305	-329	-334	-326	-292
2,8	-134	-163	-197	-231	-294	-334	-365	-381	-378	-347
2,7	-139	-168	-205	-244	-307	-355	-394	-420	-426	-399
2,6	-142	-174	-210	-252	-315	-368	-415	-449	-462	-444
2,5	-145	-176	-213	-255	-318	-376	-428	-470	-491	-483
2,4	-150	-179	-216	-258	-318	-378	-434	-481	-510	-510
2,3	-155	-184	-218	-260	-313	-373	-434	-483	-520	-525
2,2	-161	-189	-221	-260	-302	-365	-426	-481	-520	-533
2,1	-171	-195	-226	-263	-289	-352	-415	-473	-512	-531
2,0	-181	-205	-231	-266	-273	-336	-399	-457	-499	-520
1,9	-200	-218	-242	-273	-307	-318	-378	-436	-481	-502
1,8	-224	-237	-258	-281	-313	-347	-355	-410	-455	-475
1,7	-250	-260	-276	-297	-321	-349	-381	-381	-423	-444
1,6	-284	-292	-300	-315	-331	-355	-378	-402	-386	-405
1,5	-321	-323	-329	-336	-347	-360	-378	-392	-399	-392

1,4	-360	-360	-360	-363	-365	-370	-378	-381	-378	-360
1,3	-394	-394	-389	-386	-384	-378	-376	-368	-352	-323
1,2	-420	-418	-410	-402	-392	-381	-368	-347	-321	-279
1,1	-428	-420	-412	-399	-384	-365	-344	-313	-273	-216

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 3-фенилбутена-1

Таблица 2 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 3-фенилбутена-1

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-H(1)	3,10	3,10	3,10	3,00	3,00	2,90	2,90	2,80	2,80	2,70
C(3)-C(2)	1,36	1,36	1,37	1,37	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,40
C(4)-C(3)	1,52	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(5)-C(4)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(6)-C(4)	1,52	1,52	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53
C(7)-C(6)	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(8)-C(6)	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(9)-C(7)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,41	1,41	1,41
C(10)-C(8)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
C(11)-C(9)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
C(11)-C(10)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
H(12)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(13)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(14)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(15)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(16)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(18)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(20)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(21)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(22)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(23)-C(11)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Продолжение таблицы 2

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-H(1)	2,70	2,60	2,60	2,50	2,50	2,40	2,40	2,30	2,30	2,20	2,20
C(3)-C(2)	1,40	1,41	1,42	1,42	1,43	1,49	1,50	1,50	1,51	1,51	1,52
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(5)-C(4)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(6)-C(4)	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,60	1,60	1,60	1,61	1,61	1,61
C(7)-C(6)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,47	1,47	1,47	1,47	1,47	1,47
C(8)-C(6)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,47	1,47	1,47	1,47	1,47	1,47
C(9)-C(7)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
C(10)-C(8)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
C(11)-C(9)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(11)-C(10)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
H(12)-C(2)	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11
H(13)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11
H(14)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,10
H(15)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(18)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(20)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(21)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(22)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(23)-C(11)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Таблица 3 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 3-фенилбутена-1

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	81	85	85	89	88	92	91	95	95
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(5)-C(4)-C(3)	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113
C(6)-C(4)-C(3)	106	106	106	106	107	107	107	108	108	108
C(7)-C(6)-C(4)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(8)-C(6)-C(4)	123	123	122	122	122	122	122	122	122	122
C(9)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(10)-C(8)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(11)-C(9)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(11)-C(10)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(12)-C(2)-C(3)	122	122	122	121	121	121	121	121	121	120
H(13)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	124	124	123	123
H(14)-C(3)-C(2)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(15)-C(4)-C(3)	109	109	108	108	108	108	108	108	108	108
H(16)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(17)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(18)-C(5)-C(4)	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113
H(19)-C(8)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(20)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	121	121	121	121
H(21)-C(9)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(22)-C(10)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(23)-C(11)-C(9)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	99	98	102	101	106	102	106	105	110	108	113
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	125	125	125	125	125	125
C(5)-C(4)-C(3)	113	113	113	113	114	125	125	125	125	125	125
C(6)-C(4)-C(3)	108	108	107	107	106	63	63	63	63	63	63
C(7)-C(6)-C(4)	119	119	119	119	119	116	116	116	116	116	116
C(8)-C(6)-C(4)	122	122	122	122	122	121	121	121	121	121	121
C(9)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	122	122	122	122	122	122
C(10)-C(8)-C(6)	121	121	121	121	121	122	122	122	122	122	122
C(11)-C(9)-C(7)	120	120	120	120	120	121	121	121	121	121	121
C(11)-C(10)-C(8)	120	120	120	120	120	121	121	121	121	121	121
H(12)-C(2)-C(3)	120	120	119	118	116	115	113	113	111	111	109
H(13)-C(2)-C(3)	123	123	122	121	120	118	117	116	115	114	112
H(14)-C(3)-C(2)	118	117	117	117	117	110	110	110	110	110	110
H(15)-C(4)-C(3)	108	108	108	108	109	117	117	117	117	117	117
H(16)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(17)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	114	114	114	114	114	114
H(18)-C(5)-C(4)	113	113	113	113	113	109	109	109	109	109	109
H(19)-C(8)-C(6)	121	121	121	121	121	119	119	119	119	119	119
H(20)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	119	119	119	119	119	119
H(21)-C(9)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(22)-C(10)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(23)-C(11)-C(9)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120

Таблица 4 – Изменение зарядов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 3-фенилбутена-1

Атом	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)	0,500	0,498	0,495	0,487	0,482	0,471	0,461	0,443	0,426	0,398
C(2)	0,008	0,000	-0,009	-0,006	-0,019	-0,018	-0,036	-0,039	-0,062	-0,068
C(3)	-0,065	-0,042	-0,017	0,003	0,034	0,059	0,095	0,121	0,159	0,185
C(4)	0,017	0,015	0,014	0,012	0,009	0,006	0,002	-0,002	-0,007	-0,011
C(5)	0,037	0,036	0,036	0,036	0,036	0,036	0,035	0,035	0,035	0,035
C(6)	-0,060	-0,069	-0,080	-0,094	-0,106	-0,120	-0,129	-0,138	-0,143	-0,149
C(7)	-0,030	-0,032	-0,032	-0,031	-0,032	-0,031	-0,030	-0,029	-0,028	-0,027
C(8)	-0,049	-0,046	-0,044	-0,045	-0,044	-0,046	-0,046	-0,047	-0,046	-0,045
C(9)	-0,059	-0,057	-0,055	-0,054	-0,054	-0,053	-0,052	-0,052	-0,051	-0,051
C(10)	-0,062	-0,063	-0,063	-0,062	-0,061	-0,059	-0,057	-0,055	-0,054	-0,052
C(11)	0,026	0,022	0,017	0,011	0,006	0,000	-0,005	-0,009	-0,010	-0,010
H(12)	0,064	0,065	0,067	0,071	0,073	0,078	0,082	0,088	0,093	0,099
H(13)	0,079	0,080	0,082	0,086	0,088	0,092	0,094	0,097	0,098	0,101
H(14)	0,067	0,070	0,072	0,075	0,078	0,080	0,083	0,085	0,087	0,089
H(15)	0,042	0,042	0,043	0,044	0,045	0,046	0,048	0,049	0,051	0,052
H(16)	0,018	0,017	0,016	0,016	0,015	0,014	0,013	0,013	0,012	0,012
H(17)	0,023	0,025	0,026	0,028	0,030	0,033	0,035	0,037	0,039	0,041
H(18)	0,007	0,008	0,008	0,009	0,010	0,011	0,012	0,013	0,014	0,015
H(19)	0,078	0,076	0,074	0,071	0,069	0,066	0,064	0,062	0,061	0,061
H(20)	0,082	0,080	0,079	0,077	0,075	0,073	0,071	0,070	0,069	0,069
H(21)	0,093	0,092	0,091	0,090	0,088	0,088	0,086	0,086	0,086	0,086
H(22)	0,091	0,090	0,088	0,088	0,086	0,085	0,084	0,084	0,084	0,084
H(23)	0,093	0,092	0,091	0,090	0,089	0,088	0,088	0,087	0,087	0,087

Продолжение таблицы 4

Атом	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)	0,374	0,340	0,312	0,274	0,244	-0,018	0,000	0,003	0,017	0,017	0,026
C(2)	-0,094	-0,099	-0,124	-0,127	-0,144	0,011	0,008	0,014	0,015	0,023	0,028
C(3)	0,224	0,252	0,294	0,322	0,359	0,061	0,058	0,056	0,053	0,050	0,047
C(4)	-0,017	-0,022	-0,029	-0,034	-0,041	0,038	0,041	0,041	0,043	0,044	0,046
C(5)	0,035	0,034	0,034	0,034	0,034	0,030	0,029	0,029	0,029	0,029	0,028
C(6)	-0,152	-0,156	-0,158	-0,162	-0,166	-0,251	-0,251	-0,252	-0,253	-0,254	-0,254
C(7)	-0,025	-0,024	-0,022	-0,020	-0,018	0,154	0,154	0,153	0,153	0,152	0,152
C(8)	-0,044	-0,042	-0,040	-0,038	-0,034	0,154	0,154	0,154	0,154	0,154	0,154
C(9)	-0,051	-0,050	-0,051	-0,050	-0,051	-0,142	-0,142	-0,142	-0,142	-0,142	-0,142
C(10)	-0,051	-0,050	-0,050	-0,049	-0,050	-0,143	-0,143	-0,143	-0,143	-0,143	-0,142
C(11)	-0,009	-0,008	-0,006	-0,004	0,000	0,199	0,199	0,199	0,198	0,198	0,198
H(12)	0,104	0,110	0,115	0,119	0,120	0,066	0,060	0,058	0,052	0,050	0,044
H(13)	0,101	0,102	0,101	0,101	0,097	0,046	0,040	0,037	0,031	0,029	0,022
H(14)	0,091	0,093	0,094	0,096	0,097	0,081	0,081	0,080	0,080	0,080	0,080
H(15)	0,055	0,058	0,060	0,063	0,067	0,079	0,079	0,079	0,080	0,080	0,080
H(16)	0,013	0,013	0,014	0,015	0,016	0,028	0,028	0,028	0,028	0,028	0,028
H(17)	0,043	0,044	0,046	0,048	0,049	0,018	0,018	0,018	0,018	0,018	0,018
H(18)	0,016	0,017	0,018	0,019	0,019	0,045	0,046	0,046	0,046	0,046	0,046
H(19)	0,061	0,061	0,061	0,062	0,063	0,098	0,099	0,099	0,099	0,099	0,099
H(20)	0,069	0,069	0,069	0,069	0,070	0,098	0,099	0,099	0,099	0,098	0,098
H(21)	0,086	0,086	0,087	0,087	0,088	0,117	0,117	0,117	0,117	0,117	0,116
H(22)	0,084	0,085	0,085	0,086	0,087	0,117	0,117	0,117	0,117	0,117	0,116
H(23)	0,087	0,088	0,088	0,089	0,090	0,111	0,111	0,111	0,111	0,111	0,111

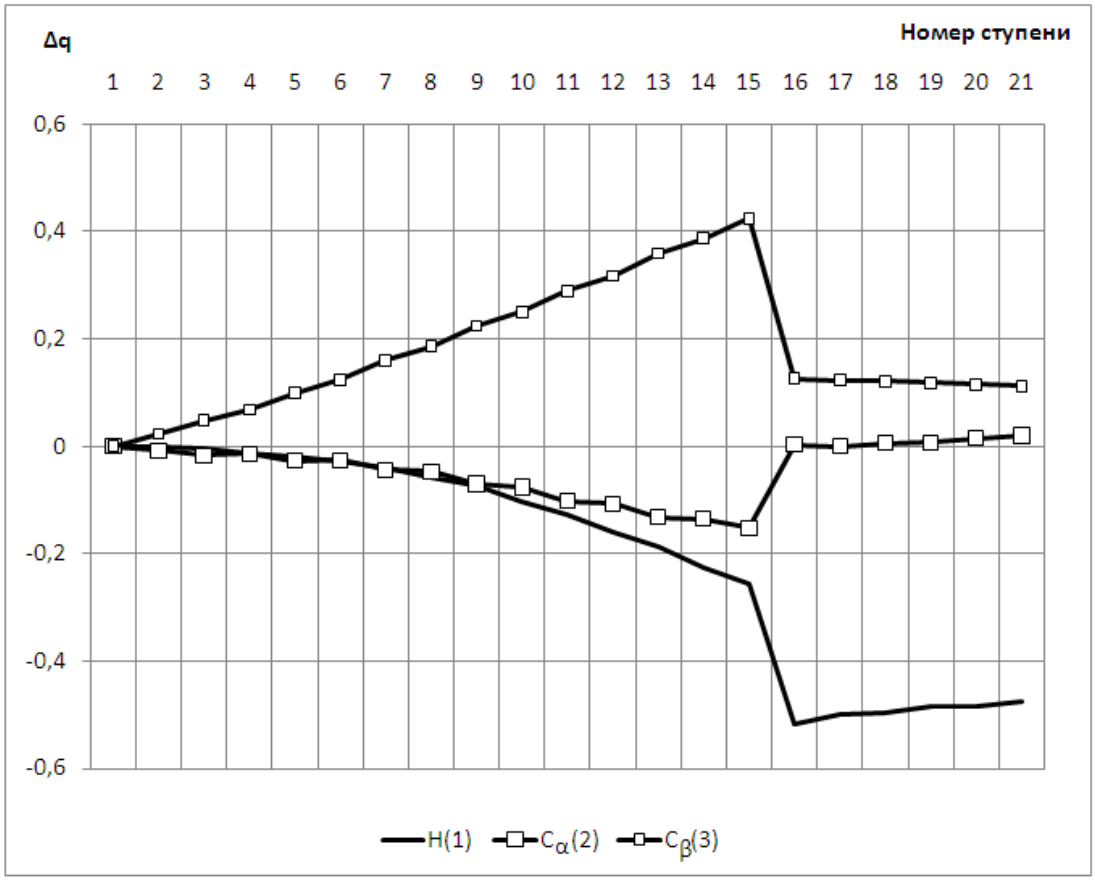

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому 3-фенилбутена-1

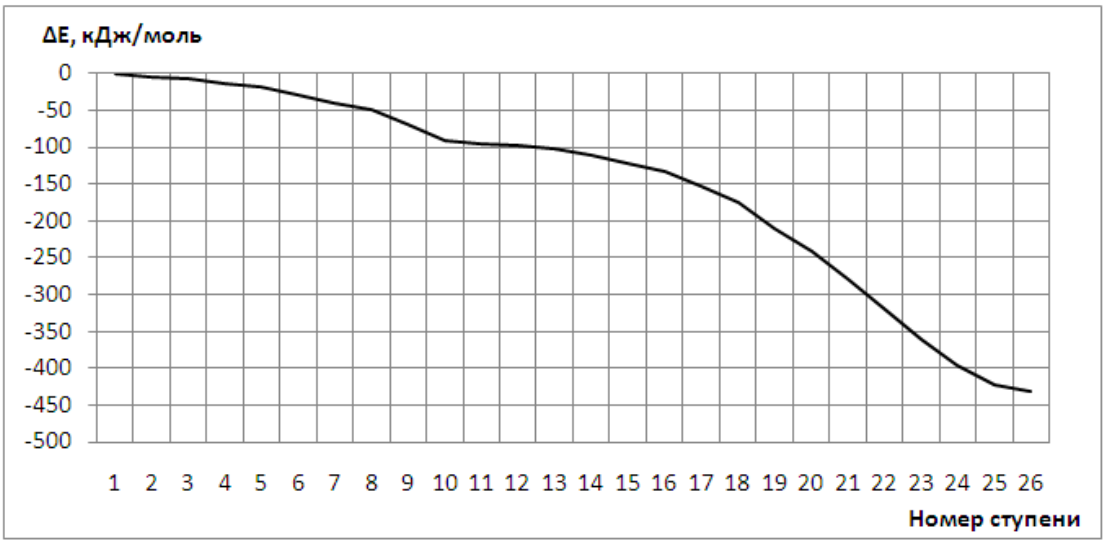

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 3-фенилбутена-1

Таблица 5 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 3-фенилбутена-1

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20	2,20	2,20	2,20
C(3)-H(1)	3,10	3,00	3,00	3,00	3,00	2,90	2,90	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40
C(3)-C(2)	1,36	1,37	1,37	1,37	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,40
C(4)-C(3)	1,52	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(5)-C(4)	1,54	1,54	1,54	1,54	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(6)-C(4)	1,52	1,52	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53	1,53
C(7)-C(6)	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(8)-C(6)	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(9)-C(7)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
C(10)-C(8)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
C(11)-C(9)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
C(11)-C(10)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
H(12)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(13)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(14)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(15)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(16)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(18)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(20)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(21)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(22)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(23)-C(11)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Продолжение таблицы 5

номер ступени	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
C(2)-H(1)	2,20	2,20	2,20	2,20	2,20	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10
C(3)-H(1)	2,30	2,20	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-C(2)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,41	1,41	1,42	1,42	1,43	1,44	1,45	1,45	1,45
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,52	1,52	1,52	1,52	1,53	1,53	1,54	1,55	1,55	1,58	1,62
C(5)-C(4)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,54	1,54
C(6)-C(4)	1,53	1,53	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,51
C(7)-C(6)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(8)-C(6)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(9)-C(7)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,40	1,40
C(10)-C(8)	1,40	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,40	1,40
C(11)-C(9)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
C(11)-C(10)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
H(12)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,09	1,09
H(13)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(14)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12
H(15)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(16)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(18)-C(5)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(20)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(21)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(22)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(23)-C(11)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Таблица 6 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 3-фенилбутена-1

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	81	85	89	88	92	96	95	95	90	85	80
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(5)-C(4)-C(3)	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113	112	112
C(6)-C(4)-C(3)	106	106	106	106	107	107	107	107	108	108	108	109	109
C(7)-C(6)-C(4)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	119
C(8)-C(6)-C(4)	123	123	123	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(9)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(10)-C(8)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(11)-C(9)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(11)-C(10)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(12)-C(2)-C(3)	122	122	122	121	121	121	121	121	121	120	121	121	121
H(13)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	124	124	123	123	123	123	123
H(14)-C(3)-C(2)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(15)-C(4)-C(3)	109	109	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108	108
H(16)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(17)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(18)-C(5)-C(4)	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113
H(19)-C(8)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(20)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	121	121	121	121	121	121	121
H(21)-C(9)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(22)-C(10)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(23)-C(11)-C(9)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120

Продолжение таблицы 6

номер ступени	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
H(1)-C(2)-C(3)	76	71	67	63	59	58	54	50	46	42	38	34	29
C(4)-C(3)-C(2)	126	125	125	125	125	125	124	124	123	121	120	117	113
C(5)-C(4)-C(3)	111	111	111	111	111	111	111	111	112	112	112	112	112
C(6)-C(4)-C(3)	110	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	110	109
C(7)-C(6)-C(4)	119	119	119	120	120	120	120	120	120	120	120	119	119
C(8)-C(6)-C(4)	122	122	122	123	123	123	123	123	123	123	123	123	123
C(9)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(10)-C(8)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(11)-C(9)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(11)-C(10)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(12)-C(2)-C(3)	121	121	122	122	122	122	122	121	121	121	121	122	122
H(13)-C(2)-C(3)	123	123	123	123	123	123	123	123	123	123	123	122	122
H(14)-C(3)-C(2)	118	117	117	117	117	116	116	115	114	113	112	111	111
H(15)-C(4)-C(3)	108	108	108	108	107	107	107	107	107	106	106	105	104
H(16)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	111
H(17)-C(5)-C(4)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(18)-C(5)-C(4)	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113	113
H(19)-C(8)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(20)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(21)-C(9)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(22)-C(10)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(23)-C(11)-C(9)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120

Таблица 7 – Изменение зарядов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 3-фенилбутена-1

Атом	1	2	3	4	5	6	7	8
H(1)	0,500	0,494	0,491	0,487	0,482	0,471	0,461	0,449
C(2)	0,008	0,014	0,005	-0,006	-0,019	-0,018	-0,036	-0,057
C(3)	-0,065	-0,051	-0,026	0,003	0,034	0,059	0,095	0,133
C(4)	0,017	0,016	0,014	0,012	0,009	0,006	0,002	-0,003
C(5)	0,037	0,036	0,036	0,036	0,036	0,036	0,035	0,035
C(6)	-0,060	-0,073	-0,083	-0,094	-0,106	-0,120	-0,129	-0,136
C(7)	-0,030	-0,030	-0,032	-0,031	-0,032	-0,031	-0,030	-0,029
C(8)	-0,049	-0,049	-0,046	-0,045	-0,044	-0,046	-0,046	-0,045
C(9)	-0,059	-0,058	-0,056	-0,054	-0,054	-0,053	-0,052	-0,052
C(10)	-0,062	-0,061	-0,062	-0,062	-0,061	-0,059	-0,057	-0,056
C(11)	0,026	0,021	0,016	0,011	0,006	0,000	-0,005	-0,008
H(12)	0,064	0,068	0,069	0,071	0,073	0,078	0,082	0,086
H(13)	0,079	0,082	0,084	0,086	0,088	0,092	0,094	0,096
H(14)	0,067	0,069	0,072	0,075	0,078	0,080	0,083	0,085
H(15)	0,042	0,042	0,043	0,044	0,045	0,046	0,048	0,050
H(16)	0,018	0,017	0,016	0,016	0,015	0,014	0,013	0,013
H(17)	0,023	0,025	0,027	0,028	0,030	0,033	0,035	0,037
H(18)	0,007	0,008	0,008	0,009	0,010	0,011	0,012	0,013
H(19)	0,078	0,076	0,074	0,071	0,069	0,066	0,064	0,063
H(20)	0,082	0,080	0,078	0,077	0,075	0,073	0,071	0,070
H(21)	0,093	0,092	0,091	0,090	0,088	0,088	0,086	0,086
H(22)	0,091	0,090	0,089	0,088	0,086	0,085	0,084	0,084
H(23)	0,093	0,092	0,091	0,090	0,089	0,088	0,088	0,087

Продолжение таблицы 7

Атом	9	10	11	12	13	14	15	16	17
H(1)	0,426	0,398	0,391	0,385	0,379	0,372	0,364	0,353	0,341
C(2)	-0,062	-0,068	-0,046	-0,020	0,008	0,041	0,078	0,120	0,165
C(3)	0,159	0,185	0,170	0,152	0,130	0,105	0,076	0,043	0,008
C(4)	-0,007	-0,011	-0,009	-0,007	-0,004	-0,001	0,003	0,008	0,013
C(5)	0,035	0,035	0,036	0,036	0,037	0,038	0,038	0,038	0,037
C(6)	-0,143	-0,149	-0,150	-0,152	-0,154	-0,156	-0,157	-0,158	-0,158
C(7)	-0,028	-0,027	-0,027	-0,028	-0,029	-0,030	-0,031	-0,032	-0,032
C(8)	-0,046	-0,045	-0,047	-0,048	-0,048	-0,047	-0,047	-0,046	-0,045
C(9)	-0,051	-0,051	-0,050	-0,050	-0,050	-0,050	-0,050	-0,050	-0,050
C(10)	-0,054	-0,052	-0,052	-0,051	-0,051	-0,050	-0,050	-0,050	-0,050
C(11)	-0,010	-0,010	-0,011	-0,012	-0,013	-0,014	-0,015	-0,015	-0,015
H(12)	0,093	0,099	0,100	0,100	0,101	0,101	0,101	0,101	0,101
H(13)	0,098	0,101	0,102	0,104	0,105	0,106	0,107	0,108	0,108
H(14)	0,087	0,089	0,090	0,090	0,091	0,092	0,094	0,097	0,100
H(15)	0,051	0,052	0,051	0,050	0,047	0,045	0,042	0,040	0,037
H(16)	0,012	0,012	0,012	0,012	0,011	0,010	0,009	0,008	0,006
H(17)	0,039	0,041	0,041	0,042	0,042	0,043	0,044	0,044	0,044
H(18)	0,014	0,015	0,016	0,016	0,017	0,017	0,018	0,018	0,018
H(19)	0,061	0,061	0,060	0,060	0,059	0,059	0,059	0,058	0,058
H(20)	0,069	0,069	0,068	0,068	0,067	0,066	0,065	0,065	0,064
H(21)	0,086	0,086	0,085	0,085	0,085	0,084	0,084	0,084	0,083
H(22)	0,084	0,084	0,084	0,083	0,083	0,083	0,083	0,082	0,082
H(23)	0,087	0,087	0,087	0,087	0,086	0,086	0,086	0,086	0,086

Продолжение таблицы 7

Атом	18	19	20	21	22	23	24	25	26
H(1)	0,327	0,290	0,272	0,253	0,232	0,210	0,189	0,148	0,102
C(2)	0,214	0,236	0,290	0,343	0,393	0,437	0,472	0,485	0,467
C(3)	-0,028	-0,024	-0,061	-0,094	-0,122	-0,142	-0,155	-0,162	-0,156
C(4)	0,018	0,020	0,025	0,030	0,033	0,036	0,040	0,071	0,093
C(5)	0,036	0,034	0,032	0,030	0,028	0,025	0,022	0,013	0,006
C(6)	-0,158	-0,159	-0,158	-0,157	-0,155	-0,154	-0,152	-0,154	-0,158
C(7)	-0,032	-0,031	-0,032	-0,032	-0,031	-0,030	-0,029	-0,022	-0,013
C(8)	-0,045	-0,042	-0,041	-0,040	-0,038	-0,037	-0,035	-0,024	-0,016
C(9)	-0,050	-0,050	-0,050	-0,050	-0,051	-0,051	-0,051	-0,054	-0,057
C(10)	-0,050	-0,050	-0,050	-0,050	-0,050	-0,050	-0,051	-0,054	-0,056
C(11)	-0,016	-0,015	-0,015	-0,015	-0,015	-0,015	-0,014	-0,005	0,004
H(12)	0,101	0,104	0,104	0,104	0,104	0,105	0,105	0,106	0,104
H(13)	0,109	0,110	0,111	0,111	0,111	0,111	0,110	0,105	0,104
H(14)	0,103	0,106	0,109	0,112	0,114	0,113	0,108	0,089	0,098
H(15)	0,034	0,033	0,030	0,028	0,025	0,024	0,023	0,026	0,028
H(16)	0,004	0,003	0,000	-0,003	-0,006	-0,009	-0,012	-0,011	-0,006
H(17)	0,043	0,044	0,044	0,044	0,045	0,046	0,047	0,051	0,054
H(18)	0,018	0,019	0,018	0,018	0,018	0,019	0,019	0,022	0,025
H(19)	0,058	0,057	0,057	0,057	0,056	0,056	0,056	0,059	0,061
H(20)	0,064	0,063	0,062	0,062	0,061	0,061	0,061	0,062	0,063
H(21)	0,083	0,083	0,082	0,082	0,082	0,082	0,082	0,083	0,085
H(22)	0,082	0,082	0,082	0,081	0,081	0,081	0,081	0,082	0,084
H(23)	0,085	0,085	0,085	0,084	0,084	0,084	0,084	0,085	0,086

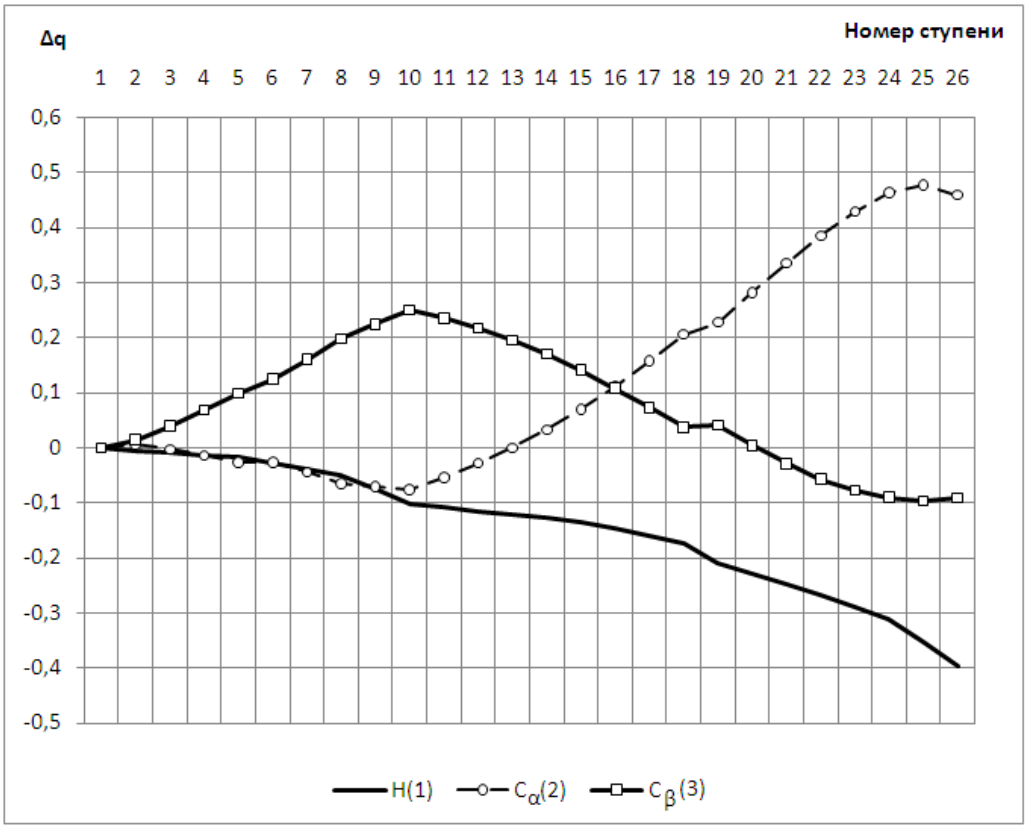

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 3-фенилбутена-1

Список литературы

1. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов /Дж. Кеннеди. – Изд-во «Мир»: М., 1978. – 431 с.
2. Сангалов, Ю. А. Полимеры и сополимеры 4-метилпентена-1 / Ю. А. Сангалов, К. С. Минскер. – Уфа, 2001. – 381 с.
3. Бабкин В.А. Квантовохимический аспект катионной полимеризации олефинов / В.А. Бабкин, Г.Е. Заиков, К.С. Минскер. – Изд-во «Гилем»: Уфа, 1996. – 182 с.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
7. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.
8. Бабкин В.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тетраметилстирола методом AB INITIO. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В.,

Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Титова Е.С. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – С. 22-28.
9. Бабкин В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации 1-метилен-4-винилциклогексана. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Овчарова В.А., Пристансков А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – № 4 (199). – С. 43-47.
10. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 164-170.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 170-186.
12. Овчарова В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации аллилциклогексана. / Овчарова В.А., Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Фомичёв В.Т., Федунов Р.Г., Стоянов О.В., Заиков Г.Е., Сангалов Ю.А. // В сборнике: Состояние, проблемы и перспективы развития социально-ориентированного строительного комплекса на региональном уровне. Материалы IV Всероссийской научно-технической интернет-конференции, посвящённой 15-летию Себряковского филиала ВолгГТУ. – 2017. – С. 116-129.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – № 4 (125). – С. 5-6.
14. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции. – 2017. – С. 17-22.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 107-112.
16. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского

филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 30-36.
17. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 36-42.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРОТОНИРОВАНИЯ П-МЕТОКСИАЛЛИЛБЕНЗОЛА МЕТОДОМ MNDO

Афонина Е.А.

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования п-метоксиаллилбензола классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция экзотермична и имеет без барьерный характер. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α-углеродный атом равен 551 кДж/моль. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

Summary

For the first time it is researched of classical quantum chemical method MNDO of modeling mechanism protonizataion of p-methoxiallylbenzole – monomer of cationic polymerization. Showing, that he considerate some self usual mechanism connection proton to olefin corresponding Morkovnikov's rule. Reaction exothermic and carry without a barrier character. Prize energy in result of reaction – 551 kDg/mol.

***Ключевые слова**: механизм протонирования, метод MNDO, п-метоксиаллилбензол, правило Марковникова.*

***Keywords**: mechanism protonizataion, method MNDO, p-methoxiallylbenzole, Markovnikov's rule.*

Цель настоящей работы – квантово-химическое исследование механизма протонирования п-метоксиаллилбензола классическим полуэмпирическим методом MNDO .

Методическая часть

Используя классические представления о механизме инициирования катионной полимеризации в присутствии различных каталитических комплексов [1-3], для изучения

механизма протонирования был выбран квантовохимический поуэмпирическиий метод MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [4-5], в связи с тем, что этот метод специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … $C_{10}H_{12}O$ (п-метоксиаллилбензол) 24 атома, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M-мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$

Для исследования механизма протонирования п-метоксиаллилбензола выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с п-метоксиаллилбензолом по методике, аналогичной [8-17]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. По полученным данным значений энергий вдоль координат реакции строилась эквипотенциальная поверхность взаимодействий протона п-метоксиаллилбензолом (см. рис. 4.). Исходная модель атаки протона молекулы п-метоксиаллилбензола показана на рис. 1.

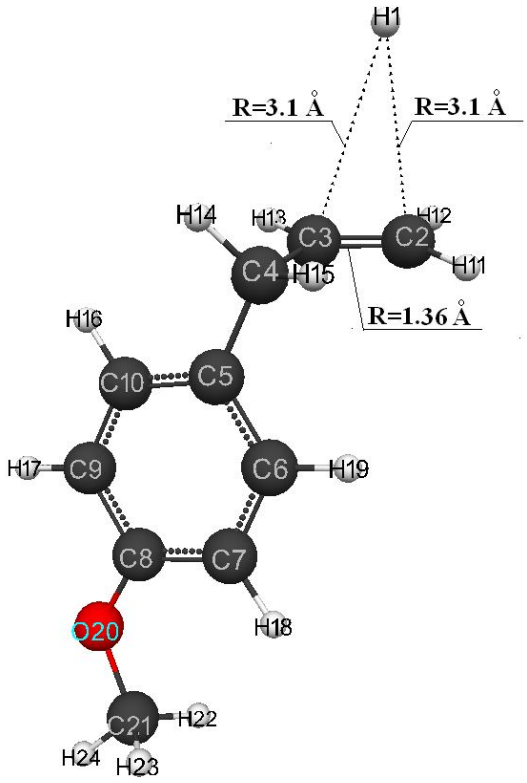

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы п-метоксиаллилбензола

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt[6].

Результаты расчетов

Значения энергий молекулярной системы H^+ … $C_{10}H_{12}O$ вдоль координат реакций R_{H1C2} и R_{H1C3} показаны в таблице 1. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома п-метоксиаллилбензола (C_2) и разрыва двойной связи п-метоксиаллилбензола представлена на рис. 2. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома п-метоксиаллилбензола (C_3) и разрыва двойной связи $C_2 = C_3$ показана на рис. 3. Заряды на атомах конечных моделей сформированных карбкатионнов представлены в табл. 2. Изменение общей энергии при протонизации п-метоксиаллилбензола показано в табл. 1, из которой видно, что на всем пути движения протона (инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы H^+ … $C_{10}H_{12}O$ (E_0) неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона (см. рис. 4) и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β- углеродные атомы п-метоксиаллилбензола. Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 26 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β-углеродного атома, что находится в полном соответствии с классическим правилом Марковникова. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α- углеродный атом равен 551 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 525 кДж/моль.

Более того, по pKa=42,11-147,18q_{max}^{H+}[7] (q_{max}^{H+} = +0,124- максимальный заряд на атоме водорода, pKa- универсальный показатель кислотности), находим значение кислотной силы сформированных карбкатионов, равное pKa = 24

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы п-метоксиаллилбензола свидетельствует о том, что механизм протонирования катионной полимеризации п-метоксиаллилбензола идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования п-метоксиаллилбензола квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

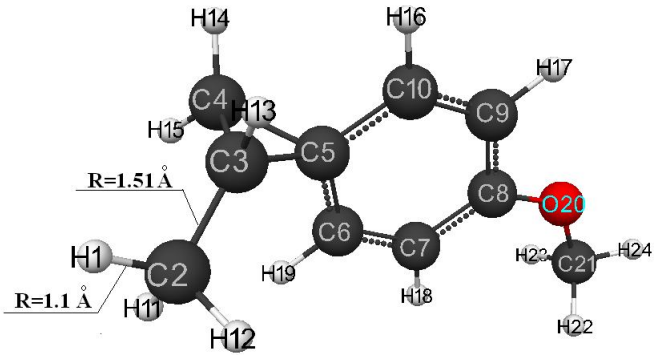

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома п-метоксиаллилбензола (C_2)

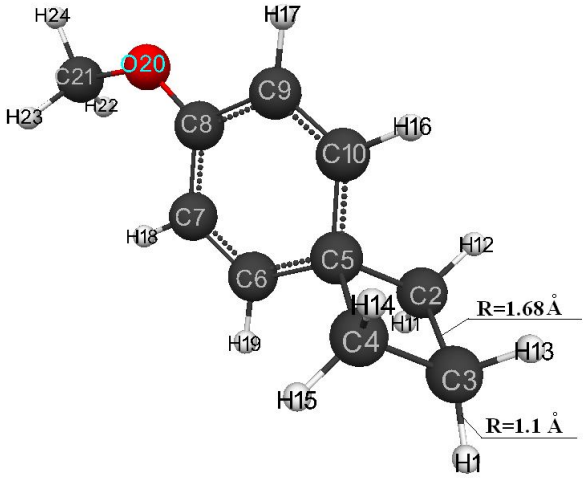

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β – углеродного атома п-метоксиаллилбензола (C_3)

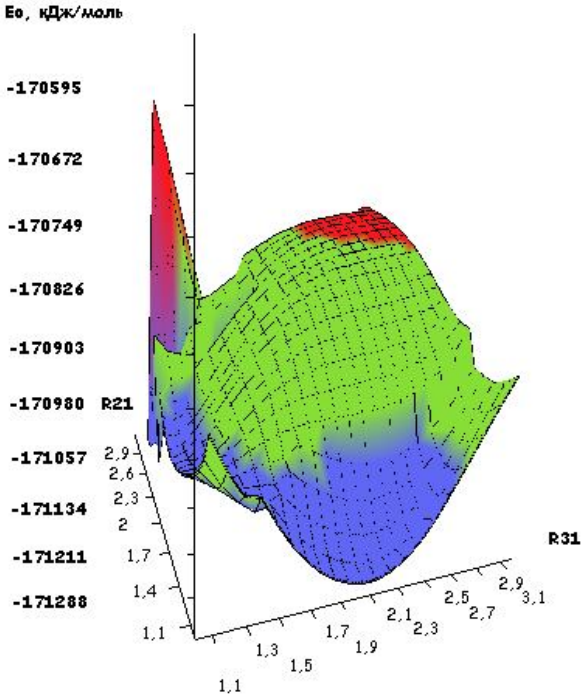

Рис. 4 – Потенциальная поверхность энергий взаимодействий протона с п-метоксиаллилбензолом

Таблица 1 – Изменение общей энергии молекулярной системы H^+ … $C_{10}H_{12}O$ – E_o (в кДж/моль) вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} (в А)

R_{H1C3}	R_{H1C2}										
	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
3,1	0	-3	-5	-10	-16	-21	-32	-42	-55	-71	-89
3,0	-3	-5	-8	-13	-18	-24	-34	-45	-60	-76	-97
2,9	-535	-8	-10	-16	-21	-26	-37	-47	-63	-81	-102
2,8	-535	-10	-13	-18	-24	-32	-39	-52	-66	-84	-108
2,7	-535	-16	-18	-24	-29	-34	-45	-55	-71	-89	-110

2,6	-535	-21	-24	-26	-34	-39	-50	-60	-76	-92	-115
2,5	-533	-26	-29	-34	-39	-47	-55	-66	-81	-97	-121
2,4	-530	-34	-37	-42	-47	-55	-63	-73	-87	-105	-126
2,3	-525	-45	-47	-52	-58	-66	-73	-84	-97	-113	-131
2,2	-517	-55	-60	-66	-71	-79	-87	-95	-108	-123	-142
2,1	-507	-71	-76	-84	-89	-95	-102	-113	-123	-136	-152
2,0	-491	-87	-97	-105	-110	-118	-123	-131	-142	-152	-168
1,9	-465	-105	-118	-129	-136	-142	-150	-158	-165	-176	-186
1,8	-381	-402	-142	-155	-454	-173	-181	-186	-194	-202	-213
1,7	-323	-357	-163	-184	-425	-207	-215	-221	-228	-234	-242
1,6	-239	-291	-184	-210	-388	-244	-255	-260	-268	-273	-278
1,5	-129	-199	-194	-234	-344	-281	-294	-302	-310	-312	-318
1,4	-10	-87	-407	-247	-286	-315	-333	-344	-352	-354	-357
1,3	110	37	-423	-462	-294	-336	-365	-383	-391	-396	-396
1,2	218	-538	-420	-465	-286	-336	-375	-402	-420	-425	-425
1,1	-551	-551	-391	-441	-247	-525	-354	-394	-417	-433	-436

Продолжение таблицы 1

R_{H1C3}	R_{H1C2}									
	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
3,1	-108	-126	-144	-155	-158	-226	-231	-231	-221	-194
3,0	-118	-142	-165	-189	-205	-276	-286	-286	-273	-244
2,9	-126	-152	-181	-213	-239	-315	-336	-341	-328	-297
2,8	-131	-160	-194	-228	-262	-346	-375	-388	-383	-352
2,7	-136	-168	-202	-242	-281	-370	-407	-431	-433	-404
2,6	-142	-173	-207	-249	-291	-386	-431	-462	-472	-454
2,5	-147	-176	-213	-255	-299	-394	-444	-483	-504	-494
2,4	-150	-181	-218	-257	-305	-396	-451	-496	-525	-522
2,3	-158	-186	-221	-262	-307	-396	-454	-504	-535	-541
2,2	-163	-192	-226	-265	-310	-391	-451	-504	-541	-551
2,1	-173	-199	-231	-268	-310	-383	-444	-496	-535	-551
2,0	-186	-210	-239	-273	-312	-370	-431	-486	-525	-543
1,9	-202	-223	-249	-278	-315	-354	-412	-467	-509	-528
1,8	-226	-242	-262	-289	-320	-336	-394	-446	-488	-507
1,7	-252	-265	-281	-302	-328	-360	-368	-420	-459	-478
1,6	-284	-294	-305	-320	-339	-362	-388	-388	-425	-441
1,5	-320	-325	-333	-341	-354	-370	-386	-402	-383	-396
1,4	-360	-360	-362	-365	-370	-378	-386	-391	-388	-344
1,3	-394	-394	-391	-388	-386	-383	-383	-378	-365	-336
1,2	-423	-417	-409	-402	-394	-383	-370	-354	-331	-289
1,1	-431	-423	-412	-399	-383	-365	-344	-318	-281	-226

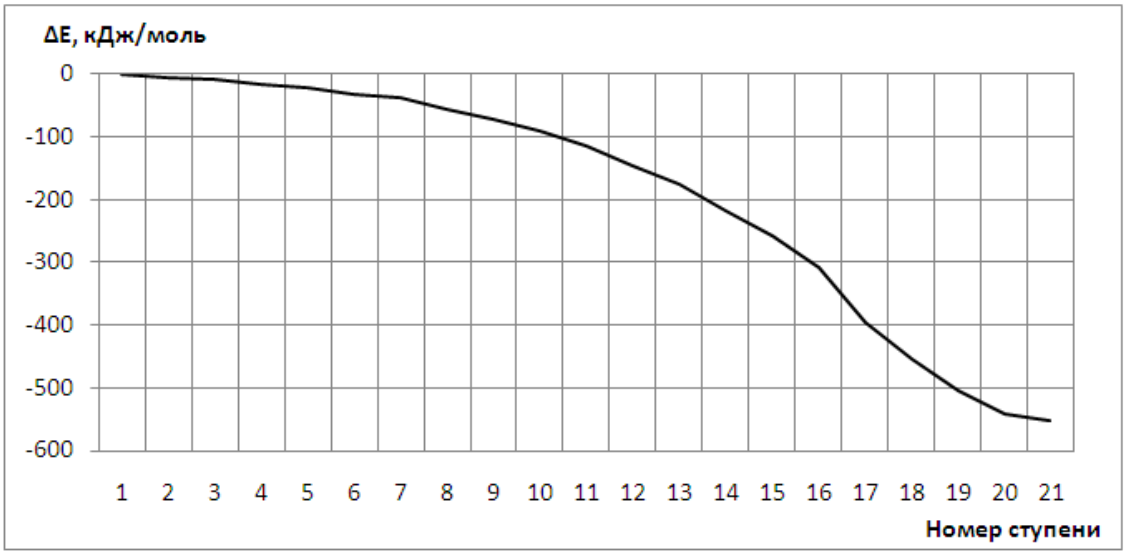

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому п-метоксиаллилбензола

Таблица 2 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому п-метоксиаллилбензола

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-H(1)	3,10	3,00	3,00	2,90	2,90	2,80	2,80	2,70	2,70	2,60
C(3)-C(2)	1,36	1,36	1,36	1,37	1,37	1,38	1,38	1,39	1,39	1,40
C(4)-C(5)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,50	1,50	1,50	1,50
C(5)-C(10)	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(6)-C(5)	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,41
C(7)-C(6)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
C(8)-C(7)	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42
C(9)-C(8)	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,43	1,43	1,43
C(10)-C(9)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(12)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(13)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(14)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12
H(15)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(17)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(19)-C(6)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
O(20)-C(8)	1,34	1,34	1,34	1,34	1,34	1,34	1,34	1,35	1,35	1,35
C(21)-O(20)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
H(22)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(23)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(24)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12

Продолжение таблицы 2

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-H(1)	2,60	2,50	2,50	2,40	2,40	2,30	2,30	2,30	2,20	2,20	2,10
C(3)-C(2)	1,40	1,41	1,42	1,42	1,43	1,44	1,49	1,50	1,50	1,51	1,51
C(4)-C(5)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,52	1,52	1,57	1,57	1,57	1,57	1,57
C(4)-C(3)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,49	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(5)-C(10)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,48	1,48	1,48	1,48	1,48
C(6)-C(5)	1,41	1,41	1,42	1,42	1,42	1,42	1,48	1,48	1,48	1,48	1,48
C(7)-C(6)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37
C(8)-C(7)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,43	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45
C(9)-C(8)	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,46	1,46	1,46	1,46	1,46
C(10)-C(9)	1,40	1,40	1,40	1,39	1,39	1,39	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11
H(12)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11
H(13)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(15)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(16)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(17)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(19)-C(6)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
O(20)-C(8)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,34	1,34	1,31	1,31	1,31	1,31	1,31
C(21)-O(20)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
H(22)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(23)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(24)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Таблица 3 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому n-метоксиаллилбензола

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	81	80	84	83	87	87	90	90
C(4)-C(5)-C(10)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(5)-C(10)-C(9)	122	122	122	122	122	122	122	121	121	121
C(6)-C(5)-C(10)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
C(7)-C(6)-C(5)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(8)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(9)-C(8)-C(7)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
C(10)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(11)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	123	123	123	123
H(12)-C(2)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	121	121	121
H(13)-C(3)-C(2)	119	119	119	119	119	118	118	118	118	118
H(14)-C(4)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(4)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(10)-C(9)	119	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(17)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(18)-C(7)-C(6)	119	119	118	118	118	118	118	118	118	118
H(19)-C(6)-C(5)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
O(20)-C(8)-C(7)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(21)-O(20)-C(8)	126	126	126	126	125	125	125	125	125	125
H(22)-C(21)-O(20)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(23)-C(21)-O(20)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(24)-C(21)-O(20)	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106

Продолжение таблицы 3

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	94	93	97	96	100	98	101	105	103	108	106
C(4)-C(5)-C(10)	121	121	121	121	121	121	119	119	119	119	119
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	125	125	125	125	125
C(5)-C(10)-C(9)	121	121	121	121	121	121	123	123	123	123	123
C(6)-C(5)-C(10)	118	118	118	118	118	118	114	114	114	114	114
C(7)-C(6)-C(5)	122	122	122	122	122	122	123	123	123	123	123
C(8)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	121	121	121	121	121
C(9)-C(8)-C(7)	119	119	119	119	119	119	118	118	118	118	118
C(10)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	121	121	121	121	121
H(11)-C(2)-C(3)	122	122	122	121	120	120	118	116	116	114	114
H(12)-C(2)-C(3)	121	120	120	119	118	118	115	114	113	111	111
H(13)-C(3)-C(2)	118	118	118	117	117	117	110	110	110	110	110
H(14)-C(4)-C(5)	111	111	111	111	111	112	118	117	118	118	118
H(15)-C(4)-C(5)	111	111	111	111	112	112	118	118	118	118	118
H(16)-C(10)-C(9)	118	118	118	118	118	118	119	119	119	119	119
H(17)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	119	119	119	119	119
H(18)-C(7)-C(6)	118	118	118	118	118	118	119	119	119	119	119
H(19)-C(6)-C(5)	120	120	120	120	120	120	118	118	118	118	118
O(20)-C(8)-C(7)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(21)-O(20)-C(8)	125	125	125	125	125	125	128	128	128	128	128
H(22)-C(21)-O(20)	112	112	112	112	112	112	111	111	111	111	111
H(23)-C(21)-O(20)	112	112	112	112	112	112	111	111	111	111	111
H(24)-C(21)-O(20)	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106

Таблица 4 – Изменение зарядов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому п-метоксиаллилбензола

Атом	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)	0,480	0,472	0,468	0,458	0,453	0,441	0,433	0,417	0,404	0,379
C(2)	-0,008	0,000	-0,007	0,001	-0,009	-0,003	-0,018	-0,016	-0,038	-0,039
C(3)	-0,097	-0,082	-0,059	-0,040	-0,010	0,014	0,051	0,078	0,119	0,145
C(4)	0,068	0,067	0,065	0,063	0,060	0,058	0,054	0,051	0,046	0,042
C(5)	-0,097	-0,110	-0,119	-0,134	-0,145	-0,161	-0,173	-0,186	-0,196	-0,204
C(6)	0,022	0,023	0,023	0,023	0,023	0,024	0,024	0,024	0,025	0,026
C(7)	-0,142	-0,143	-0,143	-0,144	-0,145	-0,146	-0,146	-0,147	-0,147	-0,147
C(8)	0,233	0,230	0,228	0,225	0,222	0,218	0,215	0,212	0,211	0,210
C(9)	-0,081	-0,082	-0,083	-0,085	-0,086	-0,088	-0,088	-0,090	-0,090	-0,090
C(10)	0,002	0,003	0,005	0,006	0,008	0,009	0,010	0,011	0,012	0,013
H(11)	0,065	0,070	0,071	0,076	0,078	0,083	0,086	0,090	0,093	0,096
H(12)	0,070	0,071	0,072	0,075	0,077	0,081	0,083	0,087	0,090	0,094
H(13)	0,078	0,080	0,082	0,084	0,087	0,089	0,092	0,094	0,096	0,098
H(14)	0,023	0,026	0,030	0,032	0,036	0,039	0,043	0,046	0,050	0,053
H(15)	0,019	0,022	0,022	0,024	0,026	0,028	0,030	0,033	0,036	0,039
H(16)	0,077	0,076	0,075	0,073	0,072	0,070	0,068	0,066	0,066	0,065
H(17)	0,104	0,103	0,102	0,102	0,101	0,100	0,099	0,099	0,098	0,098
H(18)	0,090	0,089	0,088	0,088	0,087	0,086	0,085	0,085	0,084	0,084
H(19)	0,073	0,071	0,070	0,068	0,066	0,064	0,062	0,060	0,059	0,059
O(20)	-0,246	-0,248	-0,250	-0,253	-0,256	-0,259	-0,262	-0,264	-0,266	-0,267
C(21)	0,201	0,202	0,202	0,203	0,203	0,204	0,204	0,205	0,205	0,206
H(22)	0,008	0,007	0,006	0,004	0,003	0,002	0,001	-0,001	-0,001	-0,002
H(23)	0,010	0,008	0,008	0,006	0,006	0,004	0,003	0,002	0,002	0,001
H(24)	0,048	0,047	0,046	0,045	0,044	0,043	0,042	0,041	0,041	0,041

Продолжение таблицы 4

Атом	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)	0,359	0,327	0,303	0,267	0,240	0,204	0,034	0,041	0,039	0,043	0,038
C(2)	-0,065	-0,067	-0,092	-0,091	-0,111	-0,103	-0,006	0,002	0,012	0,023	0,036
C(3)	0,186	0,211	0,251	0,274	0,308	0,321	0,027	0,022	0,018	0,013	0,009
C(4)	0,036	0,032	0,026	0,023	0,018	0,016	0,058	0,058	0,058	0,058	0,058
C(5)	-0,209	-0,215	-0,220	-0,225	-0,231	-0,236	-0,251	-0,248	-0,248	-0,246	-0,246
C(6)	0,027	0,029	0,031	0,034	0,038	0,042	0,167	0,168	0,168	0,169	0,169
C(7)	-0,148	-0,148	-0,149	-0,150	-0,152	-0,153	-0,221	-0,222	-0,222	-0,222	-0,222
C(8)	0,211	0,213	0,216	0,219	0,224	0,230	0,389	0,390	0,390	0,391	0,391
C(9)	-0,091	-0,091	-0,092	-0,093	-0,094	-0,096	-0,169	-0,169	-0,169	-0,169	-0,169
C(10)	0,014	0,015	0,016	0,018	0,021	0,024	0,138	0,139	0,139	0,139	0,139
H(11)	0,098	0,100	0,100	0,101	0,099	0,097	0,034	0,027	0,024	0,017	0,015
H(12)	0,095	0,098	0,099	0,101	0,099	0,098	0,043	0,036	0,034	0,026	0,024
H(13)	0,099	0,100	0,100	0,102	0,101	0,102	0,076	0,076	0,075	0,075	0,075
H(14)	0,058	0,060	0,065	0,068	0,071	0,074	0,074	0,074	0,074	0,074	0,074
H(15)	0,043	0,046	0,051	0,054	0,059	0,063	0,074	0,074	0,074	0,074	0,074
H(16)	0,065	0,065	0,066	0,066	0,067	0,068	0,098	0,098	0,098	0,098	0,098
H(17)	0,099	0,099	0,100	0,101	0,102	0,103	0,124	0,124	0,124	0,124	0,124
H(18)	0,085	0,085	0,086	0,087	0,088	0,089	0,109	0,110	0,110	0,110	0,110
H(19)	0,059	0,059	0,060	0,061	0,063	0,064	0,095	0,096	0,096	0,096	0,096
O(20)	-0,267	-0,267	-0,266	-0,265	-0,264	-0,262	-0,217	-0,217	-0,217	-0,216	-0,216
C(21)	0,206	0,205	0,205	0,205	0,204	0,204	0,197	0,197	0,197	0,197	0,197
H(22)	-0,002	-0,002	-0,001	0,000	0,001	0,002	0,029	0,029	0,029	0,029	0,029
H(23)	0,002	0,002	0,002	0,003	0,004	0,005	0,029	0,029	0,029	0,030	0,030
H(24)	0,041	0,041	0,042	0,043	0,044	0,045	0,068	0,068	0,068	0,068	0,068

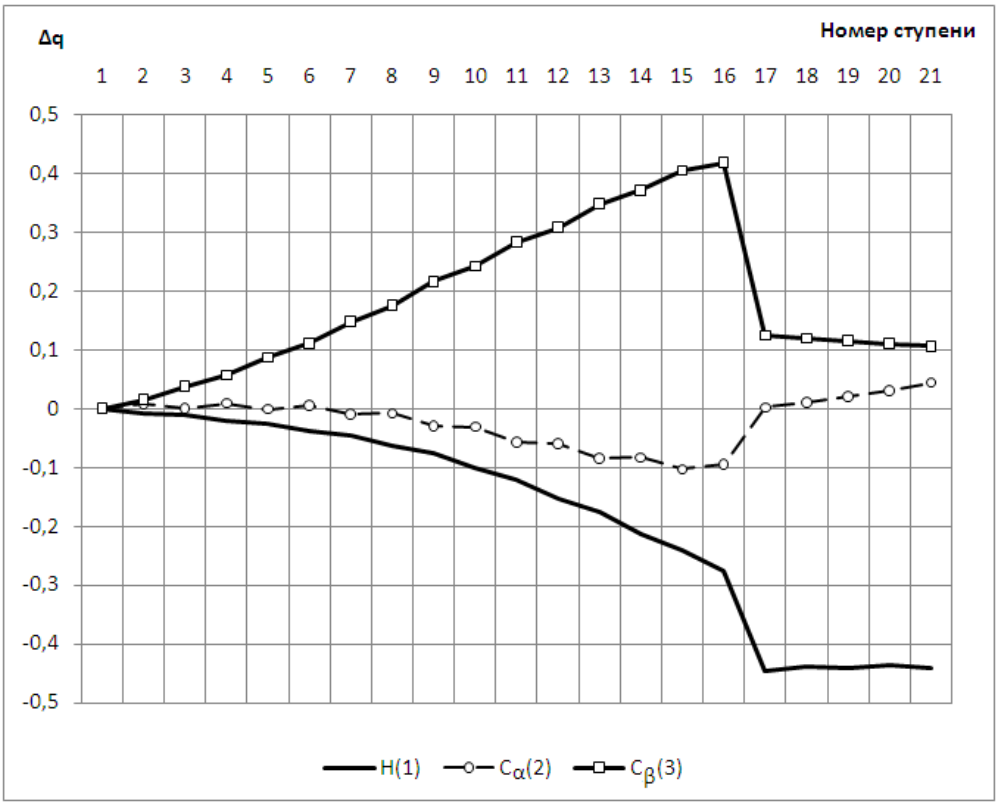

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому п-метоксиаллилбензола

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому п-метоксиаллилбензола

Таблица 5 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому п-метоксиаллилбензола

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,60	2,60	2,60	2,60
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-C(2)	1,36	1,36	1,37	1,37	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,40
C(4)-C(5)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(5)-C(10)	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(6)-C(5)	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,41	1,41
C(7)-C(6)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
C(8)-C(7)	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42
C(9)-C(8)	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,43	1,43	1,43	1,43
C(10)-C(9)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(12)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(13)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(14)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(17)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(19)-C(6)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
O(20)-C(8)	1,34	1,34	1,34	1,34	1,34	1,34	1,35	1,35	1,35	1,35
C(21)-O(20)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
H(22)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(23)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(24)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12

Продолжение таблицы 5

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,60	2,60	2,60	2,60	2,60	2,60	2,60	2,60	2,60	2,60	2,60
C(3)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-C(2)	1,40	1,41	1,41	1,42	1,43	1,44	1,46	1,48	1,52	1,57	1,68
C(4)-C(5)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,50	1,50	1,50	1,50	1,58
C(4)-C(3)	1,52	1,52	1,52	1,53	1,54	1,55	1,56	1,59	1,59	1,59	1,55
C(5)-C(10)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,51
C(6)-C(5)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,42	1,42	1,42	1,42	1,51
C(7)-C(6)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,37
C(8)-C(7)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,46
C(9)-C(8)	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,46
C(10)-C(9)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,37
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(12)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(13)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,11
H(15)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(17)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(19)-C(6)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
O(20)-C(8)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,31
C(21)-O(20)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,43
H(22)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11
H(23)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11
H(24)-C(21)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11

Таблица 6 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому n-метоксиаллилбензола

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	76	76	75	75	70	66	62	58
C(4)-C(5)-C(10)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	125
C(5)-C(10)-C(9)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(6)-C(5)-C(10)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
C(7)-C(6)-C(5)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(8)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(9)-C(8)-C(7)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
C(10)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(11)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	124	124	123	123
H(12)-C(2)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
H(13)-C(3)-C(2)	119	119	119	119	119	118	118	118	118	118
H(14)-C(4)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	110	110
H(15)-C(4)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(10)-C(9)	119	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(17)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(18)-C(7)-C(6)	119	119	118	118	118	118	118	118	118	118
H(19)-C(6)-C(5)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
O(20)-C(8)-C(7)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(21)-O(20)-C(8)	126	126	126	125	125	125	125	125	125	125
H(22)-C(21)-O(20)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(23)-C(21)-O(20)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(24)-C(21)-O(20)	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106

Продолжение таблицы 6

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	54	50	46	41	37	33	29	25	21	18	16
C(4)-C(5)-C(10)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	113
C(4)-C(3)-C(2)	125	124	124	122	121	119	116	111	107	104	87
C(5)-C(10)-C(9)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	124
C(6)-C(5)-C(10)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	112
C(7)-C(6)-C(5)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	124
C(8)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	121
C(9)-C(8)-C(7)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119	118
C(10)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	121
H(11)-C(2)-C(3)	123	123	123	123	123	123	123	122	122	122	114
H(12)-C(2)-C(3)	122	121	121	121	121	121	121	120	120	119	112
H(13)-C(3)-C(2)	118	117	117	116	114	113	112	110	107	104	105
H(14)-C(4)-C(5)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	109	114
H(15)-C(4)-C(5)	111	111	111	111	111	111	112	112	112	112	113
H(16)-C(10)-C(9)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	119
H(17)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	119
H(18)-C(7)-C(6)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	119
H(19)-C(6)-C(5)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	117
O(20)-C(8)-C(7)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(21)-O(20)-C(8)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125	129
H(22)-C(21)-O(20)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	111
H(23)-C(21)-O(20)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	111
H(24)-C(21)-O(20)	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	105

Таблица 7 – Изменение зарядов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому п-метоксиаллилбензола

Атом	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)	0,480	0,472	0,463	0,454	0,442	0,430	0,425	0,421	0,418	0,414
C(2)	-0,008	0,000	0,009	0,020	0,031	0,043	0,071	0,104	0,142	0,185
C(3)	-0,097	-0,082	-0,066	-0,049	-0,029	-0,008	-0,020	-0,034	-0,050	-0,071
C(4)	0,068	0,067	0,065	0,064	0,062	0,060	0,062	0,064	0,066	0,069
C(5)	-0,097	-0,110	-0,123	-0,138	-0,154	-0,170	-0,176	-0,184	-0,192	-0,201
C(6)	0,022	0,023	0,023	0,023	0,023	0,023	0,022	0,021	0,019	0,017
C(7)	-0,142	-0,143	-0,144	-0,144	-0,145	-0,146	-0,145	-0,145	-0,145	-0,144
C(8)	0,233	0,230	0,227	0,223	0,219	0,215	0,212	0,208	0,203	0,198
C(9)	-0,081	-0,082	-0,084	-0,085	-0,087	-0,088	-0,088	-0,088	-0,088	-0,088
C(10)	0,002	0,003	0,005	0,006	0,008	0,009	0,009	0,008	0,007	0,006
H(11)	0,065	0,070	0,074	0,078	0,083	0,088	0,091	0,094	0,096	0,099
H(12)	0,070	0,071	0,073	0,076	0,080	0,084	0,086	0,088	0,090	0,092
H(13)	0,078	0,080	0,082	0,085	0,088	0,091	0,093	0,095	0,097	0,100
H(14)	0,023	0,026	0,028	0,031	0,034	0,037	0,036	0,036	0,036	0,036
H(15)	0,019	0,022	0,023	0,025	0,027	0,028	0,028	0,027	0,026	0,025
H(16)	0,077	0,076	0,074	0,072	0,070	0,067	0,066	0,064	0,062	0,060
H(17)	0,104	0,103	0,102	0,101	0,100	0,099	0,098	0,098	0,097	0,096
H(18)	0,090	0,089	0,088	0,087	0,086	0,085	0,085	0,084	0,083	0,082
H(19)	0,073	0,071	0,069	0,067	0,064	0,062	0,060	0,059	0,057	0,055
O(20)	-0,246	-0,248	-0,251	-0,254	-0,258	-0,261	-0,263	-0,265	-0,268	-0,270
C(21)	0,201	0,202	0,202	0,203	0,204	0,204	0,205	0,205	0,206	0,206
H(22)	0,008	0,007	0,006	0,004	0,002	0,001	0,000	-0,001	-0,003	-0,004
H(23)	0,010	0,008	0,007	0,006	0,005	0,003	0,003	0,002	0,001	0,000
H(24)	0,048	0,047	0,046	0,045	0,044	0,042	0,042	0,041	0,040	0,038

Продолжение таблицы 7

Атом	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)	0,405	0,391	0,373	0,352	0,329	0,302	0,259	0,204	0,175	0,157	0,073
C(2)	0,228	0,271	0,315	0,358	0,399	0,435	0,459	0,472	0,484	0,498	0,034
C(3)	-0,097	-0,126	-0,156	-0,184	-0,207	-0,223	-0,228	-0,214	-0,186	-0,144	-0,034
C(4)	0,072	0,075	0,079	0,082	0,085	0,090	0,103	0,111	0,096	0,072	0,019
C(5)	-0,207	-0,210	-0,213	-0,217	-0,222	-0,228	-0,237	-0,246	-0,250	-0,252	-0,155
C(6)	0,016	0,015	0,014	0,014	0,014	0,014	0,016	0,018	0,017	0,013	0,157
C(7)	-0,144	-0,144	-0,145	-0,145	-0,146	-0,146	-0,148	-0,150	-0,149	-0,148	-0,229
C(8)	0,196	0,195	0,196	0,196	0,198	0,201	0,209	0,217	0,218	0,214	0,413
C(9)	-0,088	-0,088	-0,088	-0,089	-0,090	-0,091	-0,093	-0,097	-0,097	-0,096	-0,178
C(10)	0,006	0,005	0,005	0,005	0,006	0,008	0,016	0,024	0,024	0,021	0,128
H(11)	0,101	0,102	0,102	0,103	0,103	0,102	0,099	0,099	0,102	0,104	0,044
H(12)	0,094	0,095	0,095	0,096	0,097	0,099	0,102	0,104	0,107	0,111	0,048
H(13)	0,103	0,105	0,106	0,108	0,106	0,101	0,088	0,077	0,070	0,061	0,024
H(14)	0,036	0,036	0,037	0,037	0,039	0,042	0,047	0,055	0,061	0,064	0,041
H(15)	0,024	0,023	0,022	0,023	0,023	0,025	0,028	0,031	0,032	0,031	0,039
H(16)	0,059	0,059	0,059	0,059	0,060	0,061	0,064	0,067	0,068	0,067	0,104
H(17)	0,095	0,095	0,095	0,095	0,096	0,097	0,099	0,100	0,101	0,100	0,126
H(18)	0,081	0,081	0,082	0,082	0,082	0,083	0,084	0,086	0,086	0,086	0,112
H(19)	0,054	0,054	0,055	0,055	0,056	0,056	0,056	0,057	0,057	0,057	0,103
O(20)	-0,272	-0,272	-0,272	-0,271	-0,271	-0,270	-0,268	-0,266	-0,265	-0,266	-0,207
C(21)	0,207	0,207	0,207	0,207	0,206	0,206	0,206	0,205	0,205	0,205	0,197
H(22)	-0,005	-0,005	-0,005	-0,005	-0,005	-0,004	-0,003	-0,002	-0,002	-0,002	0,034
H(23)	-0,001	-0,001	-0,001	0,000	0,000	0,001	0,002	0,004	0,004	0,004	0,034
H(24)	0,038	0,038	0,038	0,038	0,039	0,040	0,041	0,043	0,043	0,043	0,072

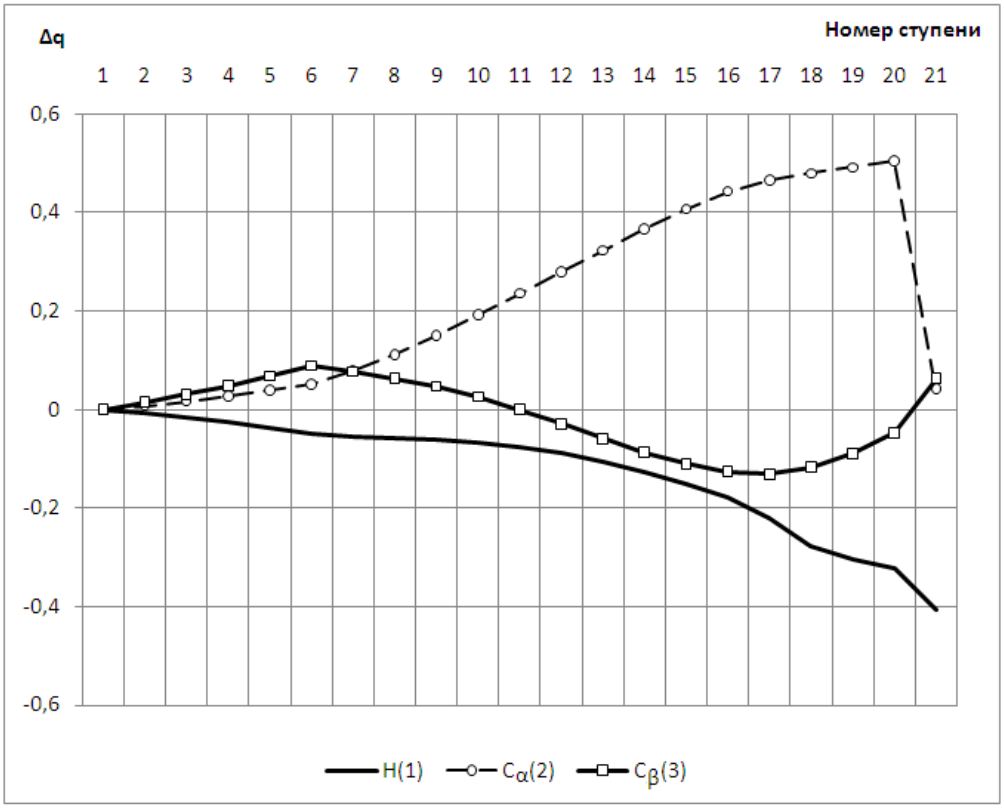

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому п-метоксиаллилбензола

Список литературы

1. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов /Дж. Кеннеди. – Изд-во «Мир»: М., 1978. – 431 с.
2. Сангалов, Ю. А. Полимеры и сополимеры 4-метилпентена-1 / Ю. А. Сангалов, К. С. Минскер. – Уфа, 2001. – 381 с.
3. Бабкин В.А. Квантовохимический аспект катионной полимеризации олефинов / В.А. Бабкин, Г.Е. Заиков, К.С. Минскер. – Изд-во «Гилем»: Уфа, 1996. – 182 с.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
7. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.
8. Бабкин В.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тетраметилстирола методом AB INITIO. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Титова Е.С. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – С. 22-28.
9. Бабкин В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации 1-метилен-4-винилциклогексана. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Овчарова В.А., Пристансков А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – № 4 (199). – С. 43-47.
10. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 164-170.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 170-186.
12. Овчарова В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации аллилциклогексана. / Овчарова В.А., Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Фомичёв В.Т., Федунов Р.Г., Стоянов О.В., Заиков Г.Е., Сангалов Ю.А. // В сборнике: Состояние, проблемы и перспективы развития социально-ориентированного строительного комплекса на региональном уровне. Материалы IV Всероссийской научно-технической

интернет-конференции, посвящённой 15-летию Себряковского филиала ВолгГТУ. – 2017. – С. 116-129.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – № 4 (125). – С. 5-6.
14. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции. – 2017. – С. 17-22.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 107-112.
16. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 30-36.
17. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 36-42.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРОТОНИРОВАНИЯ О-МЕТОКСИАЛЛИЛБЕНЗОЛА МЕТОДОМ MNDO

Афонина Е.А.

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования о-метоксиаллилбензола классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция экзотермична и имеет безбарьерный характер. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α-углеродный атом равен 499 кДж/моль. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

Summary

For the first time it is researched of classical quantum chemical method MNDO of modeling mechanism protonizataion of o-methoxiallylbenzole – monomer of cationic polymerization. Showing, that he considerate some self usual mechanism connection proton to olefin corresponding Morkovnikov's rule. Reaction exothermic and carry without a barrier character. Prize energy in result of reaction – 499 kDg/mol.

Ключевые слова*: механизм протонирования, метод MNDO, о-метоксиаллилбензол, правило Марковникова.*

Keywords*: mechanism protonizataion, method MNDO, o-methoxiallylbenzole, Markovnikov's rule.*

Цель настоящей работы – квантово-химическое исследование механизма протонирования о-метоксиаллилбензола классическим полуэмпирическим методом MNDO .

Методическая часть

Используя классические представления о механизме инициирования катионной полимеризации в присутствии различных каталитических комплексов [1-3], для изучения механизма протонирования был выбран квантовохимический поуэмпирическиий метод MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [4-5], в связи с тем, что этот метод специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … $C_{10}H_{12}O$ (о-метоксиаллилбензол) 23 атома, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M-мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$.

Для исследования механизма протонирования о-метоксиаллилбензола выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с о-метоксиаллилбензолом по методике, аналогичной [8-17]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. По полученным данным значений энергий вдоль координат реакции строилась эквипотенциальная поверхность взаимодействий протона о-метоксиаллилбензолом (см. рис. 4). Исходная модель атаки протона молекулы о-метоксиаллилбензола показана на рис. 1.

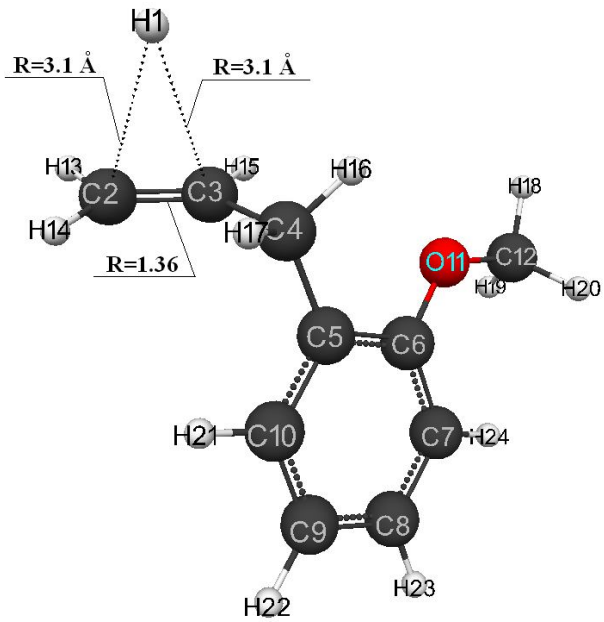

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы о-метоксиаллилбензола

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt [6].

Результаты расчетов

Значения энергий молекулярной системы H^+ … $C_{10}H_{12}O$ вдоль координат реакций R_{H1C2} и R_{H1C3} показаны в таблице 1. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома о-метоксиаллилбензола (C_2) и разрыва двойной связи о-метоксиаллилбензола представлена на рис. 2. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома о-метоксиаллилбензола (C_3) и разрыва двойной связи $C_2 = C_3$ показана на рис. 3. Заряды на атомах конечных моделей сформированных карбкатионнов представлены в табл. 2. Изменение общей энергии при протонизации о-метоксиаллилбензола показано в табл. 1, из которой видно, что на всем пути движения протона (инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы H^+ … $C_{10}H_{12}O$ (E_0) неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона (см. рис. 4) и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β- углеродные атомы о-метоксиаллилбензола. Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 16 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β-углеродного атома, что находится в полном соответствии с классическим правилом Марковникова. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α- углеродный атом равен 499 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 483 кДж/моль.

Более того, по pKa=42,11-147,18q_{max}^{H+} [7] (q_{max}^{H+} = +0,105- максимальный заряд на атоме водорода, pKa- универсальный показатель кислотности), находим значение кислотной силы сформированных карбкатионов, равное pKa = 27.

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин

связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы о-метоксиаллилбензола свидетельствует о том, что механизм протонирования катионной полимеризации о-метоксиаллилбензола идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования о-метоксиаллилбензола квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

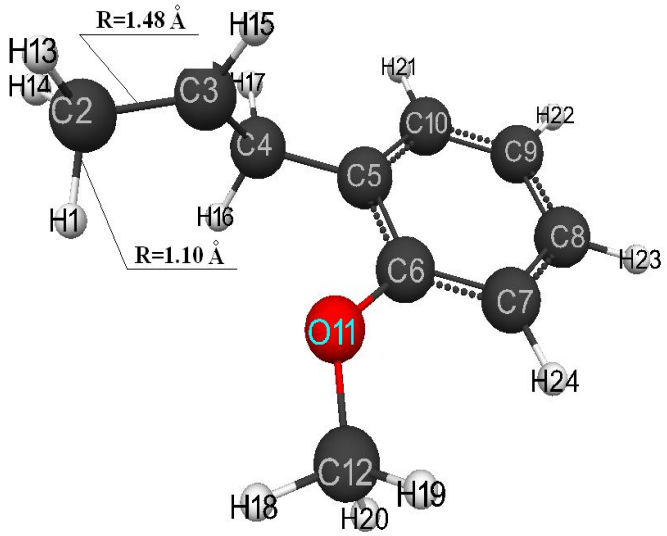

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α – углеродного атома о-метоксиаллилбензола (C_2)

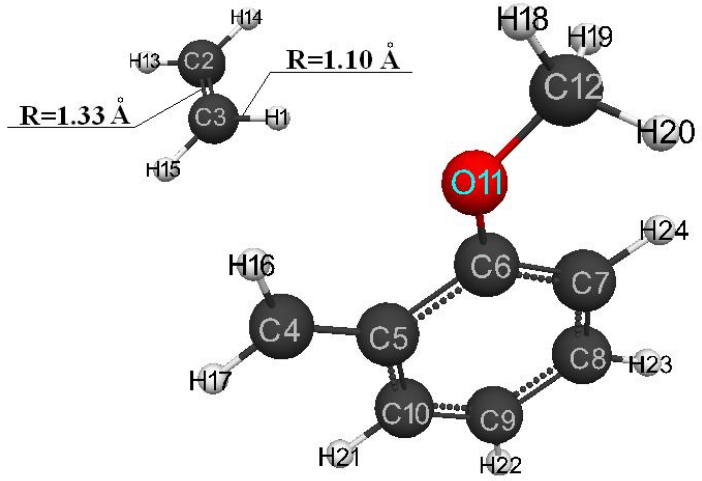

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β – углеродного атома о-метоксиаллилбензола (C_3)

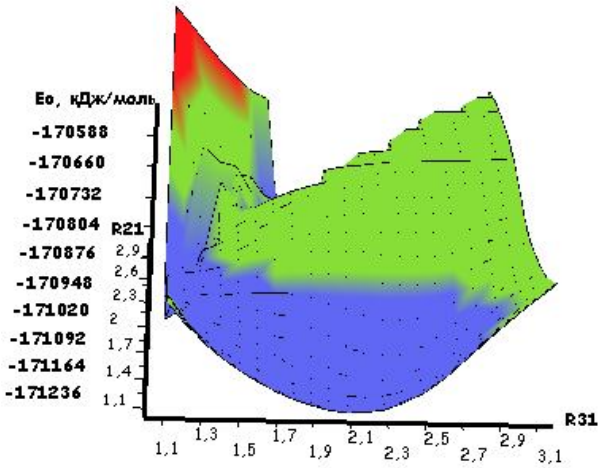

Рис. 4 – Потенциальная поверхность энергий взаимодействий протона с о-метоксиаллилбензолом

Таблица 1 – Изменение общей энергии молекулярной системы H^+ ... $C_{10}H_{12}O$- E_o (в кДж/моль) вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} (в А)

R_{H1C3}	R_{H1C2}										
	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
3,1	0	0	-2	-8	-13	-21	-29	-42	-55	-73	-92
3,0	-488	-2	-5	-8	-13	-21	-31	-44	-57	-76	-97
2,9	-485	-488	-8	-10	-15	-23	-34	-47	-63	-81	-102
2,8	-483	-485	-485	-13	-18	-26	-37	-47	-63	-84	-105
2,7	-477	-480	-483	-15	-21	-29	-37	-50	-65	-86	-110
2,6	-470	-475	-477	-477	-23	-29	-39	-52	-68	-89	-110
2,5	-459	-467	-470	-470	-472	-34	-42	-55	-71	-89	-113
2,4	-446	-456	-462	-462	-464	-467	-47	-57	-73	-92	-115
2,3	-428	-443	-449	-451	-456	-456	-459	-63	-78	-97	-118
2,2	-401	-425	-433	-436	-443	-446	-449	-68	-84	-100	-123
2,1	-378	-401	-409	-414	-425	-430	-436	-438	-89	-107	-128
2,0	-359	-375	-383	-386	-399	-409	-417	-420	-100	-115	-136
1,9	-344	-351	-354	-346	-365	-380	-391	-399	-396	-128	-144
1,8	-330	-325	-323	-296	-320	-341	-357	-370	-370	-144	-157
1,7	-39	-299	-294	-273	-262	-289	-312	-330	-333	-165	-176
1,6	-18	-102	-262	-244	-199	-223	-252	-275	-286	-191	-197
1,5	19	-84	-168	-215	-197	-152	-176	-207	-223	-220	-223
1,4	63	-47	-149	-233	-160	-141	-354	-365	-141	-249	-252
1,3	113	3	-107	-210	-294	-94	-393	-414	-420	-420	-407
1,2	166	63	-47	-157	-260	-344	-404	-441	-459	-464	-456
1,1	216	139	37	-73	-184	-286	-370	-430	-464	-480	-483

R_{H1C3}	R_{H1C2}									
	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
3,1	-110	-131	-147	-160	-165	-168	-170	-168	-160	-139
3,0	-120	-144	-170	-194	-212	-223	-226	-223	-210	-184
2,9	-128	-155	-186	-218	-244	-267	-281	-281	-265	-233
2,8	-134	-163	-197	-233	-267	-302	-323	-333	-323	-286
2,7	-136	-168	-204	-244	-286	-325	-357	-375	-373	-341
2,6	-139	-170	-210	-252	-296	-341	-380	-409	-417	-396
2,5	-141	-173	-212	-254	-302	-349	-396	-430	-449	-438
2,4	-144	-176	-215	-257	-304	-354	-404	-446	-470	-467
2,3	-147	-178	-215	-257	-307	-357	-407	-451	-480	-488
2,2	-149	-178	-215	-257	-304	-357	-407	-454	-485	-496
2,1	-152	-184	-218	-257	-304	-351	-404	-449	-483	-499
2,0	-157	-186	-220	-257	-302	-349	-396	-443	-477	-493
1,9	-168	-191	-223	-260	-299	-344	-391	-433	-464	-480
1,8	-178	-202	-228	-262	-299	-338	-380	-420	-451	-464
1,7	-191	-212	-239	-267	-299	-336	-373	-407	-433	-443
1,6	-210	-228	-249	-273	-302	-333	-365	-393	-414	-417
1,5	-231	-247	-262	-283	-304	-330	-354	-378	-391	-388
1,4	-254	-265	-278	-291	-310	-328	-346	-359	-365	-354
1,3	-275	-281	-289	-299	-310	-323	-330	-336	-333	-315
1,2	-441	-420	-294	-296	-302	-307	-310	-304	-291	-262
1,1	-472	-451	-422	-281	-278	-275	-270	-257	-233	-194

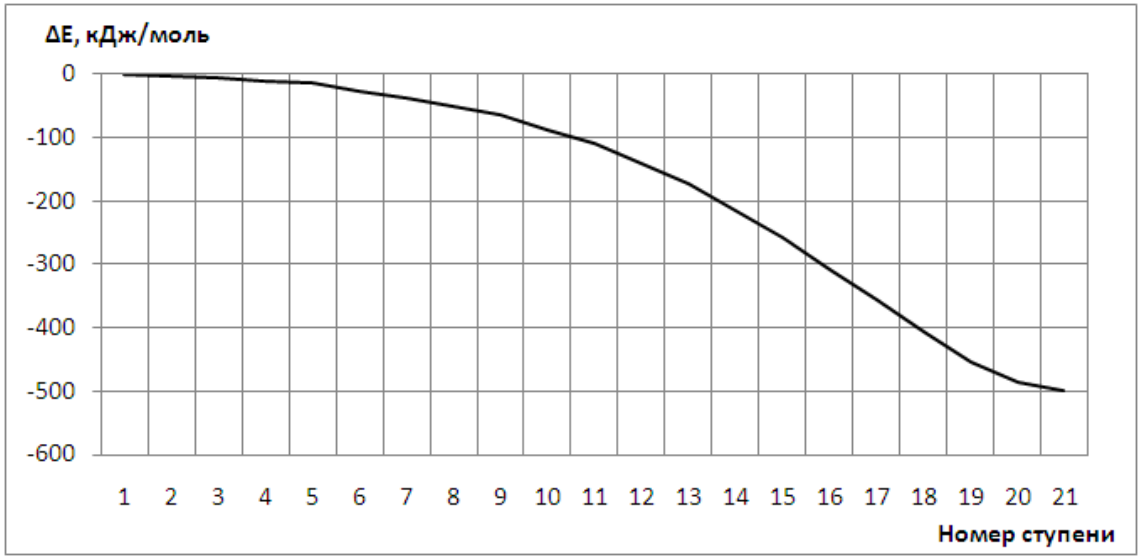

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому о-метоксиаллилбензола

Таблица 2 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому о-метоксиаллилбензола

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-H(1)	3,10	3,00	3,00	2,90	2,90	2,80	2,80	2,70	2,70	2,60
C(3)-C(2)	1,35	1,36	1,36	1,37	1,37	1,38	1,38	1,39	1,39	1,40
C(4)-C(5)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,50	1,50
C(5)-C(10)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(6)-C(5)	1,45	1,45	1,45	1,45	1,44	1,44	1,44	1,44	1,43	1,43
C(7)-C(6)	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42
C(8)-C(7)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
C(9)-C(8)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,41	1,41	1,41	1,41
C(10)-C(9)	1,40	1,39	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
O(11)-C(6)	1,34	1,34	1,34	1,35	1,35	1,35	1,35	1,36	1,36	1,36
C(12)-O(11)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
H(13)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(14)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(15)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(16)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,12	1,12	1,12
H(17)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11
H(18)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(19)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(20)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(21)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(22)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(23)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(24)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Продолжение таблицы 2

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-H(1)	2,60	2,50	2,50	2,40	2,40	2,30	2,30	2,30	2,20	2,20	2,10
C(3)-C(2)	1,40	1,41	1,42	1,42	1,43	1,44	1,45	1,46	1,46	1,48	1,48
C(4)-C(5)	1,51	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,51
C(4)-C(3)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49
C(5)-C(10)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(6)-C(5)	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,44	1,44	1,43
C(7)-C(6)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,43	1,43	1,43	1,42
C(8)-C(7)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
C(9)-C(8)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
C(10)-C(9)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,39	1,40
O(11)-C(6)	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,35	1,35	1,35	1,36
C(12)-O(11)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
H(13)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11
H(14)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,12
H(15)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(16)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,12
H(17)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,13
H(18)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(19)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(20)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(21)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(22)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(23)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(24)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Таблица 3 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому о-метоксиаллилбензола

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	81	80	84	83	87	87	91	90
C(4)-C(5)-C(10)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	127	127	127	127	127	127	127
C(5)-C(10)-C(9)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(6)-C(5)-C(10)	117	117	118	118	118	118	118	118	118	118
C(7)-C(6)-C(5)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(8)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(9)-C(8)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(10)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
O(11)-C(6)-C(5)	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116
C(12)-O(11)-C(6)	126	126	126	126	125	125	125	125	124	124
H(13)-C(2)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	121	121	121
H(14)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	124	123	123	123
H(15)-C(3)-C(2)	119	119	119	119	118	118	118	118	118	117
H(16)-C(4)-C(5)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	111
H(17)-C(4)-C(5)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(18)-C(12)-O(11)	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
H(19)-C(12)-O(11)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(20)-C(12)-O(11)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	113
H(21)-C(10)-C(9)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(22)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(23)-C(8)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(24)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121

Продолжение таблицы 3

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	94	93	97	96	100	98	103	107	105	110	108
C(4)-C(5)-C(10)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119	120
C(4)-C(3)-C(2)	127	127	127	127	126	126	126	126	126	126	125
C(5)-C(10)-C(9)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	121
C(6)-C(5)-C(10)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
C(7)-C(6)-C(5)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(8)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(9)-C(8)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(10)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
O(11)-C(6)-C(5)	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116
C(12)-O(11)-C(6)	124	124	124	124	124	124	125	125	125	125	124
H(13)-C(2)-C(3)	121	121	120	120	119	118	117	115	115	113	113
H(14)-C(2)-C(3)	122	122	121	121	119	119	117	115	114	112	111
H(15)-C(3)-C(2)	117	117	117	117	117	117	117	117	117	117	117
H(16)-C(4)-C(5)	111	111	111	111	111	111	112	112	112	112	111
H(17)-C(4)-C(5)	110	110	110	110	111	111	111	111	111	112	111
H(18)-C(12)-O(11)	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
H(19)-C(12)-O(11)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(20)-C(12)-O(11)	113	113	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(21)-C(10)-C(9)	118	118	118	118	118	118	118	119	119	119	118
H(22)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(23)-C(8)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(24)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	122

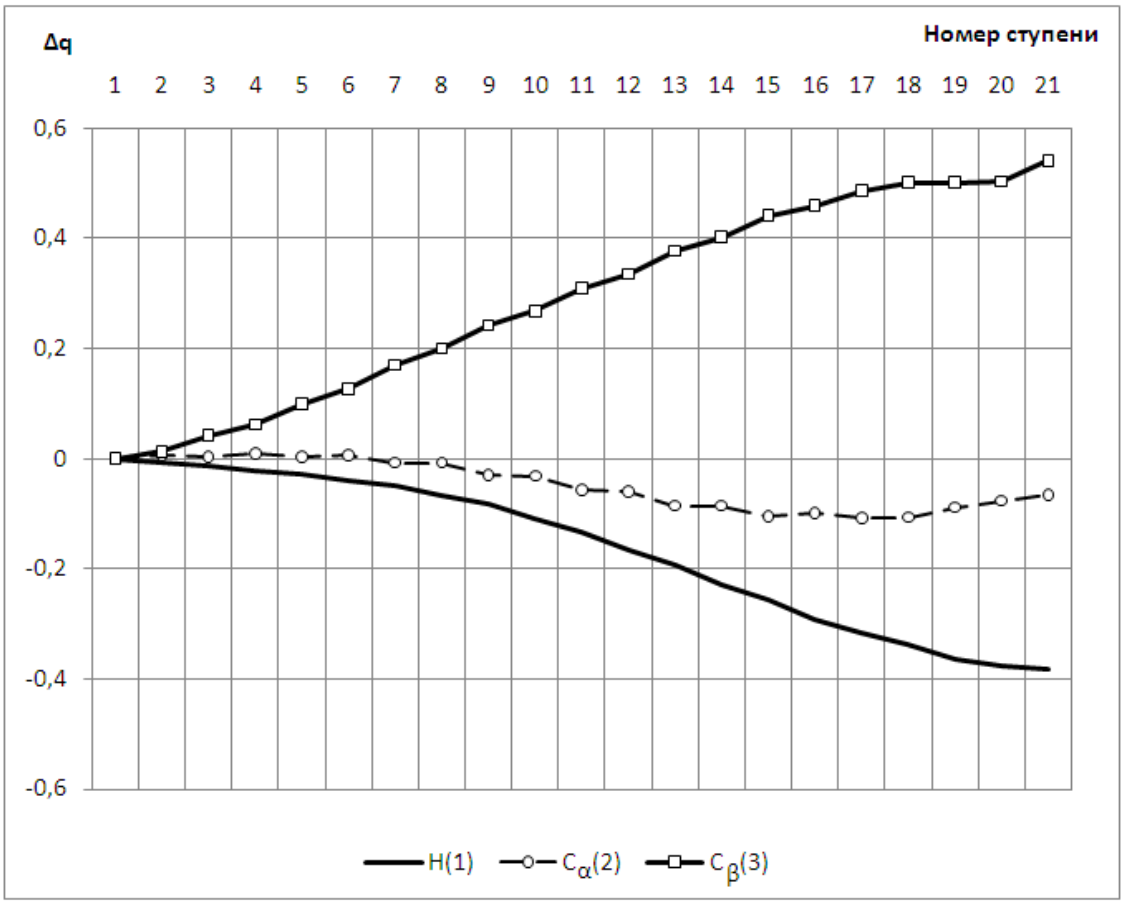

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому о-метоксиаллилбензола

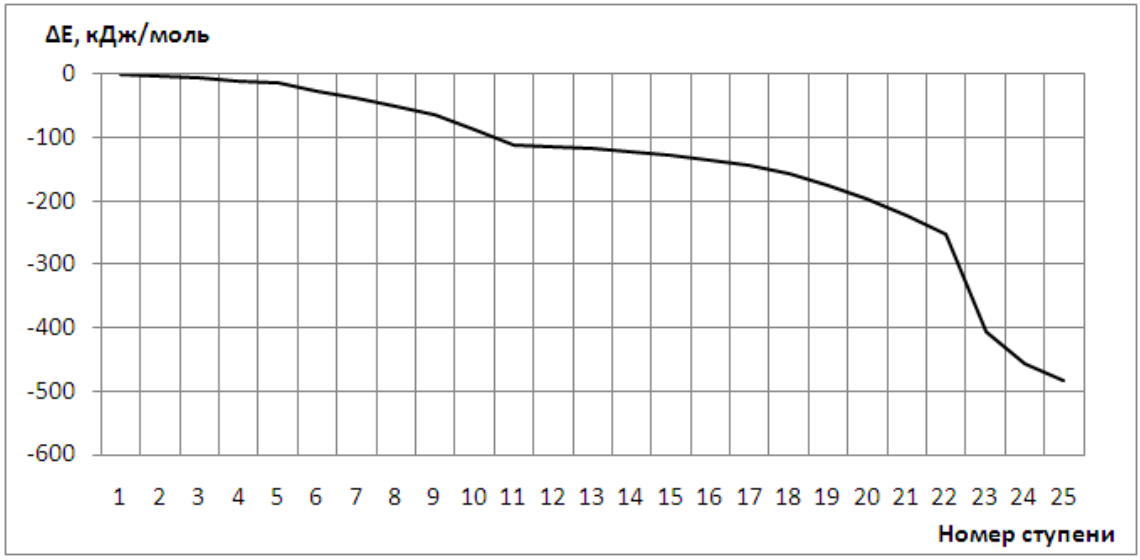

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому о-метоксиаллилбензола

Таблица 4 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому о-метоксиаллилбензола

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20	2,10	2,10
C(3)-H(1)	3,10	3,00	3,00	2,90	2,90	2,80	2,80	2,70	2,70	2,60	2,50	2,40
C(3)-C(2)	1,35	1,36	1,36	1,37	1,37	1,38	1,38	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40
C(4)-C(5)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,50	1,50	1,50	1,51
C(5)-C(10)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42
C(6)-C(5)	1,45	1,45	1,45	1,45	1,44	1,44	1,44	1,44	1,43	1,43	1,43	1,43
C(7)-C(6)	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,42
C(8)-C(7)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
C(9)-C(8)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
C(10)-C(9)	1,40	1,39	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40
O(11)-C(6)	1,34	1,34	1,34	1,35	1,35	1,35	1,35	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36
C(12)-O(11)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
H(13)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(14)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(15)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(16)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(17)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11
H(18)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(19)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(20)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(21)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(22)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(23)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(24)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Продолжение таблицы 4

номер ступени	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
C(2)-H(1)	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10
C(3)-H(1)	2,30	2,20	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-C(2)	1,40	1,40	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,40	1,40	1,39	1,32	1,32	1,33
C(4)-C(5)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,50	1,38	1,38	1,38
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,52	1,52	1,53	1,54	1,55	1,57	1,60	1,66	5,42	5,07	4,94
C(5)-C(10)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,47	1,47	1,47
C(6)-C(5)	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,43	1,48	1,48	1,48
C(7)-C(6)	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,42	1,43	1,42	1,43	1,43	1,43
C(8)-C(7)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,39	1,39	1,39
C(9)-C(8)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,44	1,44	1,44
C(10)-C(9)	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,37	1,37	1,37
O(11)-C(6)	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,32	1,32	1,32
C(12)-O(11)	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,42	1,42	1,42
H(13)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(14)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(15)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,09	1,07	1,08	1,09
H(16)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,09	1,09	1,09
H(17)-C(4)	1,11	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11
H(20)-C(12)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11
H(21)-C(10)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(22)-C(9)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(23)-C(8)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(24)-C(7)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Таблица 5 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому о-метоксиаллилбензола

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	81	80	84	83	87	87	91	90	89	84
C(4)-C(5)-C(10)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	127	127	127	127	127	127	127	127	128
C(5)-C(10)-C(9)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(6)-C(5)-C(10)	117	117	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
C(7)-C(6)-C(5)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(8)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(9)-C(8)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(10)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
O(11)-C(6)-C(5)	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116
C(12)-O(11)-C(6)	126	126	126	126	125	125	125	125	124	124	124	124
H(13)-C(2)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	121	121	121	121	121
H(14)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	124	123	123	123	123	123
H(15)-C(3)-C(2)	119	119	119	119	118	118	118	118	118	117	117	117
H(16)-C(4)-C(5)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	111	111	111
H(17)-C(4)-C(5)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110
H(18)-C(12)-O(11)	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
H(19)-C(12)-O(11)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(20)-C(12)-O(11)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	113	113	113
H(21)-C(10)-C(9)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(22)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(23)-C(8)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(24)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121

Продолжение таблицы 5

номер ступени	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
H(1)-C(2)-C(3)	79	75	70	66	62	58	54	50	46	41	36	32	27
C(4)-C(5)-C(10)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119	120	120	120
C(4)-C(3)-C(2)	128	129	129	130	131	131	131	130	130	129	132	146	168
C(5)-C(10)-C(9)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(6)-C(5)-C(10)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	116	116	116
C(7)-C(6)-C(5)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(8)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	121	121	121
C(9)-C(8)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	121	121	121
C(10)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
O(11)-C(6)-C(5)	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116	115	115	115
C(12)-O(11)-C(6)	124	124	124	124	124	124	124	124	125	124	128	128	128
H(13)-C(2)-C(3)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	124	124	123
H(14)-C(2)-C(3)	123	123	123	124	124	124	124	124	124	124	123	123	123
H(15)-C(3)-C(2)	117	116	116	116	116	116	116	117	119	121	135	130	125
H(16)-C(4)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	112	111	125	125	125
H(17)-C(4)-C(5)	110	110	110	110	109	109	109	108	108	113	122	122	122
H(18)-C(12)-O(11)	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106	106
H(19)-C(12)-O(11)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	111	111	111
H(20)-C(12)-O(11)	113	113	113	113	113	113	113	113	112	113	111	111	111
H(21)-C(10)-C(9)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	120	120	120
H(22)-C(9)-C(8)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	119	119	119
H(23)-C(8)-C(7)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(24)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121

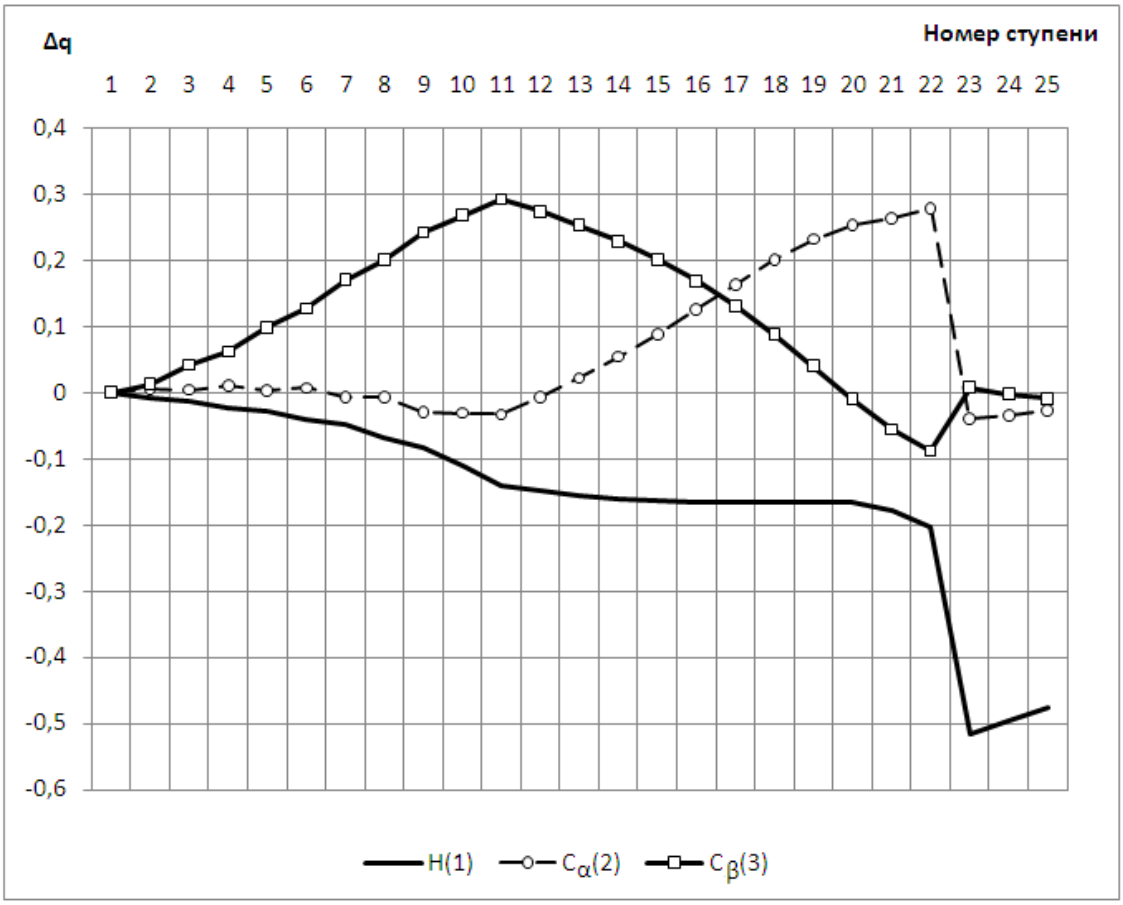

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому о-метоксиаллилбензола

Список литературы

1. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов /Дж. Кеннеди. – Изд-во «Мир»: М., 1978. – 431 с.
2. Сангалов, Ю. А. Полимеры и сополимеры 4-метилпентена-1 / Ю. А. Сангалов, К. С. Минскер. – Уфа, 2001. – 381 с.
3. Бабкин В.А. Квантовохимический аспект катионной полимеризации олефинов / В.А. Бабкин, Г.Е. Заиков, К.С. Минскер. – Изд-во «Гилем»: Уфа, 1996. – 182 с.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
7. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.

8. Бабкин В.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тетраметилстирола методом AB INITIO. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Титова Е.С. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – С. 22-28.
9. Бабкин В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации 1-метилен-4-винилциклогексана. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Овчарова В.А., Пристансков А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – № 4 (199). – С. 43-47.
10. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 164-170.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 170-186.
12. Овчарова В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации аллилциклогексана. / Овчарова В.А., Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Фомичёв В.Т., Федунов Р.Г., Стоянов О.В., Заиков Г.Е., Сангалов Ю.А. // В сборнике: Состояние, проблемы и перспективы развития социально-ориентированного строительного комплекса на региональном уровне. Материалы IV Всероссийской научно-технической интернет-конференции, посвящённой 15-летию Себряковского филиала ВолгГТУ. – 2017. – С. 116-129.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – № 4 (125). – С. 5-6.
14. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции. – 2017. – С. 17-22.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 107-112.
16. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // В сборнике:

Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 30-36.
17. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 36-42.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРОТОНИРОВАНИЯ 3-АЛЛИЛЦИКЛОПЕНТЕНА МЕТОДОМ MNDO

Игнатова М.В.

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования 3-аллилциклопентена классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция экзотермична и имеет без барьерный характер. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α-углеродный атом равен 491 кДж/моль. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

Summary

For the first time it is researched of classical quantum chemical method MNDO of modeling mechanism protonizataion of 3-allylcyclopentene – monomer of cationic polymerization. Showing, that he considerate some self usual mechanism connection proton to olefin corresponding Morkovnikov's rule. Reaction exothermic and carry without a barrier character. Prize energy in result of reaction – 491 kDg/mol.

***Ключевые слова**: механизм протонирования, метод MNDO, 3-аллилциклопентен, правило Марковникова.*

***Keywords**: mechanism protonizataion, method MNDO, 3-allylcyclopentene, Markovnikov's rule.*

Цель настоящей работы – квантово-химическое исследование механизма протонирования 3-аллилциклопентена классическим полуэмпирическим методом MNDO.

Методическая часть

Используя классические представления о механизме инициирования катионной полимеризации в присутствии различных каталитических комплексов [1-3], для изучения механизма протонирования был выбран квантовохимический поуэмпирическиий метод

MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [4-5], в связи с тем, что этот метод специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … C_8H_{12} (3-аллилциклопентен) 21 атом, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M – мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$.

Для исследования механизма протонирования 3-аллилциклопентена выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с 3-аллилциклопентеном по методике, аналогичной [8-17]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. Исходная модель атаки протона молекулы 3-аллилциклопентена показана на рис. 1.

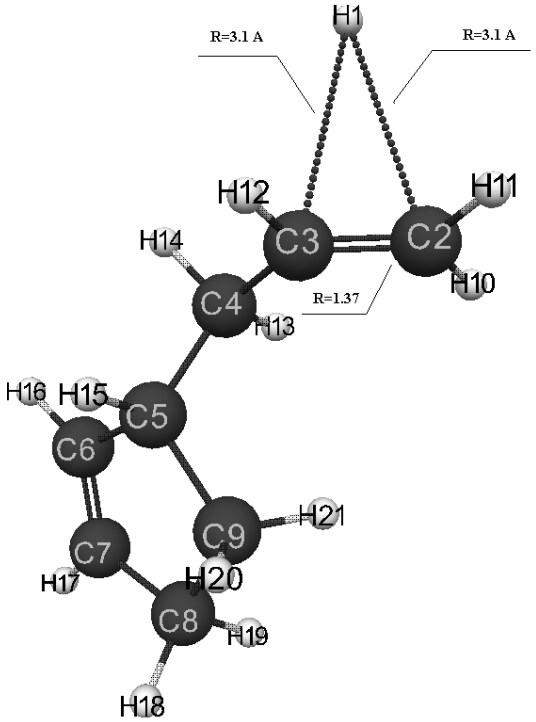

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы 3-аллилциклопентена

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt [6].

Результаты расчетов

Значения энергий молекулярной системы H^+ … C_8H_{12} вдоль координат реакций R_{H1C2} и R_{H1C3} показаны в таблице 1. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома 3-аллилциклопентена (C_2) и разрыва двойной связи 3-аллилциклопентена представлена на рис. 2. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β–углеродного атома 3-аллилциклопентена (C_3) и разрыва двойной связи $C_2 = C_3$ показана на рис. 3. Заряды на

атомах конечных моделей сформированных карбкатионнов представлены в табл. 2. Изменение общей энергии при протонизации 3-аллилциклопентена показано в табл. 1, из которой видно, что на всем пути движения протона (инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы H^+ … C_8H_{12} (E_0) неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона (см. рис. 3) и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β- углеродные атомы 3-аллилциклопентена. Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 60 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β-углеродного атома, что находится в полном соответствии с классическим правилом Марковникова. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α- углеродный атом равен 491 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 431 кДж/моль.

Более того, по $pKa=42,11-147,18q_{max}^{H+}$[7] ($q_{max}^{H+}$ = +0,119- максимальный заряд на атоме водорода, pKa- универсальный показатель кислотности), находим значение кислотной силы сформированных карбкатионов, равное pKa = 25

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы 3-аллилциклопентена свидетельствует о том, что механизм протонирования катионной полимеризации 3-аллилциклопентена идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования 3-аллилциклопентена квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

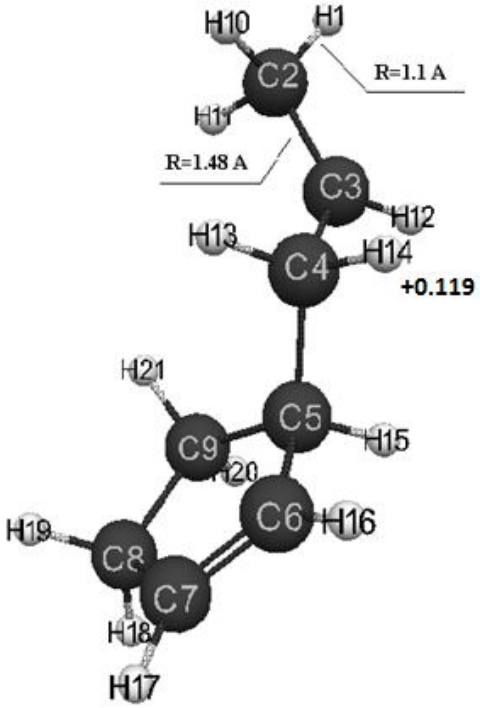

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α – углеродного атома 3-аллилциклопентена (C_2)

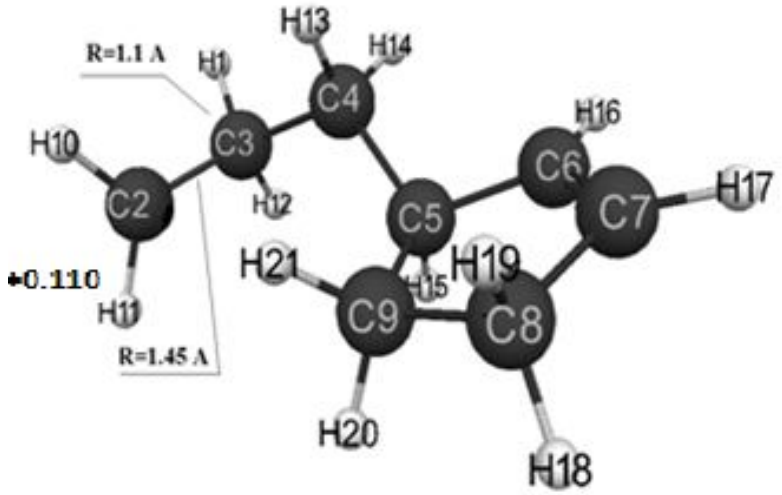

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β – углеродного атома 3-аллилциклопентена (C_3)

Таблица 1 – Изменение общей энергии молекулярной системы H^+ ... C_8H_{12} – E_o (в кДж/моль) вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} (в А)

R_{H1C3}	R_{H1C2}										
	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
3,1	0	-3	-8	-14	-21	-29	-465	-462	-460	-452	-444
3,0	-3	-6	-11	-16	-24	-32	-465	-462	-460	-455	-447
2,9	-6	-8	-14	-19	-27	-35	-45	-58	-71	-90	-113
2,8	-8	-14	-19	-24	-29	-37	-48	-61	-77	-95	-116
2,7	-14	-19	-21	-27	-35	-43	-53	-66	-79	-98	-119
2,6	-19	-24	-29	-35	-40	-48	-58	-69	-85	-103	-124
2,5	-462	-32	-35	-40	-48	-56	-63	-77	-90	-108	-129
2,4	-457	-40	-45	-50	-56	-63	-71	-85	-98	-113	-134
2,3	-449	-50	-56	-61	-69	-74	-82	-92	-106	-121	-140
2,2	-439	-63	-69	-77	-82	-87	-95	-106	-116	-132	-150
2,1	-426	-77	-85	-92	-98	-106	-113	-121	-132	-145	-161
2,0	-405	-95	-103	-111	-119	-126	-134	-142	-150	-163	-176
1,9	-379	-111	-124	-134	-142	-150	-158	-166	-174	-184	-197
1,8	-336	-357	-145	-161	-171	-179	-187	-195	-203	-211	-221
1,7	-276	-308	-171	-187	-203	-213	-221	-229	-234	-242	-250
1,6	-98	-242	-189	-213	-234	-247	-258	-266	-274	-279	-284
1,5	-90	-148	-200	-237	-263	-284	-297	-308	-313	-318	-323
1,4	-87	-145	-200	-250	-284	-313	-334	-347	-355	-360	-363
1,3	-87	-140	-197	-250	-294	-334	-360	-379	-389	-397	-399
1,2	-87	-129	-182	-237	-284	-334	-371	-397	-415	-423	-426
1,1	-74	-108	-150	-200	-247	-302	-350	-386	-413	-426	-431

Продолжение таблицы 1

R_{H1C3}	R_{H1C2}									
	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
3,1	-431	-413	-384	-166	-168	-168	-171	-168	-163	-142
3,0	-436	-421	-397	-363	-213	-224	-226	-224	-213	-184
2,9	-137	-163	-192	-221	-247	-268	-279	-281	-268	-234
2,8	-140	-168	-203	-237	-268	-300	-321	-331	-321	-287
2,7	-145	-176	-211	-247	-287	-323	-355	-373	-373	-342
2,6	-150	-182	-216	-255	-297	-339	-376	-407	-415	-392
2,5	-155	-184	-221	-260	-305	-350	-392	-428	-447	-434
2,4	-158	-189	-224	-266	-310	-357	-402	-442	-465	-460
2,3	-166	-195	-229	-268	-313	-360	-407	-449	-476	-481
2,2	-171	-200	-231	-271	-316	-363	-410	-452	-481	-491
2,1	-182	-208	-237	-274	-316	-363	-407	-452	-484	-491
2,0	-195	-218	-245	-279	-318	-360	-405	-447	-478	-489
1,9	-213	-231	-258	-287	-321	-360	-402	-442	-470	-478
1,8	-234	-250	-271	-297	-326	-363	-399	-434	-460	-468
1,7	-260	-274	-289	-310	-336	-365	-397	-426	-447	-449
1,6	-292	-300	-313	-329	-347	-371	-394	-418	-431	-428
1,5	-329	-334	-339	-350	-363	-376	-394	-407	-415	-405
1,4	-365	-368	-368	-373	-379	-386	-392	-397	-394	-376
1,3	-399	-399	-397	-394	-392	-392	-389	-384	-371	-342
1,2	-423	-421	-415	-407	-399	-392	-379	-363	-336	-294
1,1	-428	-423	-415	-405	-389	-373	-352	-323	-287	-231

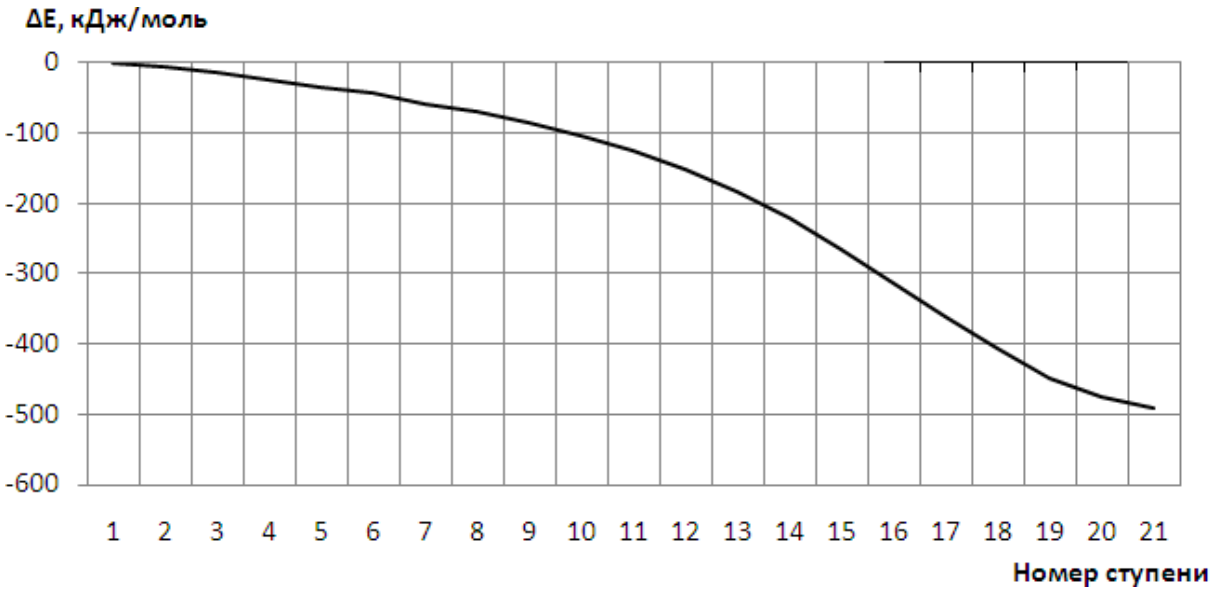

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 3-аллилциклопентена

Таблица 2 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 3-аллилциклопентена

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,70	2,60	2,60	2,60	2,60
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40
C(4)-C(3)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(5)-C(4)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56
C(6)-C(5)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(7)-C(6)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35
C(8)-C(7)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(9)-C(8)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(9)-C(5)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56
H(10)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(12)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(13)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(15)-C(5)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(16)-C(6)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(17)-C(7)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(18)-C(8)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(8)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(20)-C(9)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(21)-C(9)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Продолжение таблицы 2

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-H(1)	2,60	2,60	2,60	2,50	2,40	2,30	2,30	2,30	2,30	2,30	2,20
C(3)-C(2)	1,40	1,41	1,42	1,42	1,43	1,43	1,45	1,46	1,47	1,49	1,49
C(4)-C(3)	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,48	1,48	1,48	1,48	1,48
C(5)-C(4)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,57	1,57	1,57	1,56	1,56
C(6)-C(5)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(7)-C(6)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35
C(8)-C(7)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(9)-C(8)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(9)-C(5)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,57	1,57
H(10)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,12	1,12
H(12)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(13)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,13	1,13
H(15)-C(5)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(16)-C(6)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(17)-C(7)	1,08	1,08	1,08	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(18)-C(8)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(8)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(20)-C(9)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(21)-C(9)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Таблица 3 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому 3-аллилциклопентена

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	76	76	75	79	78	82	86	90
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(5)-C(4)-C(3)	114	114	114	114	114	114	114	114	114	114
C(6)-C(5)-C(4)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(7)-C(6)-C(5)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(8)-C(7)-C(6)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(9)-C(8)-C(7)	105	105	105	105	105	105	105	105	105	105
C(9)-C(5)-C(4)	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116
H(10)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	123	123	123	123
H(11)-C(2)-C(3)	122	122	122	122	122	121	121	121	121	121
H(12)-C(3)-C(2)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(13)-C(4)-C(3)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(14)-C(4)-C(3)	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107
H(15)-C(5)-C(4)	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107
H(16)-C(6)-C(5)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(17)-C(7)-C(6)	127	127	127	127	127	127	127	127	127	127
H(18)-C(8)-C(7)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(19)-C(8)-C(7)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(20)-C(9)-C(8)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(21)-C(9)-C(8)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110

Продолжение таблицы 3

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	94	98	102	101	100	98	103	107	112	117	116
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(5)-C(4)-C(3)	114	114	114	114	114	114	114	114	115	115	115
C(6)-C(5)-C(4)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(7)-C(6)-C(5)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(8)-C(7)-C(6)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(9)-C(8)-C(7)	105	105	105	105	105	105	105	105	105	105	105
C(9)-C(5)-C(4)	116	116	116	116	115	115	115	115	115	115	115
H(10)-C(2)-C(3)	123	122	121	121	120	120	118	117	115	114	112
H(11)-C(2)-C(3)	121	120	119	119	118	118	116	114	112	107	107
H(12)-C(3)-C(2)	118	118	117	117	117	117	117	117	117	116	116
H(13)-C(4)-C(3)	111	111	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(14)-C(4)-C(3)	107	107	106	106	106	107	106	106	106	105	105
H(15)-C(5)-C(4)	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107
H(16)-C(6)-C(5)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(17)-C(7)-C(6)	127	127	127	127	127	127	127	127	127	127	127
H(18)-C(8)-C(7)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(19)-C(8)-C(7)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(20)-C(9)-C(8)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(21)-C(9)-C(8)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому 3-аллилциклопентена

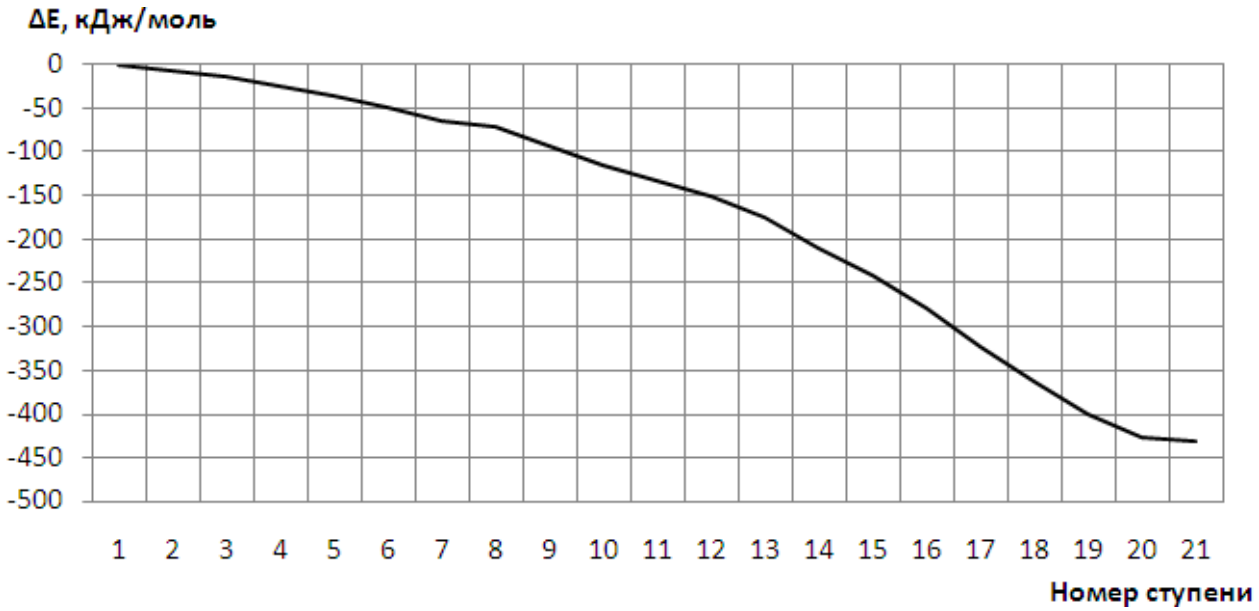

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 3-аллилциклопентена

Таблица 4 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 3-аллилциклопентена

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,50	2,40	2,30
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40
C(4)-C(3)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(5)-C(4)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56
C(6)-C(5)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(7)-C(6)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35
C(8)-C(7)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(9)-C(8)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(9)-C(5)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56
H(10)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(12)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(13)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(15)-C(5)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(16)-C(6)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(17)-C(7)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(18)-C(8)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(8)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(20)-C(9)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(21)-C(9)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Продолжение таблицы 4

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,30	2,30	2,30	2,20	2,20	2,20	2,10	2,10	2,10	2,10	2,10
C(3)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-C(2)	1,40	1,41	1,41	1,41	1,42	1,42	1,43	1,44	1,45	1,46	1,46
C(4)-C(3)	1,51	1,51	1,51	1,52	1,52	1,53	1,53	1,54	1,54	1,56	1,58
C(5)-C(4)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,54
C(6)-C(5)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(7)-C(6)	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35
C(8)-C(7)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
C(9)-C(8)	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55	1,55
C(9)-C(5)	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56
H(10)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(11)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,09
H(12)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12
H(13)-C(4)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(4)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(5)	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
H(16)-C(6)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(17)-C(7)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(18)-C(8)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(19)-C(8)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(20)-C(9)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(21)-C(9)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Таблица 5 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 3-аллилциклопентена

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	76	76	75	75	74	70	69	68
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	126	126	126	126	126	126	126	126
C(5)-C(4)-C(3)	114	114	114	114	114	114	114	114	114	114
C(6)-C(5)-C(4)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(7)-C(6)-C(5)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(8)-C(7)-C(6)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(9)-C(8)-C(7)	105	105	105	105	105	105	105	105	105	105
C(9)-C(5)-C(4)	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116
H(10)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	124	123	123	123	123
H(11)-C(2)-C(3)	122	122	122	122	122	122	121	121	121	121
H(12)-C(3)-C(2)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(13)-C(4)-C(3)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(14)-C(4)-C(3)	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107
H(15)-C(5)-C(4)	107	107	107	107	107	107	107	107	107	107
H(16)-C(6)-C(5)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(17)-C(7)-C(6)	127	127	127	127	127	127	127	127	127	127
H(18)-C(8)-C(7)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(19)-C(8)-C(7)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(20)-C(9)-C(8)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(21)-C(9)-C(8)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110

Продолжение таблицы 5

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	64	60	56	55	51	47	46	42	38	34	30
C(4)-C(3)-C(2)	126	126	125	125	124	124	123	122	120	118	114
C(5)-C(4)-C(3)	114	114	114	114	114	115	115	115	115	115	116
C(6)-C(5)-C(4)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(7)-C(6)-C(5)	112	112	112	112	112	112	112	113	113	113	113
C(8)-C(7)-C(6)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
C(9)-C(8)-C(7)	105	105	105	105	105	105	105	105	105	105	105
C(9)-C(5)-C(4)	116	116	116	116	116	116	116	116	117	117	116
H(10)-C(2)-C(3)	123	123	123	123	123	123	123	123	123	122	122
H(11)-C(2)-C(3)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	122	122
H(12)-C(3)-C(2)	118	118	117	117	117	116	116	114	113	112	111
H(13)-C(4)-C(3)	111	111	110	110	110	110	110	110	109	109	108
H(14)-C(4)-C(3)	107	107	107	107	107	107	107	106	106	106	104
H(15)-C(5)-C(4)	107	107	107	107	107	108	108	108	108	108	108
H(16)-C(6)-C(5)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(17)-C(7)-C(6)	127	127	127	127	127	127	127	127	127	127	127
H(18)-C(8)-C(7)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(19)-C(8)-C(7)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(20)-C(9)-C(8)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(21)-C(9)-C(8)	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110	110

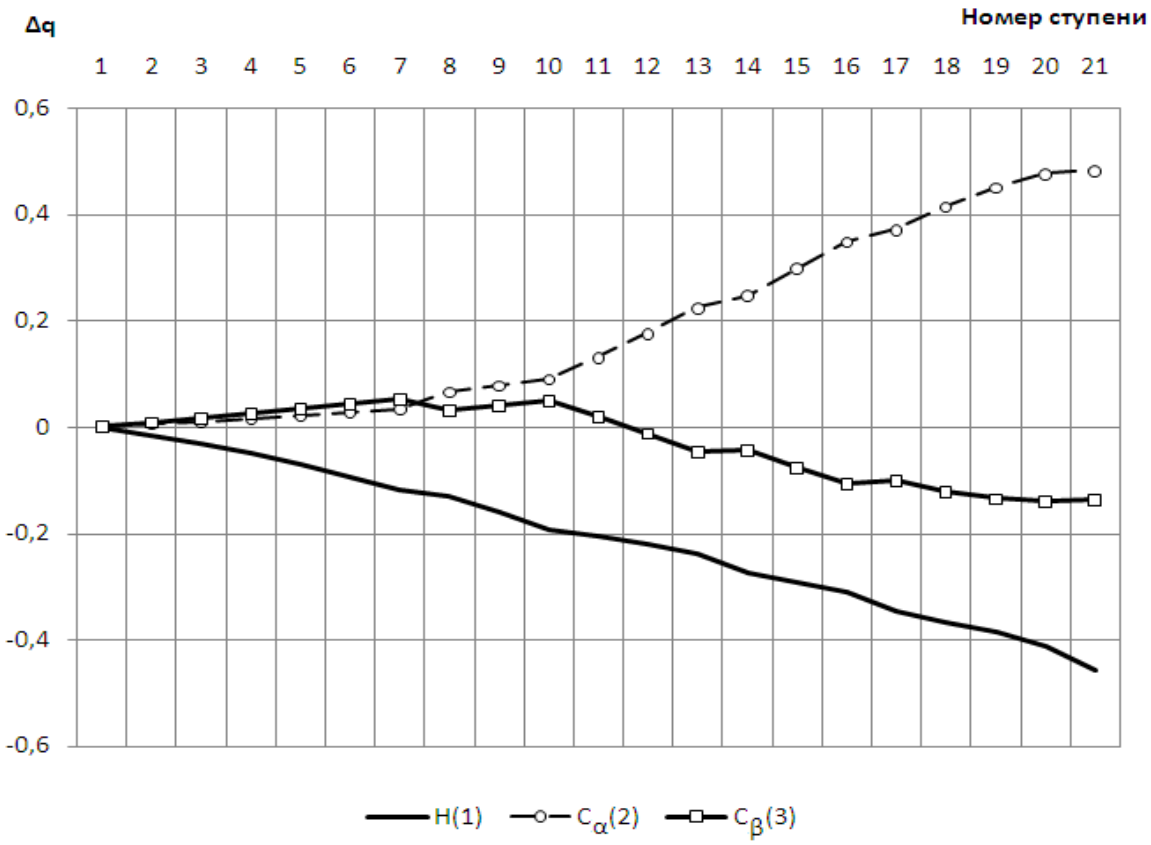

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому 3-аллилциклопентена

Список литературы

1. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов /Дж. Кеннеди. – Изд-во «Мир»: М., 1978. – 431 с.
2. Сангалов, Ю. А. Полимеры и сополимеры 4-метилпентена-1 / Ю. А. Сангалов, К. С. Минскер. – Уфа, 2001. – 381 с.
3. Бабкин В.А. Квантовохимический аспект катионной полимеризации олефинов / В.А. Бабкин, Г.Е. Заиков, К.С. Минскер. – Изд-во «Гилем»: Уфа, 1996. – 182 с.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
7. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.
8. Бабкин В.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тетраметилстирола методом AB INITIO. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В.,

Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Титова Е.С. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – С. 22-28.
9. Бабкин В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации 1-метилен-4-винилциклогексана. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Овчарова В.А., Пристансков А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – № 4 (199). – С. 43-47.
10. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 164-170.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 170-186.
12. Овчарова В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации аллилциклогексана. / Овчарова В.А., Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Фомичёв В.Т., Федунов Р.Г., Стоянов О.В., Заиков Г.Е., Сангалов Ю.А. // В сборнике: Состояние, проблемы и перспективы развития социально-ориентированного строительного комплекса на региональном уровне. Материалы IV Всероссийской научно-технической интернет-конференции, посвящённой 15-летию Себряковского филиала ВолгГТУ. – 2017. – С. 116-129.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – № 4 (125). – С. 5-6.
14. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции. – 2017. – С. 17-22.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 107-112.
16. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского

филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 30-36.
17. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 36-42.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРОТОНИРОВАНИЯ ТРАНС-3-МЕТИЛПЕНТАДИЕНА-1,3 МЕТОДОМ MNDO

Анисимова В.С.

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования транс-3-метилпентадиена-1,3 классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция экзотермична и имеет без барьерный характер. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α-углеродный атом равен 533 кДж/моль. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

Summary

For the first time it is researched of classical quantum chemical method MNDO of modeling mechanism protonizataion of trans-3-methylpentadiene-1,3 – monomer of cationic polymerization. Showing, that he considerate some self usual mechanism connection proton to olefin corresponding Morkovnikov's rule. Reaction exothermic and carry without a barrier character. Prize energy in result of reaction – 533 kDg/mol.

***Ключевые слова**: механизм протонирования, метод MNDO, транс-3-метилпентадиен-1,3, правило Марковникова.*

***Keywords**: mechanism protonizataion, method MNDO, trans-3-methylpentadiene-1,3, Markovnikov's rule.*

Цель настоящей работы – квантово-химическое исследование механизма протонирования транс-3-метилпентадиена-1,3 классическим полуэмпирическим методом MNDO .

Методическая часть

Используя классические представления о механизме инициирования катионной полимеризации в присутствии различных каталитических комплексов [1-3], для изучения механизма протонирования был выбран квантовохимический поуэмпирическиий метод MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [4-5], в связи с тем, что этот метод специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … C_6H_{10} (транс-3-метилпентадиен-1,3) 17 атомов, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M-мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$.

Для исследования механизма протонирования транс-3-метилпентадиена-1,3 выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с транс-3-метилпентадиеном-1,3 по методике, аналогичной [8-17]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. По полученным данным значений энергий вдоль координат реакции строилась эквипотенциальная поверхность взаимодействий протона транс-3-метилпентадиеном-1,3 (см. рис. 4). Исходная модель атаки протона молекулы транс-3-метилпентадиена-1,3 показана на рис. 1.

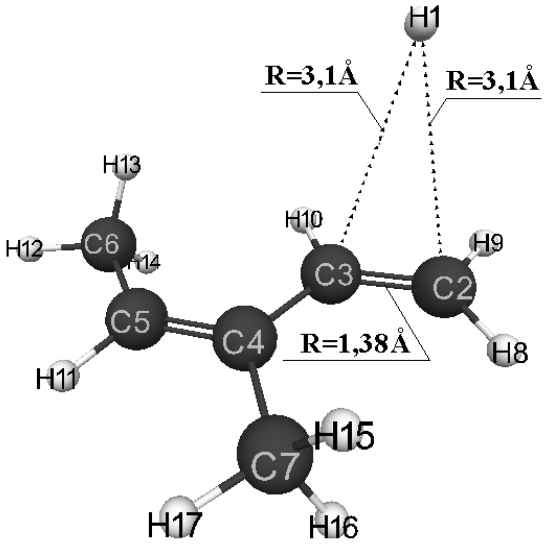

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы транс-3-метилпентадиена-1,3

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt[6].

Результаты расчетов

Значения энергий молекулярной системы $H^+ \ldots C_6H_{10}$ вдоль координат реакций R_{H1C2} и R_{H1C3} показаны в таблице 1. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома транс-3-метилпентадиена-1,3 (C_2) и разрыва двойной связи транс-3-метилпентадиена-1,3 представлена на рис. 2. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома транс-3-метилпентадиена-1,3 (C_3) и разрыва двойной связи $C_2 = C_3$ показана на рис. 3. Заряды на атомах конечных моделей сформированных карбкатионнов представлены в табл. 2. Изменение общей энергии при протонизации транс-3-метилпентадиена-1,3 показано в табл. 1, из которой видно, что на всем пути движения протона (инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы $H^+ \ldots C_6H_{10}$ (E_0) неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона (см. рис. 4) и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β- углеродные атомы транс-3-метилпентадиена-1,3. Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 89 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β- углеродного атома, что находится в полном соответствии с классическим правилом Марковникова. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α- углеродный атом равен 533 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 444 кДж/моль.

Более того, по $pKa=42{,}11-147{,}18q_{max}^{H+}$[7] ($q_{max}^{H+}$ = +0,103- максимальный заряд на атоме водорода, pKa- универсальный показатель кислотности), находим значение кислотной силы сформированных карбкатионов, равное pKa = 27

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы транс-3-метилпентадиена-1,3 свидетельствует о том, что механизм протонирования катионной полимеризации транс-3-метилпентадиена-1,3 идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования транс-3-метилпентадиена-1,3 квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

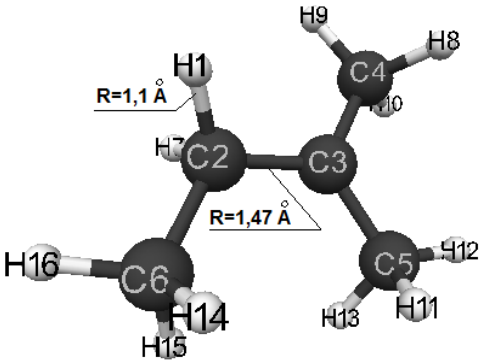

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α – углеродного атома транс-3-метилпентадиена-1,3 (C_2)

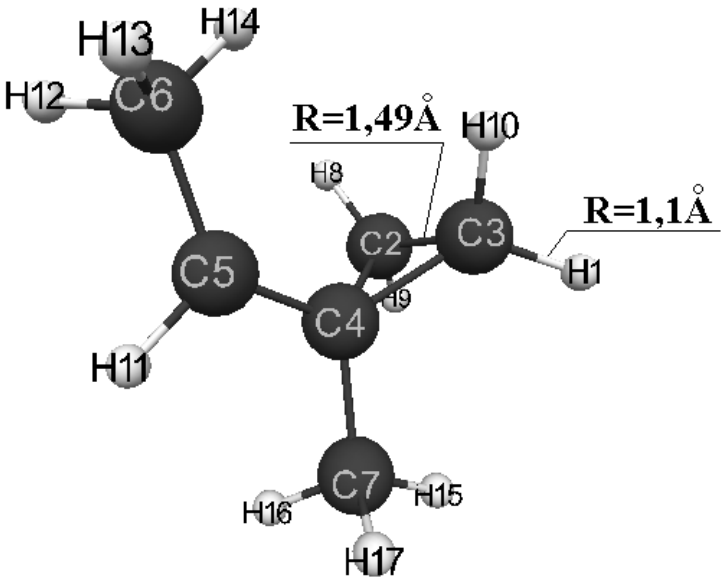

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β – углеродного атома транс-3-метилпентадиена-1,3 (C_3)

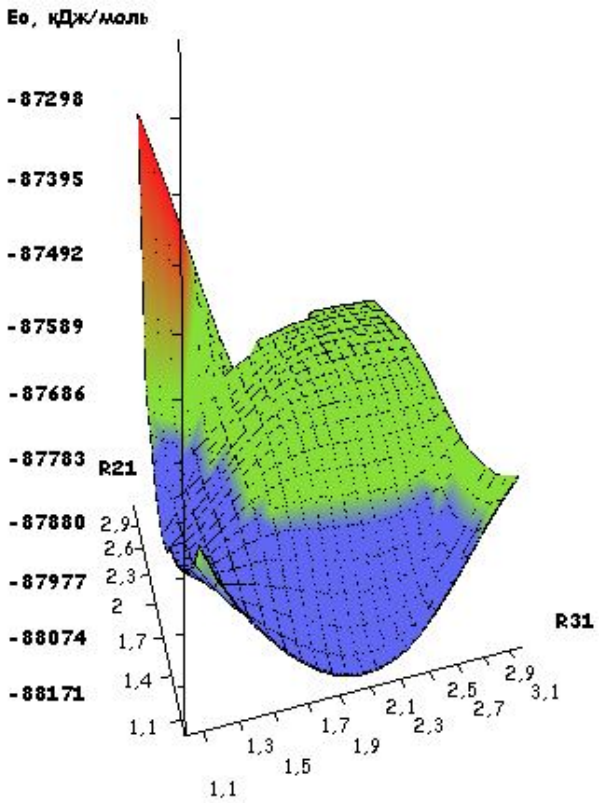

Рис. 4 – Потенциальная поверхность энергий взаимодействий протона с транс-3-метилпентадиеном-1,3

Таблица 1 – Изменение общей энергии молекулярной системы H^+ ... C_6H_{10} – E_o (в кДж/моль) вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} (в А)

R_{H1C3}	R_{H1C2}										
	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
3,1	0	-6	-11	-16	-21	-32	-42	-56	-71	-87	-108
3,0	-3	-8	-11	-19	-24	-34	-45	-58	-74	-92	-116
2,9	-8	-11	-16	-21	-27	-37	-48	-61	-76	-98	-121
2,8	-11	-13	-19	-24	-29	-40	-50	-63	-79	-100	-124
2,7	-16	-19	-21	-27	-34	-42	-53	-66	-82	-103	-126
2,6	-21	-24	-27	-32	-40	-48	-56	-69	-84	-105	-129
2,5	-27	-32	-34	-40	-45	-53	-61	-74	-90	-108	-132
2,4	-360	-40	-42	-48	-53	-58	-69	-79	-95	-113	-137
2,3	-347	-48	-53	-56	-61	-69	-76	-87	-100	-119	-139
2,2	-329	-61	-63	-69	-74	-79	-87	-95	-108	-124	-145
2,1	-300	-74	-79	-84	-90	-95	-100	-108	-121	-134	-153
2,0	-263	-87	-98	-103	-108	-113	-119	-126	-134	-147	-163
1,9	-213	-247	-116	-124	-132	-137	-142	-150	-155	-166	-179
1,8	-150	-195	-137	-150	-161	-166	-171	-176	-184	-189	-200
1,7	-76	-132	-161	-176	-189	-200	-205	-210	-216	-221	-229
1,6	10	-58	-116	-203	-221	-234	-244	-250	-255	-258	-260
1,5	102	29	-189	-226	-252	-271	-281	-292	-297	-300	-300
1,4	191	-205	-252	-286	-313	-300	-318	-329	-336	-342	-339
1,3	280	-213	-263	-310	-344	-371	-384	-363	-373	-378	-378
1,2	362	-210	-258	-307	-355	-389	-412	-378	-394	-402	-402
1,1	441	-195	-234	-281	-331	-376	-410	-434	-444	-444	-439

Продолжение таблицы 1

R_{H1C3}	R_{H1C2}									
	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
3,1	-129	-150	-171	-187	-197	-203	-205	-203	-192	-171
3,0	-139	-166	-195	-218	-242	-255	-260	-258	-244	-216
2,9	-147	-176	-210	-242	-273	-300	-313	-315	-302	-266
2,8	-153	-184	-221	-260	-297	-331	-357	-368	-357	-323
2,7	-155	-189	-229	-271	-315	-355	-389	-410	-407	-378
2,6	-161	-195	-234	-279	-326	-373	-412	-441	-452	-428
2,5	-161	-197	-237	-284	-331	-384	-428	-465	-483	-470
2,4	-163	-197	-239	-284	-336	-389	-439	-481	-504	-502
2,3	-166	-200	-239	-284	-336	-389	-441	-489	-517	-520
2,2	-171	-203	-239	-284	-334	-389	-441	-489	-523	-531
2,1	-176	-205	-242	-284	-331	-384	-436	-486	-520	-533
2,0	-184	-210	-242	-281	-329	-378	-431	-478	-515	-528
1,9	-197	-221	-247	-284	-326	-371	-420	-465	-502	-517
1,8	-216	-234	-258	-286	-323	-365	-410	-452	-486	-499
1,7	-239	-252	-271	-294	-323	-360	-399	-436	-465	-475

1,6	-268	-279	-289	-307	-331	-357	-389	-418	-441	-447
1,5	-302	-307	-315	-326	-339	-357	-378	-399	-415	-412
1,4	-342	-342	-344	-347	-355	-363	-373	-384	-386	-376
1,3	-378	-376	-373	-371	-368	-365	-365	-363	-355	-331
1,2	-402	-399	-394	-386	-376	-365	-352	-336	-315	-279
1,1	-407	-402	-394	-384	-368	-349	-329	-300	-263	-210

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому транс-3-метилпентадиена-1,3

Таблица 2 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому транс-3-метилпентадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,90	2,80	2,70	2,60	2,60	2,50	2,50
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,41	1,41
C(4)-C(3)	1,45	1,45	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44
C(5)-C(4)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
C(6)-C(5)	1,49	1,49	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(7)-C(4)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(10)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(11)-C(5)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(12)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Продолжение таблицы 2

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-H(1)	2,50	2,40	2,40	2,40	2,30	2,30	2,30	2,20	2,20	2,10	2,10
C(3)-C(2)	1,42	1,42	1,43	1,44	1,44	1,45	1,46	1,46	1,48	1,48	1,49
C(4)-C(3)	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41
C(5)-C(4)	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,41	1,41	1,41	1,41
C(6)-C(5)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49
C(7)-C(4)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11
H(10)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(11)-C(5)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(12)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Таблица 3 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому транс-3-метилпентадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	76	80	79	79	78	82	81	85
C(4)-C(3)-C(2)	128	128	128	128	128	128	128	128	128	128
C(5)-C(4)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(6)-C(5)-C(4)	129	129	129	129	129	129	129	129	129	129
C(7)-C(4)-C(3)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
H(8)-C(2)-C(3)	125	125	125	125	125	125	125	125	124	124
H(9)-C(2)-C(3)	121	121	121	121	121	121	121	120	120	120
H(10)-C(3)-C(2)	115	115	115	115	115	115	115	115	115	114
H(11)-C(5)-C(4)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(12)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(13)-C(6)-C(5)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(14)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(7)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(17)-C(7)-C(4)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112

Продолжение таблицы 3

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	88	87	91	95	94	98	102	100	105	103	107
C(4)-C(3)-C(2)	128	128	128	128	129	129	129	129	129	129	129
C(5)-C(4)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(6)-C(5)-C(4)	129	129	129	129	129	129	129	129	129	129	129
C(7)-C(4)-C(3)	119	119	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(8)-C(2)-C(3)	124	124	123	122	122	121	120	119	118	117	115
H(9)-C(2)-C(3)	120	119	119	118	117	116	114	114	112	111	109
H(10)-C(3)-C(2)	114	114	114	114	114	113	113	113	113	113	112
H(11)-C(5)-C(4)	118	118	118	118	118	117	117	117	117	117	117
H(12)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(13)-C(6)-C(5)	112	112	112	112	112	112	111	111	111	111	111
H(14)-C(6)-C(5)	111	111	110	111	111	110	111	111	111	111	111
H(15)-C(7)-C(4)	111	111	111	111	111	110	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(17)-C(7)-C(4)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112

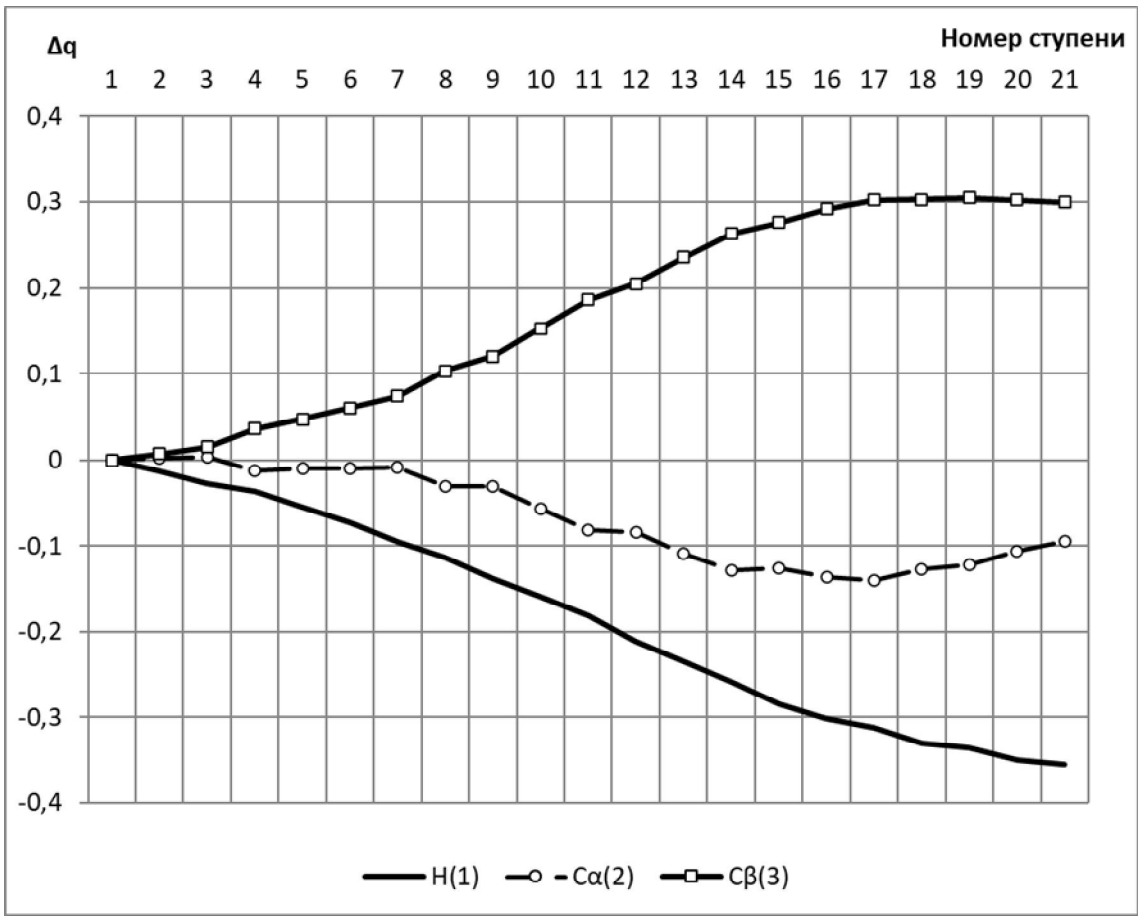

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому транс-3-метилпентадиена-1,3

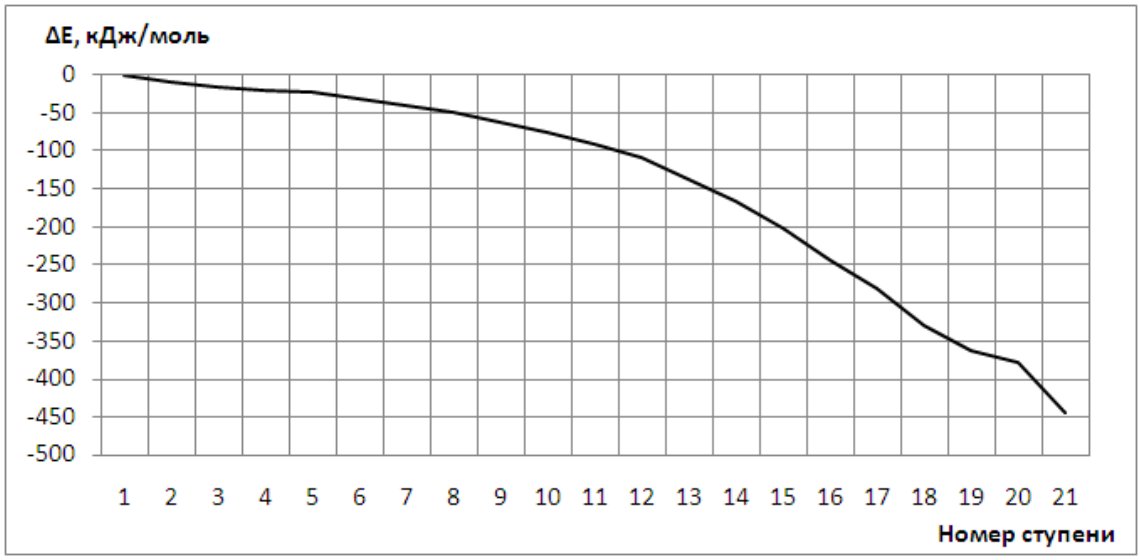

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому транс-3-метилпентадиена-1,3

Таблица 4 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому транс-3-метилпентадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,90	2,90	2,80	2,80	2,80	2,70	2,70
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40
C(4)-C(3)	1,45	1,45	1,44	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,46
C(4)-C(2)	2,55	2,55	2,55	2,55	2,55	2,55	2,55	2,55	2,55	2,55
C(5)-C(4)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,38	1,38	1,38	1,38
C(6)-C(5)	1,49	1,49	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
C(7)-C(4)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(10)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(11)-C(5)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(12)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Продолжение таблицы 4

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,70	2,70	2,60	2,60	2,60	2,50	2,50	2,40	2,40	2,40	2,30
C(3)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-C(2)	1,40	1,40	1,41	1,42	1,43	1,43	1,45	1,46	1,48	1,50	1,49
C(4)-C(3)	1,46	1,47	1,47	1,48	1,49	1,49	1,50	1,50	1,51	1,52	1,58
C(4)-C(2)	2,55	2,55	2,55	2,54	2,53	2,53	2,52	2,52	2,51	2,50	1,63
C(5)-C(4)	1,37	1,37	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,43
C(6)-C(5)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,49
C(7)-C(4)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,54
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(10)-C(3)	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,12	1,11
H(11)-C(5)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(12)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Таблица 5 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому транс-3-метилпентадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	76	72	68	67	63	59	58	54
C(4)-C(3)-C(2)	128	128	128	128	128	128	128	128	127	127
C(5)-C(4)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	123
C(6)-C(5)-C(4)	129	129	129	129	129	129	129	129	129	129
C(7)-C(4)-C(3)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	118
H(8)-C(2)-C(3)	125	125	125	125	125	125	125	125	124	124
H(9)-C(2)-C(3)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121

H(10)-C(3)-C(2)	115	115	115	115	115	115	115	115	115	115
H(11)-C(5)-C(4)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
H(12)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(13)-C(6)-C(5)	112	112	112	112	111	111	111	111	111	111
H(14)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	112	111	112
H(15)-C(7)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(17)-C(7)-C(4)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112

Продолжение таблицы 5

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	50	46	45	41	37	37	33	32	28	24	23
C(4)-C(3)-C(2)	126	125	124	123	121	120	118	117	114	111	64
C(5)-C(4)-C(3)	123	123	123	123	123	123	123	123	123	124	122
C(6)-C(5)-C(4)	129	129	129	129	129	129	129	129	129	129	130
C(7)-C(4)-C(3)	118	117	117	117	117	117	116	116	116	116	116
H(8)-C(2)-C(3)	124	124	124	123	123	123	123	123	123	123	121
H(9)-C(2)-C(3)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	120	121
H(10)-C(3)-C(2)	115	115	115	115	114	113	111	111	108	106	118
H(11)-C(5)-C(4)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	117
H(12)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	109
H(13)-C(6)-C(5)	111	111	111	111	111	110	111	111	111	111	109
H(14)-C(6)-C(5)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	115
H(15)-C(7)-C(4)	111	111	111	112	112	112	112	112	112	112	112
H(16)-C(7)-C(4)	111	111	111	111	111	112	112	112	112	112	111
H(17)-C(7)-C(4)	112	112	112	112	111	110	110	110	110	110	110

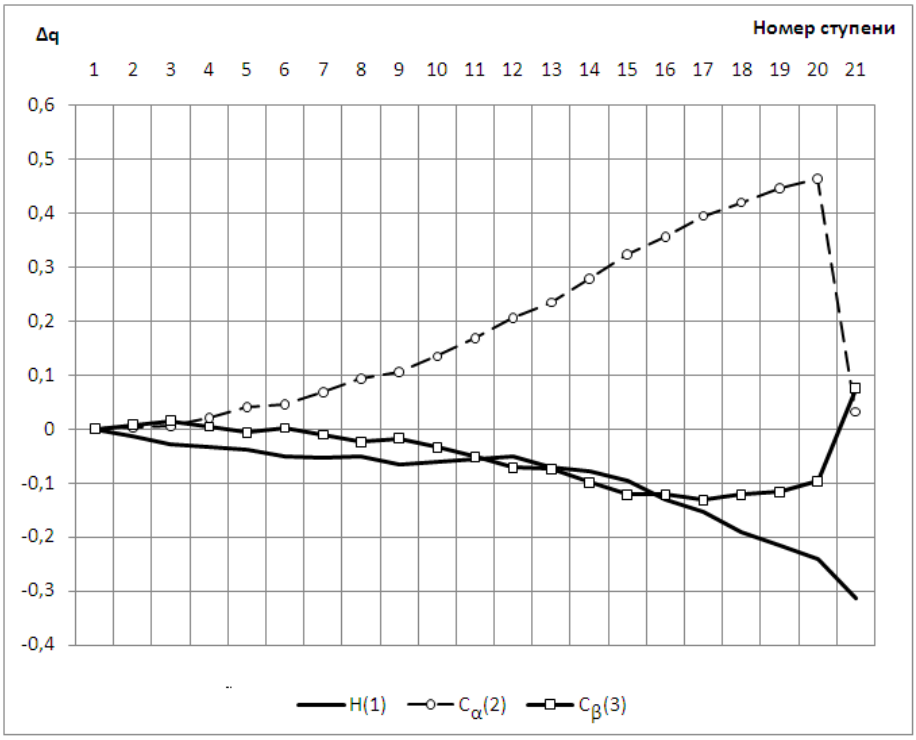

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому транс-3-метилпентадиена-1,3

Список литературы

1. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов /Дж. Кеннеди. – Изд-во «Мир»: М., 1978. – 431 с.
2. Сангалов, Ю. А. Полимеры и сополимеры 4-метилпентена-1 / Ю. А. Сангалов, К. С. Минскер. – Уфа, 2001. – 381 с.
3. Бабкин В.А. Квантовохимический аспект катионной полимеризации олефинов / В.А. Бабкин, Г.Е. Заиков, К.С. Минскер. – Изд-во «Гилем»: Уфа, 1996. – 182 с.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
7. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.
8. Бабкин В.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тетраметилстирола методом AB INITIO. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Титова Е.С. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – С. 22-28.
9. Бабкин В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации 1-метилен-4-винилциклогексана. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Овчарова В.А., Пристансков А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – № 4 (199). – С. 43-47.
10. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 164-170.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 170-186.
12. Овчарова В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации аллилциклогексана. / Овчарова В.А., Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Фомичёв В.Т., Федунов Р.Г., Стоянов О.В., Заиков Г.Е., Сангалов Ю.А. // В сборнике: Состояние, проблемы и перспективы развития социально-ориентированного строительного комплекса на региональном уровне. Материалы IV Всероссийской научно-технической

интернет-конференции, посвящённой 15-летию Себряковского филиала ВолгГТУ. – 2017. – С. 116-129.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – № 4 (125). – С. 5-6.
14. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции. – 2017. – С. 17-22.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 107-112.
16. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 30-36.
17. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 36-42.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРОТОНИРОВАНИЯ ЦИС-3-МЕТИЛПЕНТАДИЕНА-1,3 МЕТОДОМ MNDO

Анисимова В.С.

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования цис-3-метилпентадиена-1,3 классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция экзотермична и имеет без барьерный характер. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α-углеродный атом равен 525 кДж/моль. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

Summary

For the first time it is researched of classical quantum chemical method MNDO of modeling mechanism protonizataion of cis-3-methylpentadiene-1,3 – monomer of cationic polymerization. Showing, that he considerate some self usual mechanism connection proton to olefin corresponding Morkovnikov's rule. Reaction exothermic and carry without a barrier character. Prize energy in result of reaction – 525 kDg/mol.

Ключевые слова*: механизм протонирования, метод MNDO, цис-3-метилпентадиен-1,3, правило Марковникова.*

Keywords*: mechanism protonizataion, method MNDO, cis-3-methylpentadiene-1,3, Markovnikov's rule.*

Методическая часть

Используя классические представления о механизме инициирования катионной полимеризации в присутствии различных каталитических комплексов [1-3], для изучения механизма протонирования был выбран квантовохимический поуэмпирическиий метод MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [4-5], в связи с тем, что этот метод специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … C_6H_{10} (цис-3-метилпентадиен-1,3) 17 атомов, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M-мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$.

Для исследования механизма протонирования цис-3-метилпентадиена-1,3 выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с цис-3-метилпентадиеном-1,3 по методике, аналогичной [8-17]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. По полученным данным значений энергий вдоль координат реакции строилась эквипотенциальная поверхность взаимодействий протона цис-3-метилпентадиеном-1,3 (см. рис. 4.). Исходная модель атаки протона молекулы цис-3-метилпентадиена-1,3 показана на рис. 1.

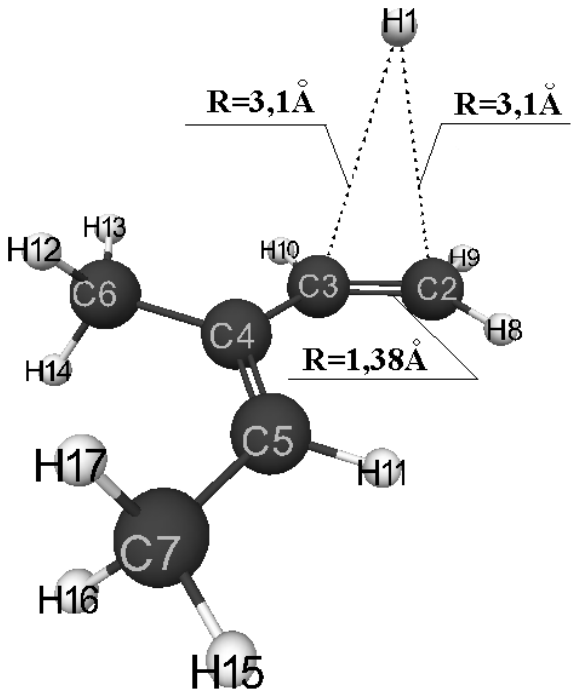

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы цис-3-метилпентадиена-1,3

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt[6].

Результаты расчетов

Значения энергий молекулярной системы H^+ … C_6H_{10} вдоль координат реакций R_{H1C2} и R_{H1C3} показаны в таблице 1. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома цис-3-метилпентадиена-1,3 (C_2) и разрыва двойной связи цис-3-метилпентадиена-1,3 представлена на рис. 2. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома цис-3-метилпентадиена-1,3 (C_3) и разрыва двойной связи $C_2 = C_3$ показана на рис. 3. Заряды на атомах конечных моделей сформированных карбкатионнов представлены в табл. 2. Изменение общей энергии при протонизации цис-3-метилпентадиена-1,3 показано в табл. 1, из которой видно, что на всем пути движения протона (инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы H^+ … C_6H_{10} (E_0) неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона (см. рис. 4) и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β- углеродные атомы цис-3-метилпентадиена-1,3. Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 74 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β-углеродного атома, что находится в полном соответствии с классическим правилом Марковникова. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α- углеродный атом равен 525 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 451 кДж/моль.

Более того, по pKa=42,11-147,18q_{max}^{H+}[7] (q_{max}^{H+} = +0,101 – максимальный заряд на атоме водорода, pKa- универсальный показатель кислотности), находим значение кислотной силы сформированных карбкатионов, равное pKa = 27

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы цис-3-метилпентадиена-1,3 свидетельствует о том, что механизм протонирования катионной полимеризации цис-3-метилпентадиена-1,3 идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования цис-3-метилпентадиена-1,3 квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

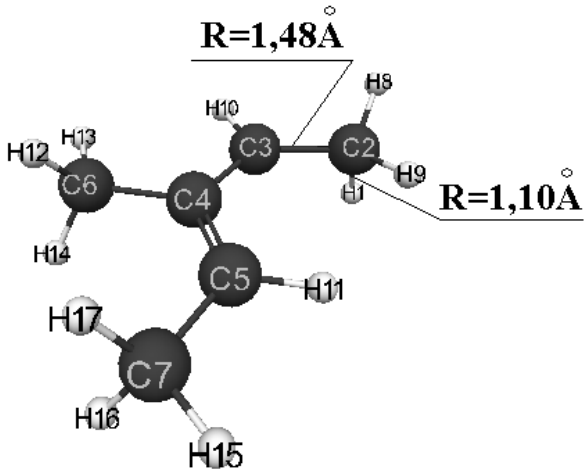

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α – углеродного атома цис-3-метилпентадиена-1,3 (C_2)

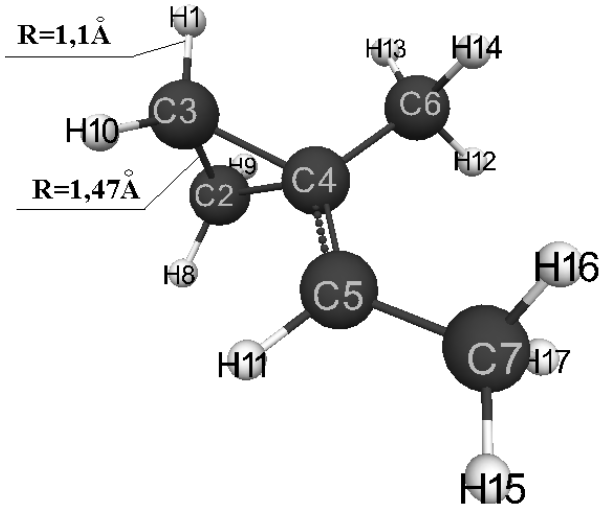

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β – углеродного атома цис-3-метилпентадиена-1,3 (C_3)

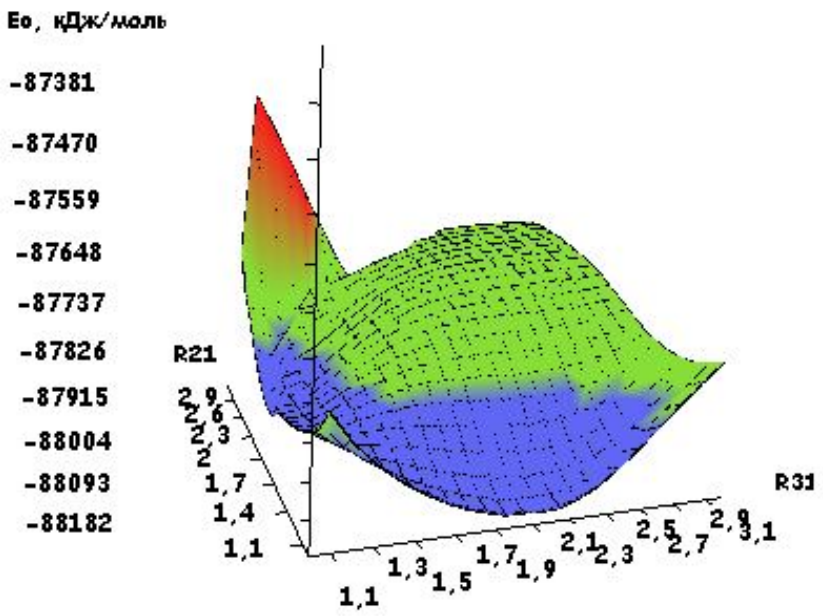

Рис. 4 – Потенциальная поверхность энергий взаимодействий протона с цис-3-метилпентадиеном-1,3

Таблица 1 – Изменение общей энергии молекулярной системы H^+ … C_6H_{10} – E_o (в кДж/моль) вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} (в А)

R_{H1C3}	R_{H1C2}										
	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
3,1	0	-2	-7	-15	-21	-31	-42	-55	-70	-86	-107
3,0	-2	-5	-10	-18	-23	-34	-44	-57	-73	-92	-113
2,9	-5	-7	-13	-21	-26	-36	-47	-60	-76	-97	-120
2,8	-7	-10	-15	-23	-28	-39	-50	-63	-81	-99	-123
2,7	-10	-15	-21	-26	-34	-42	-52	-68	-84	-102	-128
2,6	-15	-21	-23	-31	-36	-47	-57	-70	-86	-107	-131
2,5	-21	-26	-28	-36	-42	-52	-63	-76	-92	-110	-133
2,4	-28	-31	-36	-42	-50	-57	-68	-81	-94	-115	-136
2,3	-346	-42	-44	-50	-57	-65	-76	-86	-102	-120	-141
2,2	-330	-52	-57	-63	-68	-76	-84	-97	-110	-126	-147
2,1	-309	-323	-70	-76	-84	-89	-97	-107	-120	-136	-155
2,0	-280	-301	-89	-94	-102	-107	-115	-123	-136	-149	-165
1,9	-236	-267	-107	-118	-123	-131	-136	-144	-155	-165	-181
1,8	-175	-223	-131	-141	-152	-160	-160	-170	-178	-189	-202
1,7	-97	-162	-152	-170	-183	-191	-199	-210	-210	-218	-228
1,6	-7	-81	-173	-197	-215	-228	-236	-246	-252	-252	-260
1,5	87	-197	-183	-220	-246	-262	-275	-286	-291	-296	-299
1,4	184	-210	-257	-233	-270	-296	-312	-325	-333	-336	-338
1,3	276	-215	-267	-315	-280	-315	-341	-359	-370	-372	-375
1,2	360	-207	-260	-312	-359	-396	-420	-378	-393	-399	-401
1,1	-81	-189	-231	-283	-336	-383	-417	-441	-451	-451	-406

R_{H1C3}	R_{H1C2}									
	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
3,1	-128	-149	-170	-189	-202	-212	-215	-212	-202	-178
3,0	-139	-165	-191	-220	-244	-262	-270	-270	-254	-223
2,9	-147	-175	-207	-241	-275	-304	-323	-325	-312	-278
2,8	-152	-183	-220	-257	-296	-333	-362	-378	-367	-333
2,7	-157	-189	-228	-267	-312	-354	-393	-417	-420	-388
2,6	-160	-194	-233	-275	-323	-370	-414	-448	-459	-438
2,5	-162	-197	-236	-280	-330	-380	-425	-467	-488	-480
2,4	-165	-199	-238	-283	-333	-386	-435	-477	-506	-506
2,3	-168	-202	-241	-286	-333	-386	-438	-483	-514	-525
2,2	-173	-204	-241	-286	-333	-386	-438	-485	-517	-530
2,1	-178	-207	-244	-286	-333	-383	-435	-483	-517	-525
2,0	-189	-215	-246	-286	-330	-378	-430	-475	-511	-525
1,9	-199	-223	-252	-288	-328	-375	-422	-464	-498	-511
1,8	-218	-236	-262	-291	-328	-370	-412	-454	-485	-496
1,7	-238	-254	-275	-299	-330	-365	-404	-438	-467	-475
1,6	-267	-278	-294	-312	-336	-365	-393	-425	-446	-448
1,5	-301	-309	-317	-330	-346	-365	-386	-406	-422	-420
1,4	-341	-341	-343	-349	-357	-367	-380	-391	-393	-383
1,3	-375	-372	-370	-370	-370	-370	-372	-370	-362	-341
1,2	-399	-396	-388	-380	-375	-367	-357	-343	-323	-288
1,1	-404	-399	-388	-378	-365	-346	-328	-304	-270	-218

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому цис-3-метилпентадиена-1,3

Таблица 2 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому цис-3-метилпентадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-C(4)	2,56	2,56	2,56	2,56	2,56	2,57	2,57	2,57	2,57	2,58
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,41
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,90	2,80	2,70	2,60	2,60	2,60	2,50
C(4)-C(3)	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,44	1,44	1,44
C(5)-C(4)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39
C(6)-C(4)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(7)-C(5)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(10)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(11)-C(5)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(12)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Продолжение таблицы 2

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-C(4)	2,58	2,58	2,59	2,59	2,60	2,60	2,60	2,61	2,62	2,62	2,62
C(2)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-C(2)	1,41	1,42	1,42	1,43	1,44	1,45	1,45	1,46	1,47	1,47	1,48
C(3)-H(1)	2,50	2,40	2,30	2,20	2,20	2,20	2,10	2,10	2,10	2,00	2,00
C(4)-C(3)	1,44	1,43	1,43	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,41	1,41	1,41
C(5)-C(4)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,40	1,40	1,41
C(6)-C(4)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(7)-C(5)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11
H(10)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(11)-C(5)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(12)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Таблица 3 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому цис-3-метилпентадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-C(4)-C(3)	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
C(3)-C(2)-C(4)	26	26	26	26	26	26	26	26	26	26
C(4)-C(3)-C(2)	129	129	129	129	129	129	129	129	129	130
C(5)-C(4)-C(3)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
C(6)-C(4)-C(3)	116	116	116	116	116	116	116	116	117	117
C(7)-C(5)-C(4)	128	128	128	128	128	128	128	128	128	128
H(8)-C(2)-C(4)	99	99	99	99	99	99	99	99	99	99

H(9)-C(2)-C(4)	147	147	147	147	147	146	146	146	146	145
H(10)-C(3)-C(2)	115	115	115	115	115	115	115	115	115	115
H(11)-C(5)-C(4)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
H(12)-C(6)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(13)-C(6)-C(4)	113	113	112	112	112	112	112	112	112	112
H(14)-C(6)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(17)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111

Продолжение таблицы 3

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-C(4)-C(3)	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
C(3)-C(2)-C(4)	25	25	25	25	25	25	25	24	24	24	24
C(4)-C(3)-C(2)	130	130	130	130	130	130	130	130	130	131	131
C(5)-C(4)-C(3)	123	123	123	123	123	123	123	123	123	123	123
C(6)-C(4)-C(3)	117	117	117	117	117	117	117	117	117	117	117
C(7)-C(5)-C(4)	128	128	128	128	128	128	128	128	128	128	128
H(8)-C(2)-C(4)	99	99	99	98	98	98	139	137	134	133	130
H(9)-C(2)-C(4)	145	144	144	143	142	140	97	96	95	95	94
H(10)-C(3)-C(2)	114	114	114	114	114	113	113	113	113	113	113
H(11)-C(5)-C(4)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
H(12)-C(6)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(13)-C(6)-C(4)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(14)-C(6)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(17)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111

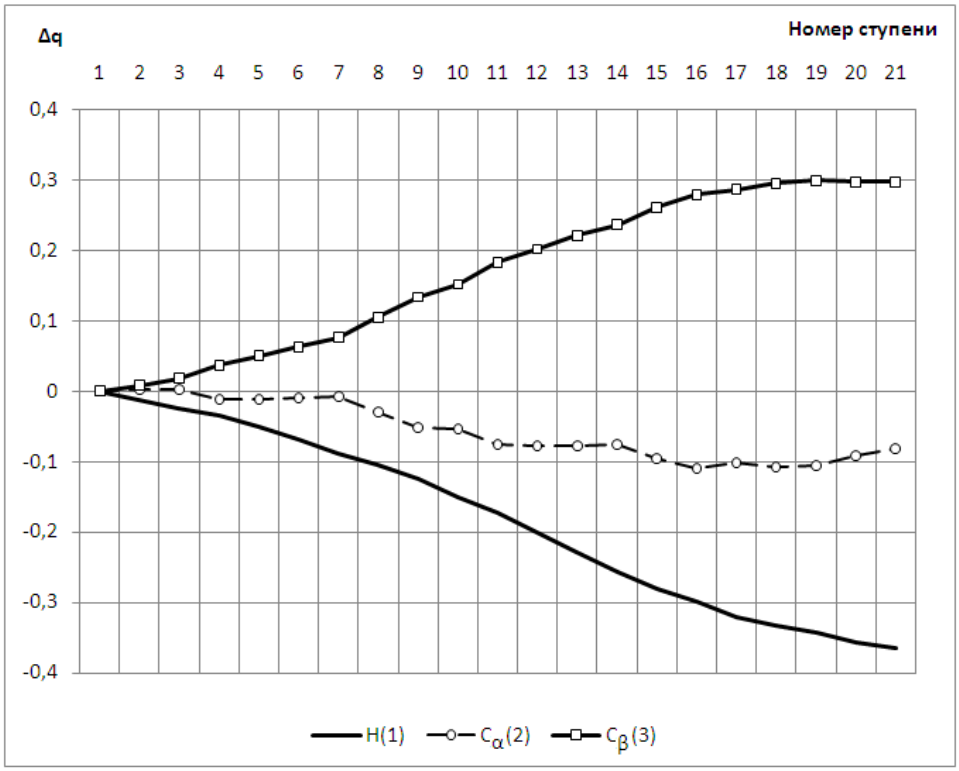

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому цис-3-метилпентадиена-1,3

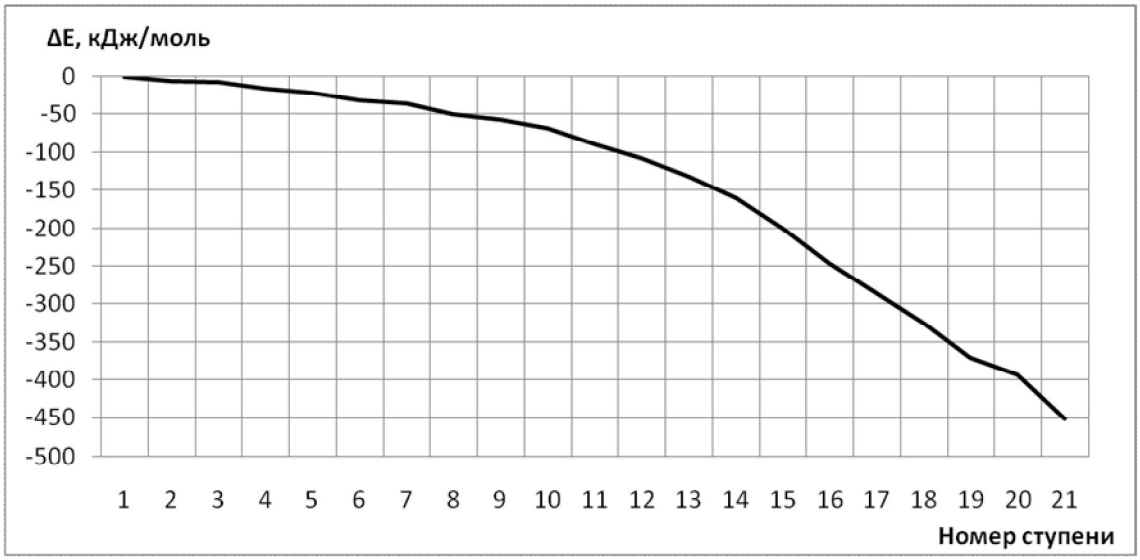

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому цис-3-метилпентадиена-1,3

Таблица 4 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому цис-3-метилпентадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-C(4)	2,56	2,56	2,56	2,56	2,56	2,57	2,57	2,57	2,57	2,57
C(2)-H(1)	3,10	3,00	3,00	2,90	2,90	2,80	2,80	2,70	2,70	2,70
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(4)-C(3)	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,46	1,46
C(5)-C(4)	1,39	1,39	1,39	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,37
C(6)-C(4)	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52	1,52
C(7)-C(5)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50
H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(10)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(11)-C(5)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(12)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Продолжение таблицы 4

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-C(4)	2,58	2,56	2,56	2,59	2,55	2,55	2,54	2,53	2,53	2,52	1,62
C(2)-H(1)	2,60	2,60	2,60	2,50	2,50	2,40	2,40	2,40	2,30	2,30	2,20
C(3)-C(2)	1,40	1,41	1,41	1,42	1,42	1,43	1,44	1,45	1,46	1,48	1,47
C(3)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(4)-C(3)	1,46	1,47	1,48	1,48	1,49	1,49	1,50	1,51	1,51	1,51	1,62
C(5)-C(4)	1,37	1,37	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,36	1,42
C(6)-C(4)	1,52	1,52	1,51	1,52	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,53
C(7)-C(5)	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,50	1,49

H(8)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(9)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(10)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,11	1,12	1,12	1,13	1,10
H(11)-C(5)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(12)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(13)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(14)-C(6)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(15)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(16)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11
H(17)-C(7)	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11	1,11

Таблица 5 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому цис-3-метилпентадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-C(4)-C(3)	25	25	25	25	25	25	25	25	25	26
C(3)-C(2)-C(4)	26	26	26	26	26	26	26	26	26	27
C(4)-C(3)-C(2)	129	129	129	129	129	129	129	129	129	128
C(5)-C(4)-C(3)	122	122	122	122	123	123	123	123	123	122
C(6)-C(4)-C(3)	116	116	116	116	116	116	116	116	116	116
C(7)-C(5)-C(4)	128	128	128	128	128	128	128	128	128	128
H(8)-C(2)-C(4)	99	99	99	99	99	99	99	99	99	98
H(9)-C(2)-C(4)	147	147	147	147	147	147	147	147	147	147
H(10)-C(3)-C(2)	115	115	115	115	115	115	115	115	115	115
H(11)-C(5)-C(4)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
H(12)-C(6)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(13)-C(6)-C(4)	113	113	113	112	112	112	112	112	112	112
H(14)-C(6)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(17)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	112

Продолжение таблицы 5

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-C(4)-C(3)	25	26	27	26	28	29	30	31	31	32	54
C(3)-C(2)-C(4)	26	28	28	27	30	30	31	32	32	33	63
C(4)-C(3)-C(2)	128	126	124	126	122	121	119	117	117	115	63
C(5)-C(4)-C(3)	123	122	122	123	121	119	119	120	120	121	117
C(6)-C(4)-C(3)	115	116	115	115	115	118	117	117	117	116	117
C(7)-C(5)-C(4)	128	128	128	128	128	128	128	128	128	128	128
H(8)-C(2)-C(4)	98	97	95	98	94	94	93	92	91	91	117
H(9)-C(2)-C(4)	147	148	149	147	150	150	151	152	153	151	115
H(10)-C(3)-C(2)	115	115	115	114	115	114	112	110	108	103	123
H(11)-C(5)-C(4)	119	119	119	120	119	119	119	119	119	119	118
H(12)-C(6)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(13)-C(6)-C(4)	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112	112
H(14)-C(6)-C(4)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(15)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(16)-C(7)-C(5)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(17)-C(7)-C(5)	111	112	112	111	111	112	111	111	111	111	111

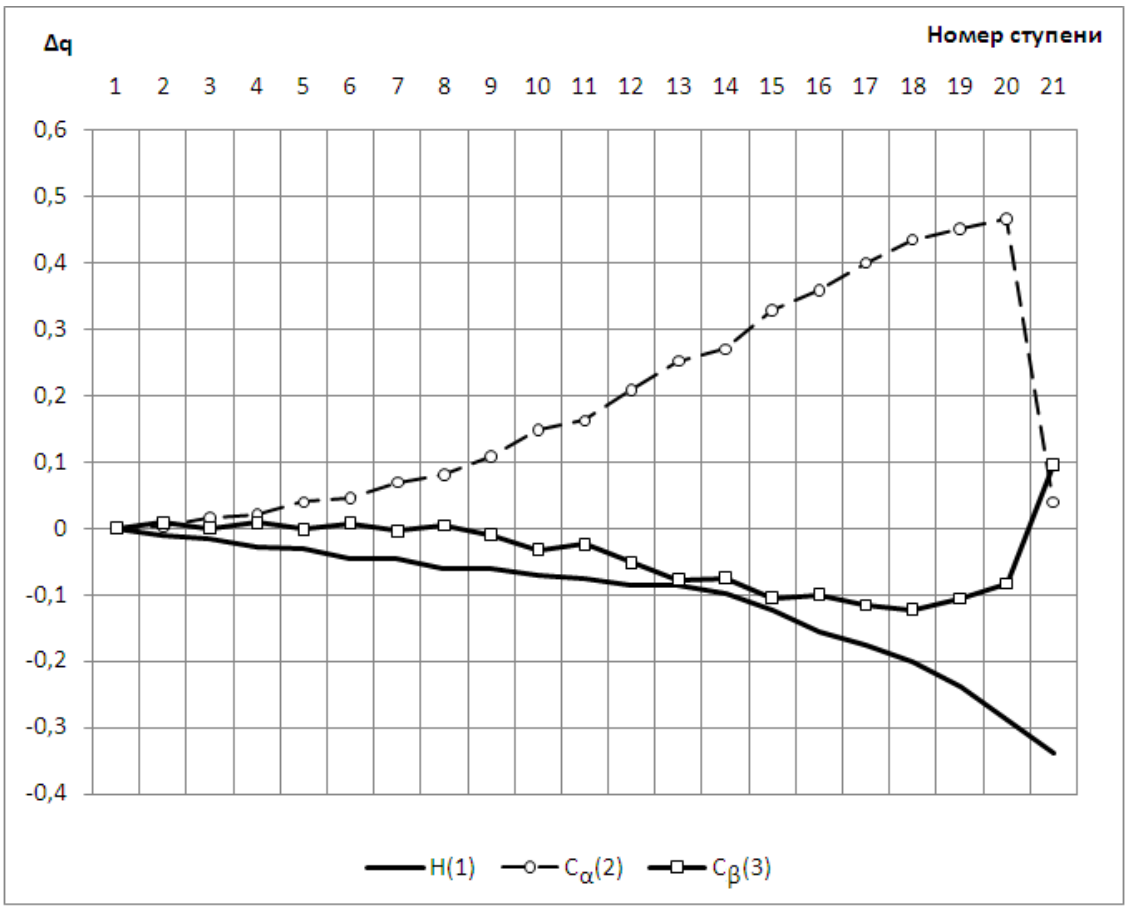

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому цис-3-метилпентадиена-1,3

Список литературы

1. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов /Дж. Кеннеди. – Изд-во «Мир»: М., 1978. – 431 с.
2. Сангалов, Ю. А. Полимеры и сополимеры 4-метилпентена-1 / Ю. А. Сангалов, К. С. Минскер. – Уфа, 2001. – 381 с.
3. Бабкин В.А. Квантовохимический аспект катионной полимеризации олефинов / В.А. Бабкин, Г.Е. Заиков, К.С. Минскер. – Изд-во «Гилем»: Уфа, 1996. – 182 с.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
7. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.

8. Бабкин В.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тетраметилстирола методом AB INITIO. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Титова Е.С. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – С. 22-28.
9. Бабкин В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации 1-метилен-4-винилциклогексана. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Овчарова В.А., Пристансков А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – № 4 (199). – С. 43-47.
10. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 164-170.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 170-186.
12. Овчарова В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации аллилциклогексана. / Овчарова В.А., Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Фомичёв В.Т., Федунов Р.Г., Стоянов О.В., Заиков Г.Е., Сангалов Ю.А. // В сборнике: Состояние, проблемы и перспективы развития социально-ориентированного строительного комплекса на региональном уровне. Материалы IV Всероссийской научно-технической интернет-конференции, посвящённой 15-летию Себряковского филиала ВолгГТУ. – 2017. – С. 116-129.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – № 4 (125). – С. 5-6.
14. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции. – 2017. – С. 17-22.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 107-112.
16. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // В сборнике:

Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 30-36.
17. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 36-42.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПРОТОНИРОВАНИЯ БУТАДИЕНА-1,3 МЕТОДОМ MNDO

Васильев Д.В.

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые исследован механизм протонирования бутадиена-1,3 классическим квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи мономера. Реакция экзотермична и имеет без барьерный характер. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α-углеродный атом равен 519 кДж/моль. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

Summary

For the first time it is researched of classical quantum chemical method MNDO of modeling mechanism protonizataion of butadiene-1,3 – monomer of cationic polymerization. Showing, that he considerate some self usual mechanism connection proton to olefin corresponding Morkovnikov's rule. Reaction exothermic and carry without a barrier character. Prize energy in result of reaction – 519 kDg/mol.

***Ключевые слова**: механизм протонирования, метод MNDO, бутадиен-1,3, правило Марковникова.*

***Keywords**: mechanism protonizataion, method MNDO, butadiene-1,3, Markovnikov's rule.*

Цель настоящей работы – квантово-химическое исследование механизма протонирования бутадиена-1,3 классическим полуэмпирическим методом MNDO .

Методическая часть

Для изучения механизма протонирования был выбран классический квантовохимический метод MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [4-5], в связи с тем, что этот метод

специально параметризован для наилучшего воспроизведения энергетических характеристик молекулярных систем, что является важным фактором при анализе механизмов катионных процессов. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе. В системе H^+ … C_4H_6 (бутадиен-1,3) 11 атомов, M=2S+1=1 (где S – суммарный спин всех электронов изучаемой системы равен нулю (все электроны спарены), M-мультиплетность), общий заряд молекулярной системы $\sum q_c = 1$

Для исследования механизма протонирования бутадиена-1,3 выполнялся расчет потенциальной энергии взаимодействия протона с бутадиеном-1,3, по методике, аналогичной [8-17]. В качестве координат реакции были выбраны расстояния от протона H_1 до C_2 (R_{H1C2}) и от H_1 до C_3 (R_{H1C3}). Исходные значения R_{H1C2} и R_{H1C3} принимались равными 0,31 нм. Далее, меняя значения R_{H1C2} с шагом 0,01 нм выполнялся квантово-химический расчет молекулярной системы изменяя значения R_{H1C3} с таким же шагом 0,01 нм. По полученным данным значений энергий вдоль координат реакции строилась эквипотенциальная поверхность взаимодействий протона бутадиеном-1,3 (см. рис. 4.). Исходная модель атаки протона молекулы бутадиена-1,3 показана на рис. 1.

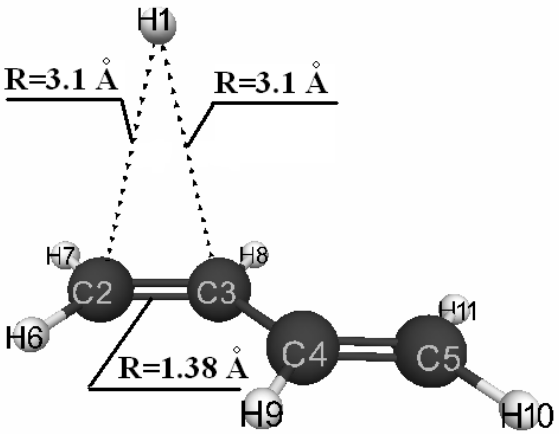

Рис. 1 – Исходная модель атаки протона молекулы бутадиена-1,3

Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt [6].

Результаты расчетов

Значения энергий молекулярной системы H^+ … C_4H_6 вдоль координат реакций R_{H1C2} и R_{H1C3} показаны в таблице 1. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α –углеродного атома бутадиена-1,3 (C_2) и разрыва двойной связи бутадиена-1,3 представлена на рис. 2. Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β –углеродного атома бутадиена-1,3 (C_3) и разрыва двойной связи $C_2 = C_3$ показана на рис. 3. Заряды на атомах конечных моделей сформированных карбкатионнов представлены в табл. 2. Изменение общей энергии при протонизации бутадиена-1,3 показано в табл. 1, из которой видно, что на всем пути движения протона

(инициирующая частица) $H^{+\delta}$ вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} отрицательное значения общей энергии системы H^+ … C_4H_6 (E_0) неуклонно возрастает вплоть до полного формирования карбкатиона (см. рис. 4) и носит безбарьерный характер как при атаке на α- так и на β- углеродные атомы бутадиена-1,3. Однако, конечная структура атаки протона α- углеродного атома на 78 кДж/моль энергетически выгоднее, чем конечная структура атаки протона β- углеродного атома, что находится в полном соответствии с классическим правилом Марковникова. Выигрыш энергии в результате реакции при атаке на α- углеродный атом равен 519 кДж/моль, а при атаке на β- углеродный атом равен 441 кДж/моль.

Более того, по pKa=42,11-147,18q_{max}^{H+} [7] (q_{max}^{H+} = +0,126- максимальный заряд на атоме водорода, pKa- универсальный показатель кислотности), находим значение кислотной силы сформированных карбкатионов, равное pKa = 24

Кроме того, анализ результатов квантово-химических расчетов и изменение длин связей и валентных углов вдоль координаты реакции в обоих случаях при атаке протона на α- так и на β- углеродные атомы бутадиена-1,3 свидетельствует о том, что механизм протонирования катионной полимеризации бутадиена-1,3 идет по классической схеме присоединения протона к двойной связи мономера.

Таким образом, нами впервые изучен механизм протонирования бутадиена-1,3 квантово-химическим методом MNDO. Показано, что этот механизм представляет собой обычную реакцию присоединения протона к двойной связи олефина. Реакция экзотермична и носит безбарьерный характер. Реакции энергетически выгодно идти по классической схеме в соответствии с правилом Марковникова.

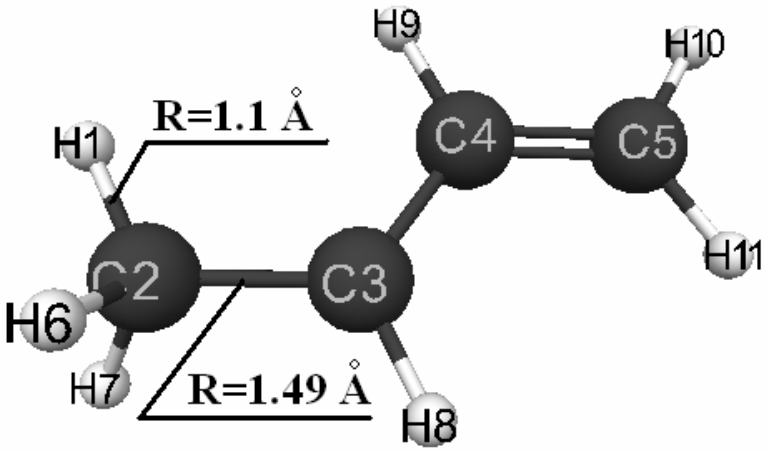

Рис.2 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 α – углеродного атома бутадиена-1,3 (C_2)

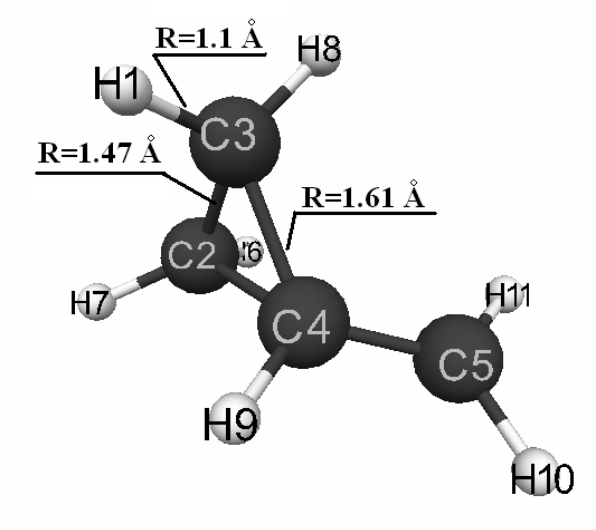

Рис.3 – Конечная структура сформированного карбкатиона после атаки протона H_1 β – углеродного атома бутадиена-1,3 (C_3)

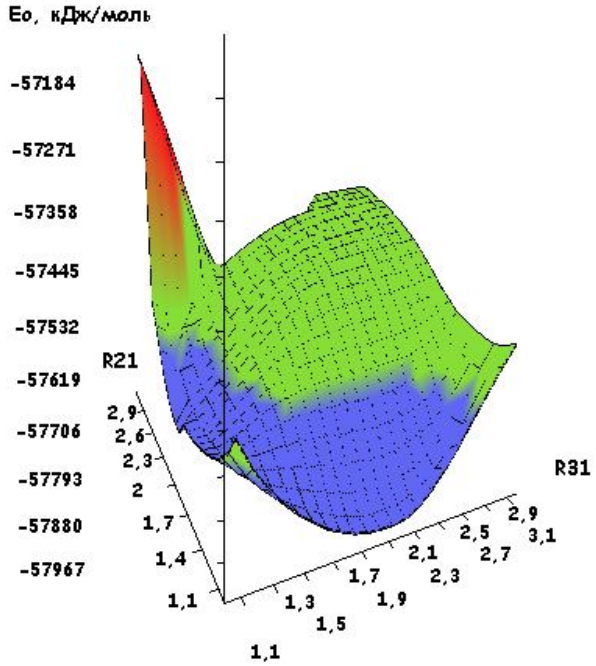

Рис. 4 – Потенциальная поверхность энергий взаимодействий протона с бутадиеном-1,3

Таблица 1 – Изменение общей энергии молекулярной системы H^+ … C_4H_6 – E_o (в кДж/моль) вдоль координат реакции R_{H1C2} и R_{H1C3} (в А)

R_{H1C3}	R_{H1C2}										
	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1
3,1	0	-2	-8	-15	-21	-31	-42	-55	-68	-86	-105
3,0	-2	-5	-10	-15	-23	-34	-44	-58	-73	-92	-113
2,9	-5	-8	-13	-18	-26	-36	-47	-60	-76	-97	-118
2,8	-8	-13	-15	-23	-31	-39	-50	-63	-79	-99	-123
2,7	-10	-15	-21	-26	-34	-42	-52	-68	-84	-102	-126
2,6	-15	-21	-26	-31	-39	-47	-58	-71	-86	-107	-128
2,5	-367	-26	-31	-36	-44	-52	-63	-76	-92	-110	-134
2,4	-383	-338	-39	-44	-52	-60	-68	-81	-97	-115	-136
2,3	-391	-333	-47	-52	-60	-68	-79	-89	-102	-120	-142
2,2	-396	-325	-58	-65	-71	-79	-89	-99	-113	-128	-149
2,1	-394	-315	-71	-79	-86	-94	-102	-113	-123	-139	-157
2,0	-386	-302	-89	-97	-105	-110	-118	-128	-139	-152	-168
1,9	-375	-283	-107	-118	-126	-134	-142	-149	-160	-170	-183
1,8	-241	-254	-128	-142	-152	-160	-168	-176	-183	-194	-204
1,7	-194	-215	-152	-170	-183	-191	-199	-207	-215	-223	-231
1,6	-126	-160	-170	-197	-215	-228	-236	-244	-249	-257	-262
1,5	-36	-84	-181	-218	-244	-262	-275	-283	-291	-294	-299
1,4	69	13	-247	-231	-267	-294	-310	-323	-331	-333	-338
1,3	171	124	-257	-304	-275	-312	-338	-354	-365	-370	-372
1,2	263	231	-252	-302	-349	-386	-349	-372	-388	-394	-396
1,1	349	334	-228	-273	-325	-372	-407	-430	-441	-441	-401

Продолжение таблицы 1

R_{H1C3}	R_{H1C2}									
	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1
3,1	-126	-147	-165	-181	-189	-194	-197	-197	-186	-163
3,0	-136	-163	-189	-212	-233	-247	-254	-252	-239	-210
2,9	-144	-173	-204	-236	-265	-288	-307	-310	-296	-262

2,8	-149	-181	-215	-252	-288	-323	-349	-359	-351	-317
2,7	-155	-186	-223	-265	-304	-346	-380	-404	-404	-372
2,6	-157	-191	-228	-270	-317	-362	-401	-435	-446	-422
2,5	-160	-194	-233	-275	-323	-372	-415	-456	-478	-464
2,4	-165	-197	-236	-278	-328	-378	-428	-467	-496	-496
2,3	-168	-199	-239	-281	-328	-380	-430	-475	-506	-514
2,2	-173	-204	-239	-281	-331	-380	-430	-478	-506	-519
2,1	-181	-210	-244	-283	-328	-378	-428	-475	-509	-517
2,0	-189	-215	-247	-283	-328	-375	-422	-470	-504	-514
1,9	-202	-226	-254	-288	-328	-370	-417	-459	-493	-504
1,8	-220	-239	-262	-294	-328	-367	-409	-449	-478	-488
1,7	-244	-257	-278	-302	-331	-365	-401	-435	-462	-470
1,6	-270	-283	-296	-315	-338	-365	-394	-422	-441	-443
1,5	-304	-312	-320	-331	-346	-367	-388	-407	-420	-415
1,4	-338	-341	-346	-351	-359	-370	-380	-391	-394	-380
1,3	-372	-372	-370	-370	-370	-370	-372	-372	-362	-338
1,2	-396	-394	-388	-380	-375	-367	-357	-344	-323	-286
1,1	-399	-394	-386	-375	-362	-346	-328	-302	-267	-218

Рис. 5 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому бутадиена-1,3

Таблица 2 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому бутадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,90	2,80	2,70	2,70	2,60	2,60	2,60
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,41
C(4)-C(3)	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,43	1,43	1,43	1,43
C(5)-C(4)	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37
H(6)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(7)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(8)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(9)-C(4)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(10)-C(5)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(11)-C(5)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Продолжение таблицы 2

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-H(1)	2,60	2,50	2,50	2,50	2,40	2,40	2,30	2,30	2,20	2,20	2,20
C(3)-C(2)	1,41	1,42	1,43	1,43	1,44	1,45	1,46	1,47	1,47	1,48	1,49
C(4)-C(3)	1,43	1,43	1,42	1,42	1,42	1,41	1,41	1,41	1,41	1,41	1,40
C(5)-C(4)	1,37	1,37	1,37	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39
H(6)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11
H(7)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11
H(8)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(9)-C(4)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(10)-C(5)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(11)-C(5)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Таблица 3 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α –углеродному атому бутадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	76	80	79	79	83	82	86	89
C(4)-C(3)-C(2)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125
C(5)-C(4)-C(3)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125
H(6)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	123	123	123	123	123
H(7)-C(2)-C(3)	122	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(8)-C(3)-C(2)	117	117	117	117	117	117	117	117	117	117
H(9)-C(4)-C(3)	117	117	117	117	117	117	117	117	117	117
H(10)-C(5)-C(4)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
H(11)-C(5)-C(4)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124

Продолжение таблицы 3

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	93	92	96	101	99	104	102	107	105	110	115
C(4)-C(3)-C(2)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	126	125
C(5)-C(4)-C(3)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125
H(6)-C(2)-C(3)	122	122	121	120	120	119	118	114	113	111	109
H(7)-C(2)-C(3)	120	120	119	118	118	116	116	116	116	111	109
H(8)-C(3)-C(2)	117	117	116	116	116	116	116	116	116	115	115
H(9)-C(4)-C(3)	117	117	117	117	117	118	118	118	118	118	118
H(10)-C(5)-C(4)	122	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(11)-C(5)-C(4)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124

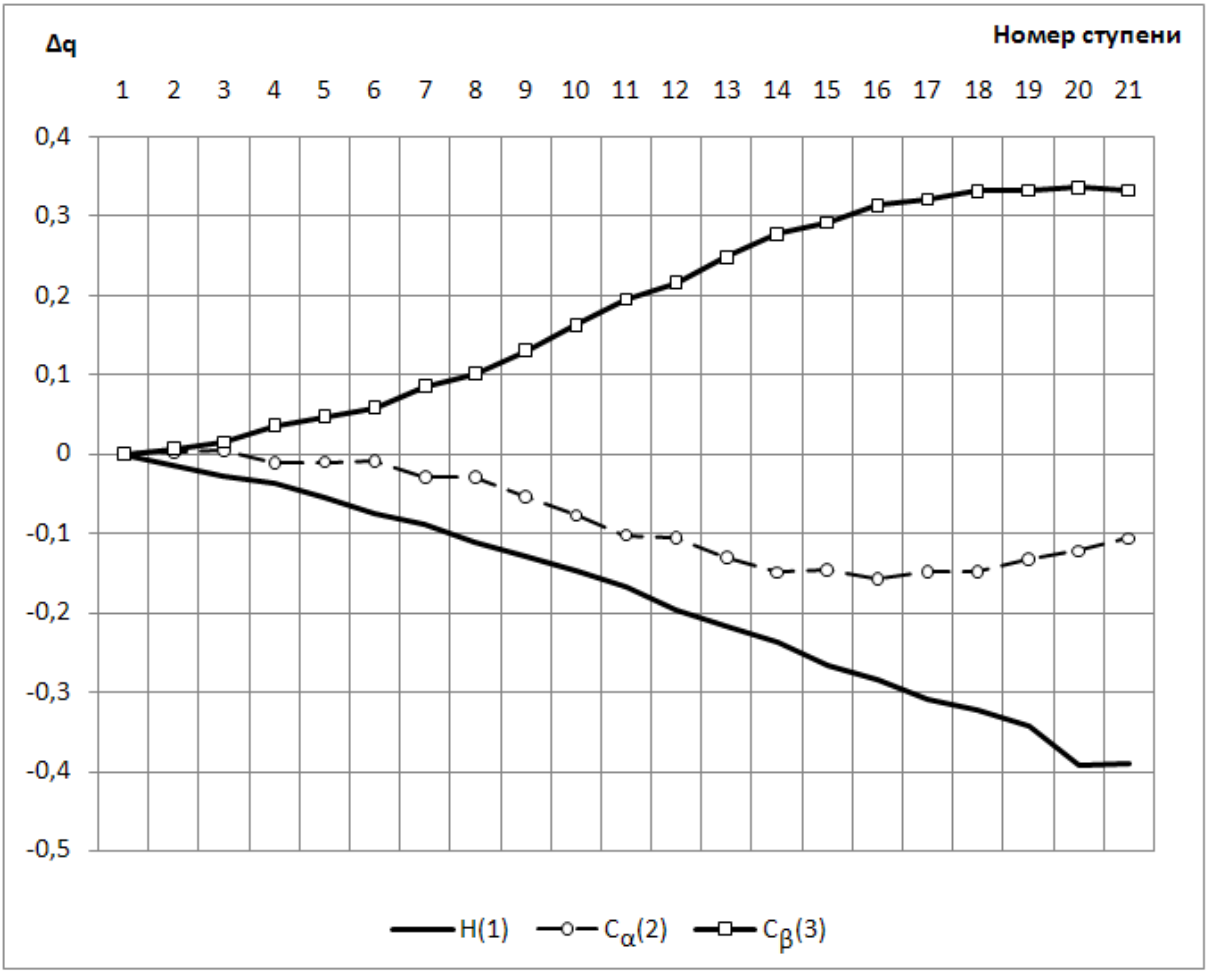

Рис. 6 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к α–углеродному атому бутадиена-1,3

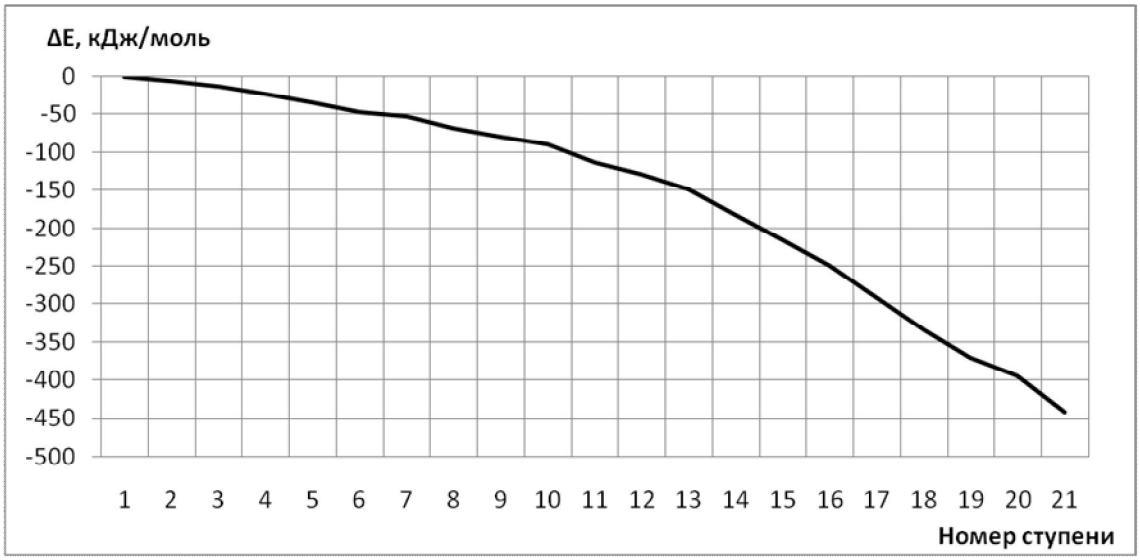

Рис. 7 – Изменение общей энергии вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому бутадиена-1,3

Таблица 4 – Изменение длин связей вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому бутадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(2)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,60	2,50	2,50	2,50
C(3)-H(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
C(3)-C(2)	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,40
C(4)-C(3)	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,44	1,45
C(5)-C(4)	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37	1,37	1,36	1,36	1,36	1,36
H(6)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(7)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(8)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(9)-C(4)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10
H(10)-C(5)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(11)-C(5)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Продолжение таблицы 4

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-H(1)	2,40	2,40	2,40	2,30	2,30	2,30	2,30	2,20	2,20	2,20	2,20
C(3)-H(1)	2,10	2,00	1,90	1,80	1,70	1,60	1,50	1,40	1,30	1,20	1,10
C(3)-C(2)	1,41	1,41	1,41	1,42	1,42	1,43	1,44	1,44	1,46	1,47	1,47
C(4)-C(3)	1,45	1,45	1,46	1,46	1,47	1,48	1,48	1,49	1,49	1,50	1,61
C(5)-C(4)	1,36	1,36	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,35	1,34	1,34	1,40
H(6)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(7)-C(2)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(8)-C(3)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,12	1,12	1,10
H(9)-C(4)	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10
H(10)-C(5)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(11)-C(5)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Таблица 5 – Изменение валентных углов вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому бутадиена-1,3

номер ступени	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
H(1)-C(2)-C(3)	77	77	76	76	75	74	70	70	65	61
C(4)-C(3)-C(2)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125
C(5)-C(4)-C(3)	125	125	125	125	125	125	125	125	125	125
H(6)-C(2)-C(3)	124	124	124	124	124	123	123	123	123	123
H(7)-C(2)-C(3)	122	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(8)-C(3)-C(2)	117	117	117	117	117	117	117	117	117	117
H(9)-C(4)-C(3)	117	117	117	117	117	117	117	117	117	117
H(10)-C(5)-C(4)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122
H(11)-C(5)-C(4)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124

Продолжение таблицы 6

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(1)-C(2)-C(3)	60	56	52	51	47	43	39	39	35	31	26
C(4)-C(3)-C(2)	124	124	123	123	122	121	120	119	117	116	63
C(5)-C(4)-C(3)	125	125	125	125	125	125	125	125	126	126	123
H(6)-C(2)-C(3)	123	123	123	123	123	123	123	123	123	123	121
H(7)-C(2)-C(3)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(8)-C(3)-C(2)	117	117	117	116	116	115	114	113	111	108	123
H(9)-C(4)-C(3)	116	116	116	116	116	115	115	115	115	114	114
H(10)-C(5)-C(4)	122	122	122	122	122	122	122	122	122	122	121
H(11)-C(5)-C(4)	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124	124

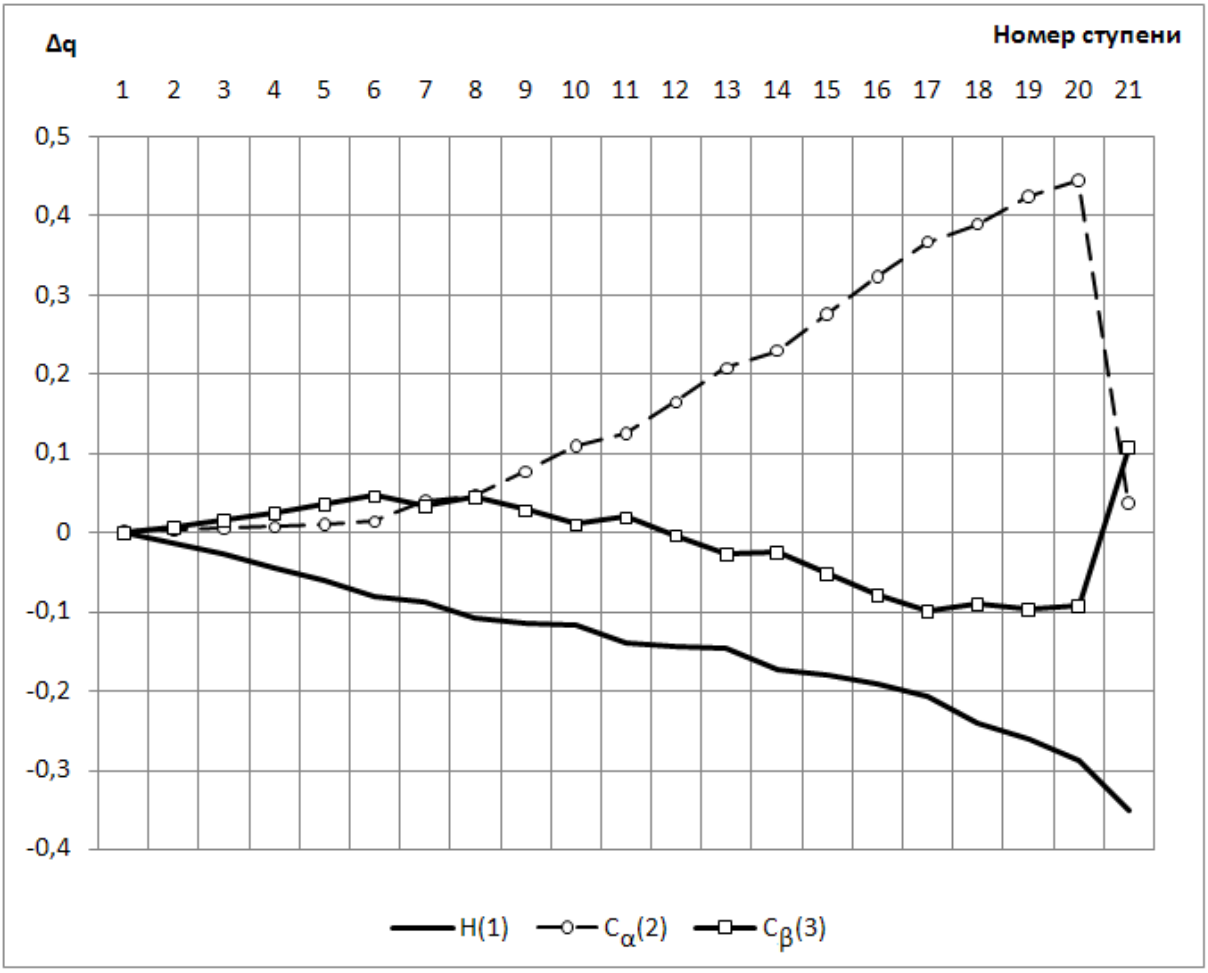

Рис. 8 – Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции присоединения протона H_1 к β–углеродному атому бутадиена-1,3

Список литературы

1. Кеннеди, Дж. Катионная полимеризация олефинов /Дж. Кеннеди. – Изд-во «Мир»: М., 1978. – 431 с.
2. Сангалов, Ю. А. Полимеры и сополимеры 4-метилпентена-1 / Ю. А. Сангалов, К. С. Минскер. – Уфа, 2001. – 381 с.
3. Бабкин В.А. Квантовохимический аспект катионной полимеризации олефинов / В.А. Бабкин, Г.Е. Заиков, К.С. Минскер. – Изд-во «Гилем»: Уфа, 1996. – 182 с.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
7. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A.,

Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.
8. Бабкин В.А. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тетраметилстирола методом AB INITIO. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Титова Е.С. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – С. 22-28.
9. Бабкин В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации 1-метилен-4-винилциклогексана. / Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Овчарова В.А., Пристансков А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – № 4 (199). – С. 43-47.
10. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 164-170.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the *ab initio* method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы I Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» и Горного института Национального исследовательского технологического университета «Московский институт стали и сплавов». – 2018. – С. 170-186.
12. Овчарова В.А. Потенциальная поверхность взаимодействия протона и мономера катионной полимеризации аллилциклогексана. / Овчарова В.А., Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Фомичёв В.Т., Федунов Р.Г., Стоянов О.В., Заиков Г.Е., Сангалов Ю.А. // В сборнике: Состояние, проблемы и перспективы развития социально-ориентированного строительного комплекса на региональном уровне. Материалы IV Всероссийской научно-технической интернет-конференции, посвящённой 15-летию Себряковского филиала ВолгГТУ. – 2017. – С. 116-129.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – № 4 (125). – С. 5-6.
14. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции. – 2017. – С. 17-22.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 107-112.

16. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 30-36.
17. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет». – Волгоград, 2020. – С. 36-42.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ ОКСИДА ГРАФЕНА В РАМКАХ СТРУКТУРЫ ЛЕРФА – КЛИНОВСКОГО МЕТОДОМ MNDO

***Бабкин В.А., *Андреев Д. С, *Чепурнов С. В. , *Болдырев Р.О., **Федунов Р.Г., *Киселева М.Н., ***Арцис М.И., ***Заиков Г.Е.**

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета
**Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук
***Институт биохимической физики РАН

Аннотация

В настоящей работе выполнен квантово-химический расчёт молекулы оксида графена методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Установлено, что изучаемая молекула оксида графена относится к классу средних бренстедовских кислот (pKa=9).

Summary

In this paper, a quantum chemical calculation of the graphene oxide molecule is performed using the MNDO method. The optimized geometric and electronic structure of this compound is obtained. It is established that the studied graphene oxide molecule belongs to the class of medium Brönsted acids (pKa=9). Keywords: quantum chemical calculation, MNDO method, graphene oxide.

Ключевые слова: *квантово-химический расчет, метод MNDO, оксид графена, кислотная сила, pKa, универсальный показатель кислотности.*

Keywords: *quantum chemical calculation, MNDO method, graphene oxide, acid strength, pKa, universal acidity index.*

Несмотря на то, что ещё в 19-20 веках оксиды графенов были синтезированы, и были предложены различные модели (Гоффмана, Накадзимы-Мацуо, Лерфа-Клиновского и др. [1,2]), квантово-химический расчёт этих моделей до сих пор не выполнялся. В связи с этим, целью настоящей работы является квантово-химический расчёт оксида графена в рамках модели Лерфа-Клиновского методом MNDO по методике и с использованием программ [3-5], аналогично [6] с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Общий заряд изучаемой молекулярной системы в основном состоянии был равен 0, а мультиплетность 1, так как в основном состоянии молекул все электроны спарены, и суммарный спин равен 0. Поэтому, M=2S+1=1.

Результаты расчетов

Геометрическое и электронное строение модели оксида графена в рамках модели Лерфа-Клиновского после оптимизации его структуры показано на рис.1 .Оптимизированные длины связей между атомами углерода в кольце находится в диапазоне 1.34-1.62 (в ангстремах), C-H -1.09-1.13, C-O-1.37-1.43, H-O-0.95. Оптимизированные значения валенных углов (в градусах) получены соответственно следующие: C(7)-C(2)-C(1)- 118,C(8)-C(7)-C(2) -114,O(149)-C(7)-C(2) -111,C(1)-C(2)-C(3) -119,C(7)-C(2)-C(3) -124,C(2)-C(3)-C(4) -121,C(10)-C(3)-C(4) -117,C(6)-C(5)-C(4) -119,C(38)-C(5)-C(4) -119,C(3)-C(4)-C(5) -119,C(1)-C(6)-C(5) -121,C(37)-C(38)-C(5) -121,C(35)-C(4)-C(5) -120,C(2)-C(1)-C(6) -121,C(38)-C(5)-C(6) -122,C(9)-C(8)-C(7) -116,C(11)-C(8)-C(7) -124,C(10)-C(9)-C(8) -119,C(14)-C(9)-C(8) -119,O(190)-C(9)-C(8) -114,C(3)-C(10)-C(9) -116,O(190)-C(14)-C(9) -57,C(41)-C(14)-C(9) -120,C(39)-C(10)-C(9) -120,C(13)-C(14)-C(9) -120,C(2)-C(3)-C(10) -122,C(14)-C(9)-C(10) -117,C(40)-C(39)-C(10) -120,C(42)-C(39)-C(10) -122,C(9)-C(8)-C(11) -120C(13)-C(12)-C(11) -111,C(8)-C(11)-C(12) -123,C(14)-C(13)-C(12) -110,O(160)-C(13)-C(12) -105,O(190)-C(14)-C(13) -115,C(41)-C(14)-C(13) -117,C(9)-O(190)-C(14) -66,C(44)-C(41)-C(14) -119,C(42)-C(41)-C(14) -118,C(11)-C(12)-C(15) -117,C(13)-C(12)-C(15) -104,O(161)-C(12)-C(15) -103,C(12)-C(15)-C(16) -123,C(18)-C(17)-C(16) -118,C(22)-C(17)-C(16) -119,C(15)-C(16)-C(17) -123,C(43)-C(18)-C(17) -118,C(21)-C(22)-C(17) -108,C(45)-C(22)-C(17) -113,C(19)-C(16)-C(17) -118,O(151)-C(18)-C(17) -104,O(152)-C(22)-C(17) -102,C(46)-C(43)-C(18) -119,C(22)-C(17)-C(18) -123,C(44)-C(43)-C(18) -117,C(15)-C(16)-C(19) -118,C(16)-C(19)-C(20) -119,C(19)-C(20)-C(21) -122,C(23)-C(20)-C(21) -119,C(45)-C(22)-C(21) -115,C(20)-C(21)-C(22) -117,C(46)-C(45)-C(22) -121,C(48)-C(45)-C(22) -116,C(26)-C(21)-C(22) -122,O(168)-C(45)-C(22) -108,C(19)-C(20)-C(23) -119,C(20)-C(23)-C(24) -122,C(26)-C(25)-C(24) -120,C(23)-C(24)-C(25) -120,C(21)-C(26)-C(25) -119,C(27)-C(24)-C(25) -120,C(47)-C(26)-C(25) -118,C(20)-C(21)-C(26) -121,C(50)-C(47)-C(26) -118,C(23)-C(24)-C(27) -120,C(24)-C(27)-C(28) -122,C(30)-C(29)-C(28) -119,C(34)-C(29)-C(28) -120,C(32)-C(31)-C(28) -118,C(27)-C(28)-C(29) -120,C(25)-C(30)-C(29) -121,C(51)-C(34)-C(29) -120,C(31)-C(28)-C(29) -121,C(49)-C(30)-C(29) -121,C(33)-C(34)-C(29) -121,C(24)-C(25)-C(30) -118,C(26)-C(25)-C(30) -122,C(34)-C(29)-C(30) -120,C(52)-C(49)-C(30) -119,C(27)-C(28)-C(31) -119,O(150)-C(32)-C(31) -58,C(33)-C(32)-C(31) -118,C(31)-O(150)-C(32) -65,C(34)-C(33)-C(32) -121,C(53)-C(33)-C(32) -119,C(51)-C(34)-C(33) -119,O(150)-C(32)-C(33) -118,C(55)-C(51)-C(34) -121,C(52)-C(51)-C(34) -121,C(3)-C(4)-C(35) -122,C(58)-C(36)-C(35) -121,C(4)-C(35)-C(36) -120,C(57)-C(58)-C(36) -119,C(76)-C(58)-C(36) -122,C(40)-C(35)-C(36) -120,C(35)-C(36)-C(37) -118,C(58)-C(36)-

C(37) -121,C(36)-C(37)-C(38) -122,C(3)-C(10)-C(39) -123,C(35)-C(40)-C(39) -111,C(41)-C(42)-C(39) -122,C(56)-C(40)-C(39) -112,O(155)-C(40)-C(39) -108,C(59)-C(42)-C(39) -120,C(4)-C(35)-C(40) -119,C(42)-C(39)-C(40) -119,C(43)-C(44)-C(41) -122,O(190)-C(14)-C(41) -114,C(61)-C(44)-C(41) -115,C(44)-C(41)-C(42) -123,C(60)-C(59)-C(42) -120,C(62)-C(59)-C(42) -119,O(168)-C(46)-C(43) -119,C(63)-C(46)-C(43) -116,C(45)-C(46)-C(43) -120,C(46)-C(43)-C(44) -123,O(168)-C(46)-C(45) -56,C(63)-C(46)-C(45) -122,C(47)-C(48)-C(45) -113,C(65)-C(48)-C(45) -114,O(173)-C(48)-C(45) -108,C(45)-O(168)-C(46) -67,O(189)-C(63)-C(46) -112,C(64)-C(63)-C(46) -119,C(48)-C(45)-C(46) -122,C(66)-C(63)-C(46) -119,C(21)-C(26)-C(47) -123,C(49)-C(50)-C(47) -122,C(65)-C(48)-C(47) -112,C(67)-C(50)-C(47) -121,C(26)-C(47)-C(48) -121,C(50)-C(47)-C(48) -120,O(172)-C(65)-C(48) -113,C(66)-C(65)-C(48) -123,C(68)-C(65)-C(48) -118,C(25)-C(30)-C(49) -118,C(51)-C(52)-C(49) -113,C(69)-C(52)-C(49) -111,O(176)-C(52)-C(49) -108,C(30)-C(49)-C(50) -119,C(52)-C(49)-C(50) -121,C(54)-C(55)-C(51) -118,C(69)-C(52)-C(51) -110,C(71)-C(55)-C(51) -121,C(55)-C(51)-C(52) -118,C(70)-C(69)-C(52) -110,C(72)-C(69)-C(52) -124,C(34)-C(33)-C(53) -120,C(33)-C(53)-C(54) -120,C(53)-C(54)-C(55) -121,C(72)-C(71)-C(55) -111,C(91)-C(71)-C(55) -109,C(35)-C(40)-C(56) -110,O(155)-C(40)-C(56) -105,C(77)-C(60)-C(56) -121,C(40)-C(56)-C(57) -116,C(60)-C(56)-C(57) -123,C(76)-C(58)-C(57) -119,C(74)-C(73)-C(57) -121,C(78)-C(73)-C(57) -114,C(56)-C(57)-C(58) -123,C(75)-C(76)-C(58) -125,C(73)-C(57)-C(58) -119,C(41)-C(42)-C(59) -118,C(56)-C(60)-C(59) -123,C(77)-C(60)-C(59) -115,C(61)-C(62)-C(59) -120,C(79)-C(62)-C(59) -119,C(40)-C(56)-C(60) -121,O(157)-C(77)-C(60) -121,C(80)-C(77)-C(60) -118,C(62)-C(59)-C(60) -121,C(78)-C(77)-C(60) -117,C(43)-C(44)-C(61) -123,C(79)-C(62)-C(61) -120,C(44)-C(61)-C(62) -121,C(82)-C(79)-C(62) -119,C(64)-C(61)-C(62) -119,C(80)-C(79)-C(62) -120,C(64)-O(189)-C(63) -66,C(61)-C(64)-C(63) -118,O(168)-C(46)-C(63) -108,C(81)-C(64)-C(63) -122,O(189)-C(64)-C(63) -57,C(44)-C(61)-C(64) -119,O(189)-C(63)-C(64) -57,C(68)-O(172)-C(65) -67,C(63)-C(66)-C(65) -118,C(67)-C(68)-C(65) -117,C(85)-C(68)-C(65) -120,O(171)-C(66)-C(65) -104,O(172)-C(68)-C(65) -57,O(189)-C(63)-C(66) -113,C(64)-C(63)-C(66) -119,C(68)-C(65)-C(66) -117,O(172)-C(65)-C(66) -107,C(49)-C(50)-C(67) -117,C(85)-C(68)-C(67) -120,O(174)-C(70)-C(67) -117,C(50)-C(67)-C(68) -120,C(88)-C(85)-C(68) -119,O(172)-C(65)-C(68) -56,C(70)-C(67)-C(68) -120,C(86)-C(85)-C(68) -123,C(67)-C(70)-C(69) -128,O(174)-C(70)-C(69) -115,C(89)-C(72)-C(69) -125,C(50)-C(67)-C(70) -119,C(87)-O(174)-C(70) -103,C(54)-C(55)-C(71) -121,C(69)-C(72)-C(71) -116,C(89)-C(72)-C(71) -119,C(92)-C(91)-C(71) -123,O(182)-C(91)-C(71) -119,C(70)-C(69)-C(72) -126,O(188)-C(89)-C(72) -124,C(90)-C(89)-C(72) -120,C(93)-C(89)-C(72) -120,C(91)-C(71)-C(72) -114,C(56)-C(57)-C(73) -118,O(156)-C(74)-C(73) -57,C(96)-C(74)-C(73) -118,C(77)-C(78)-C(73) -119,C(94)-C(78)-C(73) -115,C(75)-C(74)-C(73) -113,O(157)-C(78)-C(73) -113,C(73)-O(156)-C(74) -66,O(158)-C(96)-C(74) -115,C(114)-C(96)-C(74) -121,C(78)-C(73)-C(74) -118,C(95)-C(96)-C(74) -118,O(156)-C(74)-C(75) -115,C(96)-C(74)-C(75) -122,C(74)-C(75)-C(76) -122,C(78)-O(157)-C(77) -65,C(79)-C(80)-C(77) -118,C(97)-C(80)-C(77) -119,C(94)-C(78)-C(77) -117,O(157)-C(77)-C(78) -57,C(80)-C(77)-C(78) -120,C(98)-C(94)-C(78) -114,C(95)-C(94)-C(78) -110,O(165)-C(94)-C(78) -103,C(81)-C(82)-C(79) -120,C(99)-C(82)-C(79) -117,C(97)-C(80)-C(79) -123,C(82)-C(79)-C(80) -121,C(98)-C(97)-C(80) -122,O(157)-C(77)-C(80) -110,C(100)-C(97)-C(80) -118,C(61)-C(64)-C(81) -115,O(189)-C(64)-C(81) -116,C(99)-C(82)-C(81) -123,C(101)-C(84)-C(81) -111,C(64)-C(81)-C(82) -121,C(100)-C(99)-C(82) -119,C(84)-C(81)-C(82) -122,C(102)-C(99)-C(82) -

120,C(85)-C(86)-C(83) -122,C(103)-C(86)-C(83) -117,C(64)-C(81)-C(84) -117,O(166)-C(101)-C(84)-114,C(102)-C(101)-C(84) -119,C(104)-C(101)-C(84) -120,C(105)-C(88)-C(85) -120,C(87)-C(88)-C(85) -123,C(88)-C(85)-C(86) -118,C(105)-C(88)-C(87) -117,C(107)-C(90)-C(87) -112,C(106)-C(105)-C(88) -116,C(108)-C(105)-C(88) -122,C(90)-O(188)-C(89) -67,C(87)-C(90)-C(89) -126,C(107)-C(90)-C(89) -113,C(92)-C(93)-C(89) -114,O(188)-C(90)-C(89) -57,C(109)-C(93)-C(89) -124,C(88)-C(87)-C(90) -126,C(108)-C(107)-C(90) -114,C(110)-C(107)-C(90) -108,O(174)-C(87)-C(90) -113,C(93)-C(89)-C(90) -115,O(188)-C(89)-C(90) -56,O(177)-C(107)-C(90) -101,O(182)-C(92)-C(91) -58,C(93)-C(92)-C(91) -122,C(91)-O(182)-C(92) -64,O(182)-C(92)-C(93) -118,O(188)-C(89)-C(93) -106,C(115)-C(98)-C(94) -118,C(111)-C(95)-C(94) -115,C(96)-C(95)-C(94) -119,O(158)-C(95)-C(94) -118,C(97)-C(98)-C(94) -121,C(112)-C(111)-C(95) -118,O(158)-C(96)-C(95) -56,C(114)-C(96)-C(95) -116,C(98)-C(94)-C(95) -113,C(116)-C(111)-C(95) -120,C(95)-O(158)-C(96) -67,C(113)-C(114)-C(96) -121,O(156)-C(74)-C(96) -115,C(111)-C(95)-C(96) -120,C(115)-C(98)-C(97) -120,C(118)-C(115)-C(98) -118,C(116)-C(115)-C(98) -121,C(97)-C(100)-C(99) -121,C(117)-C(100)-C(99) -120,C(119)-C(102)-C(99) -123,C(98)-C(97)-C(100) -121,C(104)-O(166)-C(101) -66,C(99)-C(102)-C(101) -120,C(119)-C(102)-C(101) -117,C(103)-C(104)-C(101) -123,C(121)-C(104)-C(101) -114,O(166)-C(104)-C(101) -57,C(100)-C(99)-C(102) -121,C(120)-C(119)-C(102) -113,C(104)-C(101)-C(102) -117,O(166)-C(101)-C(102) -114,O(169)-C(119)-C(102) -109,C(85)-C(86)-C(103) -119,C(121)-C(104)-C(103) -119,C(123)-C(106)-C(103) -124,C(86)-C(103)-C(104) -119,C(124)-C(121)-C(104) -113,O(166)-C(101)-C(104) -57,C(106)-C(103)-C(104) -118,O(170)-C(121)-C(104) -103,C(103)-C(106)-C(105) -119,C(123)-C(106)-C(105) -117,C(86)-C(103)-C(106) -123,C(126)-C(123)-C(106) -120,C(124)-C(123)-C(106) -120,C(105)-C(108)-C(107) -119,C(109)-C(110)-C(107) -111,C(127)-C(110)-C(107) -109,C(125)-C(108)-C(107) -119,O(187)-C(110)-C(107) -104,C(106)-C(105)-C(108) -122,C(110)-C(107)-C(108) -111,C(126)-C(125)-C(108) -116,C(92)-C(93)-C(109) -121,C(127)-C(110)-C(109) -111,C(93)-C(109)-C(110) -121 ,C(128)-C(127)-C(110) -111,C(131)-C(127)-C(110) -107,C(129)-C(109)-C(110) -114,O(179)-C(127)-C(110) -106,C(134)-C(112)-C(111) -119,C(113)-C(112)-C(111) -121,C(133)-C(134)-C(112) -120,C(134)-C(112)-C(113) -121,C(112)-C(113)-C(114) -124,O(158)-C(96)-C(114) -114,C(117)-C(118)-C(115) -122,C(135)-C(118)-C(115) -120,C(111)-C(116)-C(115) -121,C(132)-C(116)-C(115) -121,C(112)-C(111)-C(116) -122,C(118)-C(115)-C(116) -121,C(97)-C(100)-C(117) -119,C(135)-C(118)-C(117) -118,C(100)-C(117)-C(118) -119,O(159)-C(135)-C(118) -116,C(136)-C(135)-C(118) -119,C(138)-C(135)-C(118) -114,C(120)-C(117)-C(118) -120,C(117)-C(120)-C(119) -117,C(137)-C(120)-C(119) -122,C(100)-C(117)-C(120) -121,C(123)-C(124)-C(121) -121,C(141)-C(124)-C(121) -119,C(142)-C(139)-C(122) -116,C(140)-C(139)-C(122) -112,O(163)-C(139)-C(122) -120,C(143)-C(126)-C(123) -118,C(125)-C(126)-C(123) -122,C(126)-C(123)-C(124) -120,C(142)-C(141)-C(124) -121,C(105)-C(108)-C(125) -122,C(143)-C(126)-C(125) -120,C(145)-C(128)-C(125) -121,C(144)-C(143)-C(126) -121,C(146)-C(143)-C(126) -120,C(125)-C(128)-C(127) -121,C(145)-C(128)-C(127) -117,C(130)-C(131)-C(127) -108,C(147)-C(131)-C(127) -112,O(186)-C(131)-C(127) -108,C(108)-C(125)-C(128) -122,C(126)-C(125)-C(128) -122,O(181)-C(145)-C(128) -116,C(146)-C(145)-C(128) -116,C(148)-C(145)-C(128) -120,C(131)-C(127)-C(128) -114,C(93)-C(109)-C(129) -125,C(109)-C(129)-C(130) -127,C(147)-C(131)-C(130) -113,C(129)-C(130)-C(131) -121,O(180)-C(147)-C(131) -121,C(185)-C(147)-C(131) -113,C(183)-C(130)-C(131) -118,C(148)-C(147)-C(131) -

115,C(111)-C(116)-C(132) -118,C(116)-C(132)-C(133) -120,C(136)-C(132)-C(133) -119,C(132)-C(133)-C(134) -121,C(136)-O(159)-C(135) -65,C(132)-C(136)-C(135) -119,C(137)-C(138)-C(135) -111,O(159)-C(136)-C(135) -58,O(154)-C(138)-C(135) -106,C(116)-C(132)-C(136) -120,C(138)-C(135)-C(136) -121,O(159)-C(135)-C(136) -57,C(117)-C(120)-C(137) -120,C(120)-C(137)-C(138) -121,O(159)-C(135)-C(138) -117,C(140)-C(137)-C(138) -118,O(163)-C(142)-C(139) -57,C(137)-C(140)-C(139) -106,O(162)-C(140)-C(139) -111,C(141)-C(142)-C(139) -120,C(120)-C(137)-C(140) -120,C(142)-C(139)-C(140) -126,C(123)-C(124)-C(141) -120,O(163)-C(142)-C(141) -116,C(139)-O(163)-C(142) -66,C(141)-C(144)-C(143) -121,C(124)-C(141)-C(144) -119,C(142)-C(141)-C(144) -120,C(146)-O(181)-C(145) -66,C(143)-C(146)-C(145) -119,C(147)-C(148)-C(145) -122,O(181)-C(146)-C(145) -58,O(180)-C(148)-C(145) -115,C(144)-C(143)-C(146) -119,C(148)-C(145)-C(146) -121,O(181)-C(145)-C(146) -57,C(148)-O(180)-C(147) -65,C(184)-C(185)-C(147) -121,O(180)-C(147)-C(148) -57,C(185)-C(147)-C(148) -126,O(181)-C(145)-C(148) -111,C(8)-C(7)-O(149) -111,C(28)-C(31)-O(150) -117,C(32)-C(31)-O(150) -58,C(43)-C(18)-O(151) -110,C(21)-C(22)-O(152) -109,C(45)-C(22)-O(152) -108,C(139)-C(122)-O(153) -100,C(137)-C(138)-O(154) -113,C(35)-C(40)-O(155) -110,C(57)-C(73)-O(156) -117,C(74)-C(73)-O(156) -57,C(78)-C(73)-O(156) -118,C(77)-C(78)-O(157) -58,C(94)-C(78)-O(157) -123,C(111)-C(95)-O(158) -116,C(96)-C(95)-O(158) -57,C(132)-C(136)-O(159) -119,C(14)-C(13)-O(160) -109,C(11)-C(12)-O(161) -105,C(13)-C(12)-O(161) -118,C(137)-C(140)-O(162) -113,C(142)-C(139)-O(163) -57,C(140)-C(139)-O(163) -116,C(86)-C(83)-O(164) -102,C(98)-C(94)-O(165) -108,C(95)-C(94)-O(165) -108,C(103)-C(104)-O(166) -112,C(121)-C(104)-O(166) -118,C(81)-C(84)-O(167) -112,C(101)-C(84)-O(167) -101,C(46)-C(45)-O(168) -57,C(48)-C(45)-O(168) -115,C(120)-C(119)-O(169) -105,C(124)-C(121)-O(170) -110,C(63)-C(66)-O(171) -109,C(67)-C(68)-O(172) -107,C(85)-C(68)-O(172) -118,C(47)-C(48)-O(173) -100,C(65)-C(48)-O(173) -109,C(88)-C(87)-O(174) -121,C(130)-C(183)-O(175) -108,C(184)-C(183)-O(175) -110,C(51)-C(52)-O(176) -103,C(69)-C(52)-O(176) -111,C(108)-C(107)-O(177) -109,C(110)-C(107)-O(177) -113,C(55)-C(71)-O(178) -111,C(72)-C(71)-O(178) -109,C(91)-C(71)-O(178) -103,C(128)-C(127)-O(179) -110,C(131)-C(127)-O(179) -108,C(147)-C(148)-O(180) -57,C(185)-C(147)-O(180) -114,C(143)-C(146)-O(181) -114,C(92)-C(91)-O(182) -58,C(129)-C(130)-C(183) -121,C(130)-C(183)-C(184) -115,C(183)-C(184)-C(185) -124,C(130)-C(131)-O(186) -111,C(147)-C(131)-O(186) -104,C(109)-C(110)-O(187) -112,C(127)-C(110)-O(187) -110,C(87)-C(90)-O(188) -112,C(107)-C(90)-O(188) -128,C(61)-C(64)-O(189) -115,C(10)-C(9)-O(190) -116,C(14)-C(9)-O(190) -57,C(2)-C(1)-H(191) -120,C(1)-C(6)-H(192) -120,C(8)-C(7)-H(193) -106,C(8)-C(11)-H(194) -122,C(12)-C(15)-H(195) -117,C(16)-C(19)-H(196) -119,C(20)-C(23)-H(197) -119,C(24)-C(27)-H(198) -119,C(28)-C(31)-H(199) -115,C(32)-C(31)-H(199) -121,O(150)-C(32)-H(200) -115,C(33)-C(32)-H(200) -115,C(36)-C(37)-H(201) -120,C(37)-C(38)-H(202) -120,C(33)-C(53)-H(203) -121,C(53)-C(54)-H(204) -117,C(74)-C(75)-H(205) -118,C(75)-C(76)-H(206) -117,C(92)-C(91)-H(207) -118,O(182)-C(92)-H(208) -115,C(112)-C(113)-H(209) -117,C(113)-C(114)-H(210) -121,C(109)-C(129)-H(211) -115,C(132)-C(133)-H(212) -120,C(133)-C(134)-H(213) -119,C(132)-C(136)-H(214) -114,C(137)-C(138)-H(215) -109,C(137)-C(140)-H(216) -108,O(163)-C(142)-H(217) -116,C(141)-C(144)-H(218) -120,C(143)-C(146)-H(219) -116,C(147)-C(148)-H(220) -120,C(7)-O(149)-H(221) -112,C(18)-O(151)-H(222) -113,C(22)-O(152)-H(223) -113,C(122)-O(153)-H(224) -117,C(138)-O(154)-H(225) -112,C(40)-O(155)-H(226) -113,C(13)-O(160)-H(227) -

113,C(12)-O(161)-H(228) -114,C(140)-O(162)-H(229) -111,C(83)-O(164)-H(230) -114,C(94)-O(165)-H(231) -113,C(84)-O(167)-H(232) -115,C(119)-O(169)-H(233) -113,C(121)-O(170)-H(234) -115,C(66)-O(171)-H(235) -114,C(48)-O(173)-H(236) -114,C(183)-O(175)-H(237) -112,C(52)-O(176)-H(238) -113,C(107)-O(177)-H(239) -114,C(71)-O(178)-H(240) -114,C(127)-O(179)-H(241) -115,C(130)-C(183)-H(242) -107,C(183)-C(184)-H(243) -116,C(184)-C(185)-H(244) -122,C(131)-O(186)-H(245) -113,C(110)-O(187)-H(246) -114.

Заряды на атомах: C(1)-(-0.039),C(2)-(-0.105),C(3) –(+0.007),C(4) –(-0.014),C(5) –(-0.033),C(6) –(-0.038),C(7) –(+0.224),C(8) –(-0.096),C(9) –(+0.09),C(10) –(-0.057),C(11) –(-0.065),C(12) –(+0.138),C(13) –(+0.105),C(14) –(+0.065),C(15) –(+0.292),C(16) –(-0.104),C(17) –(+0.245),C(18) –(+0.22),C(19) –(-0.172),C(20) –(+0.003),C(21) –(-0.278),C(22) –(+0.246),C(23) –(+0.201),C(24) –(-0.158),C(25) –(-0.005),C(26) –(+0.073),C(27) –(+0.151),C(28) –(-0.165),C(29) –(+0.215),C(30) –(-0.054),C(31) –(+0.077),C(32) –(+0.076),C(33) –(-0.014),C(34) –(-0.072),C(35) –(-0.095),C(36) –(+0.028),C(37) –(-0.045),C(38) –(-0.037),C(39) –(-0.023),C(40) –(+0.248),C(41) –(-0.188),C(42) –(+0.089),C(43) –(-0.49),C(44) –(+0.221),C(45) –(-0.064),C(46) –(+0.239),C(47) –(+0.01),C(48) –(+0.234),C(49) –(-0.074),C(50) –(+0.018),C(51) –(+0.018),C(52) –(+0.238),C(53) –(-0.042),C(54) –(+0.032),C(55) –(-0.089),C(56) –(-0.077),C(57) –(+0.032),C(58) –(-0.037),C(59) –(-0.142),C(60) –(+0.064),C(61) –(-0.177),C(62) –(+0.084),C(63) –(+0.009),C(64) –(+0.17),C(65) –(-0.021),C(66) –(+0.195),C(67) –(-0.053),C(68) –(+0.14),C(69) –(-0.083),C(70) –(+0.097),C(71) –(+0.222),C(72) –(-0.014),C(73) –(+0.082),C(74) –(+0.079),C(75) –(-0.076),C(76) –(-0.01),C(77) –(+0.096),C(78) –(+0.05),C(79) –(+0.011),C(80) –(-0.022),C(81) –(-0.114),C(82) –(+0.034),C(83) –(+0.161),C(84) –(+0.189),C(85) –(+0.001),C(86) –(-0.007),C(87) –(+0.093),C(88) –(-0.022),C(89) –(+0.119),C(90) –(+0.056),C(91) –(+0.043),C(92) –(+0.083),C(93) –(-0.033),C(94) –(+0.216),C(95) –(+0.024),C(96) –(+0.091),C(97) –(+0.041),C(98) –(-0.072),C(99) –(+0.03),C(100) –(-0.02),C(101) –(+0.078),C(102) –(-0.09),C(103) –(+0.004),C(104) –(+0.04),C(105) –(+0.03),C(106) –(-0.005),C(107) –(+0.185),C(108) –(-0.081),C(109) –(-0.035),C(110) –(+0.147),C(111) –(-0.038),C(112) –(-0.013),C(113) –(-0.034),C(114) –(-0.051),C(115) –(+0.02),C(116) –(+0.007),C(117) –(+0.012),C(118) –(-0.022),C(119) –(+0.205),C(120) –(-0.048),C(121) –(+0.167),C(122) –(+0.161),C(123) –(+0.01),C(124) –(-0.051),C(125) –(+0.055),C(126) –(+0.009),C(127) –(+0.169),C(128) –(-0.09),C(129) –(+0.031),C(130) –(-0.134),C(131) –(+0.164),C(132) –(-0.055),C(133) –(-0.026),C(134) –(-0.034),C(135) –(+0.042),C(136) –(+0.103),C(137) –(-0.11),C(138) –(+0.221),C(139) –(+0.003),C(140) –(+0.207),C(141) –(-0.048),C(142) –(+0.104),C(143) –(-0.063),C(144) –(+0.003),C(145) –(+0.059),C(146) –(+0.107),C(147) –(+0.027),C(148) –(+0.092),O(149) –(-0.322),O(150) –(-0.245),O(151) –(-0.331),O(152) –(-0.317),O(153) –(-0.328),O(154) –(-0.32),O(155) –(-0.304),O(156) –(-0.196),O(157) –(-0.197),O(158) –(-0.20),O(159) –(-0.243),O(160) –(-0.34),O(161) –(-0.302),O(162) –(-0.325),O(163) –(-0.25),O(164) –(-0.328),O(165) –(-0.315),O(166) –(-0.214),O(167) –(-0.282),O(168) –(-0.28),O(169) –(-0.323),O(170) –(-0.319),O(171) –(-0.298),O(172) –(-0.222),O(173) –(-0.33),O(174) –(-0.181),O(175) –(-0.324),O(176) –(-0.319),O(177) –(-0.315),O(178) –(-0.311),O(179) –(-0.324),O(180) –(-0.248),O(181) –(-0.251),O(182) –(-0.262),C(183) –(+0.207),C(184) –(-0.106),C(185) –(-0.05),O(186) –(-0.308),O(187) –(-0.296),O(188) –(-0.20),O(189) –(-0.244),O(190) –(-0.237),H(191) –(+0.068),H(192) –(+0.062),H(193) –(+0.049),H(194) –(+0.076),H(195) –(+0.081),H(196) –

(+0.061),H(197) –(+0.066),H(198) –(+0.072),H(199) –(+0.072),H(200) –(+0.077),H(201) – (+0.061),H(202) –(+0.062),H(203) –(+0.078),H(204) –(+0.078),H(205) –(+0.066),H(206) – (+0.055),H(207) –(+0.081),H(208) –(+0.069),H(209) –(+0.062),H(210) –(+0.074),H(211) – (+0.064),H(212) –(+0.066),H(213) –(+0.066),H(214) –(+0.067),H(215) –(+0.016),H(216) – (+0.042),H(217) –(+0.071),H(218) –(+0.068),H(219) –(+0.07),H(220) –(+0.071),H(221) – (+0.184),H(222) –(+0.221),H(223) –(+0.197),**H(224)** –(**+0.225**),H(225) –(+0.201),H(226) – (+0.176),H(227) –(+0.217),H(228) –(+0.212),H(229) –(+0.192),H(230) –(+0.198),H(231) – (+0.191),H(232) –(+0.204),H(233) –(+0.202),H(234) –(+0.204),H(235) –(+0.202),H(236) – (+0.208),H(237) –(+0.186),H(238) –(+0.204),H(239) –(+0.197),H(240) –(+0.204),H(241) – (+0.205),H(242) –(+0.015),H(243) –(+0.066),H(244) –(+0.073),H(245) –(+0.192),H(246) – (+0.198),(см.рис.1).

Используя формулу полученную авторами для MNDO — pKa=42.11-147.18q_{max}^{H+}[4] (q_{max}^{H+} = +0,225 см. табл.1), находим значение pKa=9.

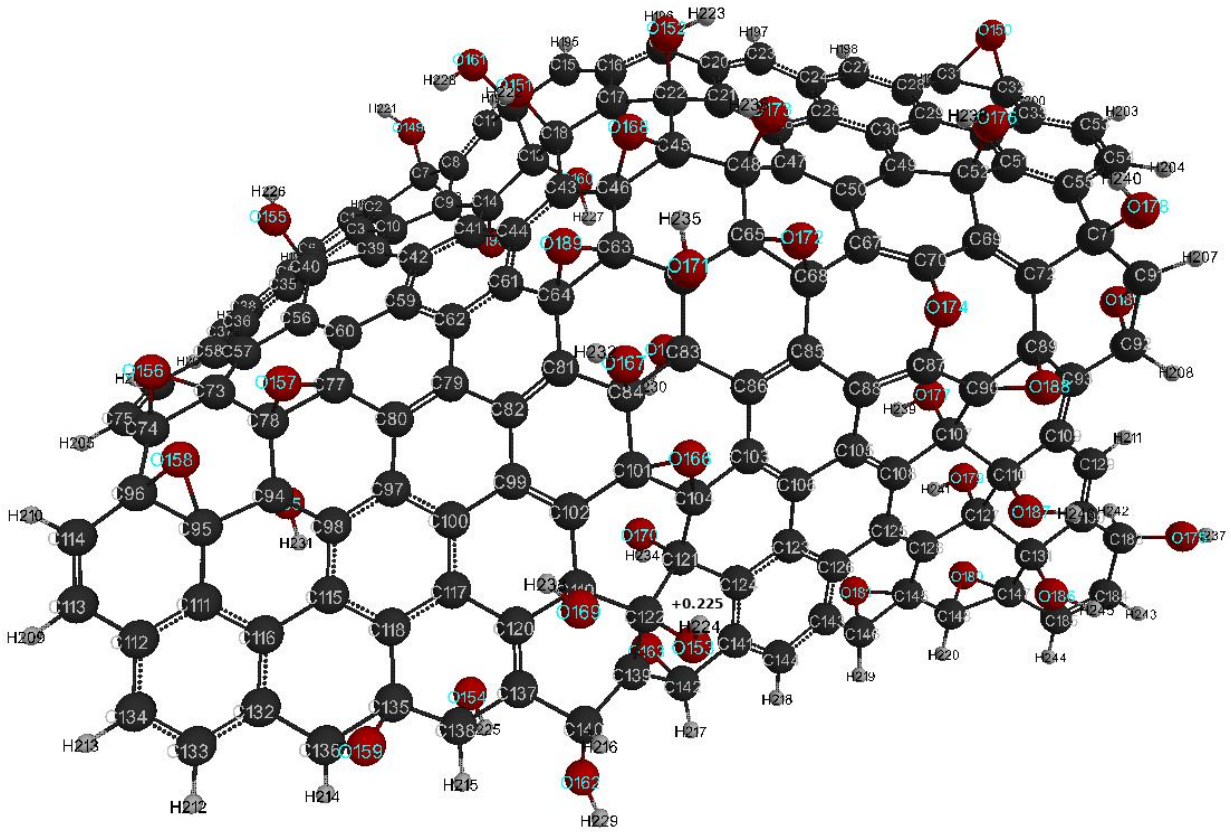

Рис.1. Геометрическое и электронное строение молекулы оксида графена рамках структуры Лерфа — Клиновского

Таблица 1

Квантово-химические параметры(E_0, E_{el}, q_{max}^{H+}) и (pKa) исследуемого оксида графена в рамках структуры Лерфа — Клиновского

Оксид графена	E_0 кДж/моль	E_{el} кДж/моль	q_{max}^{H+}	pKa
Структура Лерфа — Клиновского	-3145627	-71212278	+0.225	9

Таким образом, получена оптимизированная атомно-молекулярная структура изучаемого оксид графена в рамках структуры Лерфа — Клиновского, исследуемая методом MNDO. Рассчитаны квантово-химические параметры (E_0 , E_{el} ,q_{max}^{H+}), дипольные моменты; распределение электронной плотности на атомах, которая находится в полном соответствии с законом сохранения заряда и др. Доказано, что исследуемый оксид графена относится к классу средних бренстедовских кислот (pKa=9).

Список литературы

1. Оксид графита [Электронный ресурс] – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org/wiki/Оксид_графита

2. http://www.nanometer.ru/2010/11/22/12904497319765_226493.html.

3. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html

4. M.W.Schmidt, K.K.Baldridge, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.H.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.J.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery. “General Atomic and Molecular Electronic Structure System”. Journal of Computational Chemistry, Vol. 14, 1347-1363(1993). Doi:10.1002/jcc.540141112.

5. B. M. Bode, M. S. Gordon. “MacMolPlt: A graphical user interface for GAMESS”. Journal of Molecular Graphics and Modelling, Vol. 16, No. 3, 1998, p. 133-138.

6. V.A. Babkin, Yu.A. Sangalov, K.S. Minsker, et al. Theoretical estimation of acidic strength of fluorine hydrogen – boron fluoride complexes. Intern. J. Polymeric. Mater, 2000, Vol. 47, pp. 513-518.

7. V.A. Babkin, Yu.A. Sangalov, K.S. Minsker, et al. Theoretical estimation of acidic strength of fluorine hydrogen – boron fluoride complexes. Intern. J. Polymeric. Mater, 2000, Vol. 47, pp. 513-518.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ ОКСИД ГРАФЕНА В РАМКАХ МОДЕЛИ НАКАДЗИМА-МАЦУО МЕТОДОМ MNDO

***Бабкин В.А., *Андреев Д.С, *Чепурнов С.В., *Болдырев Р.О., **Лебедев Н.Г., ***Белоусов А.С., ***Гулюкин М.Н., ***Игнатов А.Н., ***Храмогин Д.А.**

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

**Волгоградский государственный университет

*** Лыткаринский завод оптического стекла

Аннотация

В настоящей работе выполнен квантово-химический расчёт молекулы оксида графена методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Установлено, что изучаемая молекула оксид графена относится к классу средних бренстедовских кислот (9 ≤pKa≤14).

Summary

In this paper, a quantum chemical calculation of the graphene oxide molecule is performed using the MNDO method. The optimized geometric and electronic structure of this compound is obtained. It is established that the studied graphene oxide molecule belongs to the class of medium Brönsted acids (9 ≤pKa≤14).

Ключевые слова: *квантово-химический расчет, метод MNDO, оксид графена, кислотная сила, pKa, универсальный показатель кислотности.*

Keywords*: quantum-chemical calculation, MNDO, graphene oxide, acid strength, pKa, universal acidity index.*

Несмотря на то, что ещё в 19-20 веках оксиды графенов были синтезированы, и были предложены различные модели (Гоффмана, Накадзимы-Мацуо, Лерфа-Клиновского и др. [1,2]), квантово-химический расчёт этих моделей до сих пор не выполнялся. В связи с этим, целью настоящей работы является квантово-химический расчёт оксида графена в рамках модели Накадзима-Мацуо методом MNDO по методике и с использованием программ [3-5], аналогично [6] с оптимизации геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Общий заряд изучаемой молекулярной системы в основном состоянии был равен 0, а мультиплетность 1, так как в основном состоянии молекул все электроны спарены, и суммарный спин равен 0. Поэтому, M=2S+1=1.

Результаты расчетов

Геометрическое и электронное строение модели оксида графена в рамках модели Накадзима-Мацуо после оптимизации его структуры показано на рис.1 . Оптимизированные длины связей между атомами углерода в кольце находится в диапазоне 1.54-1.62 (в ангстремах), C-H -1.11-1.13, C-O-1.39-1.42, H-O-0.94-0.95. Оптимизированные значения валенных углов (в градусах) получены соответственно следующие: C(1)-C(2)-C(3)- 104,C(16)-C(2)-C(3)-111,C(31)-C(2)-C(3) -109,C(5)-C(4)-C(3) -112,C(14)-C(13)-C(3) -111,C(40)-C(13)-C(3) -106,C(2)-C(3)-C(4) -113,C(7)-C(5)-C(4) -106,C(6)-C(5)-C(4) -107,C(13)-C(3)-C(4) -112,O(64)-C(5)-C(4) -117,C(36)-C(7)-C(5) -

109,C(1)-C(6)-C(5) -109,C(33)-C(6)-C(5) -111,C(8)-C(7)-C(5) -115,C(2)-C(1)-C(6) -111,C(7)-C(5)-C(6) -114,C(34)-C(33)-C(6) -110,C(35)-C(36)-C(7) -110,C(37)-C(36)-C(7) -110,C(36)-C(7)-C(8) -112,C(7)-C(8)-C(9) -116,O(57)-C(8)-C(9) -111,C(8)-C(9)-C(10) -116,C(9)-C(10)-C(11) -111,O(58)-C(10)-C(11) -106,C(10)-C(11)-C(12) -113,C(2)-C(3)-C(13) -112,C(15)-C(14)-C(13) -111,C(19)-C(14)-C(13) -109,C(39)-C(40)-C(13) -110,C(41)-C(40)-C(13) -110,O(60)-C(14)-C(13) -110,C(45)-C(40)-C(13) -111,C(22)-C(15)-C(14) -107,C(16)-C(15)-C(14) -108,C(18)-C(19)-C(14) -108,C(20)-C(19)-C(14) -110,C(46)-C(19)-C(14) -108,C(40)-C(13)-C(14) -107,C(42)-C(15)-C(14) -111,C(21)-C(22)-C(15) -113,C(2)-C(16)-C(15) -110,C(19)-C(14)-C(15) -111,O(63)-C(16)-C(15) -116,C(1)-C(2)-C(16) -111,C(31)-C(2)-C(16) -109,C(22)-C(15)-C(16) -112,C(11)-C(12)-C(17) -112,O(59)-C(12)-C(17) -105,C(12)-C(17)-C(18) -113,C(20)-C(19)-C(18) -107,C(46)-C(19)-C(18) -116,C(17)-C(18)-C(19) -115,C(25)-C(20)-C(19) -110,C(21)-C(20)-C(19) -110,C(45)-C(46)-C(19) -110,C(47)-C(46)-C(19) -110,C(51)-C(46)-C(19) -110,C(23)-C(18)-C(19) -117,O(61)-C(20)-C(19) -111,C(24)-C(25)-C(20) -111,C(28)-C(21)-C(20) -106,C(46)-C(19)-C(20) -107,C(22)-C(21)-C(20) -108,C(26)-C(25)-C(20) -110,C(52)-C(25)-C(20) -107,C(27)-C(28)-C(21) -108,C(25)-C(20)-C(21) -111,O(62)-C(28)-C(21) -118,C(28)-C(21)-C(22) -111,C(17)-C(18)-C(23) -113,C(18)-C(23)-C(24) -117,C(23)-C(24)-C(25) -119,C(53)-C(52)-C(25) -110,C(24)-C(25)-C(26) -109,C(52)-C(25)-C(26) -108,C(25)-C(26)-C(27) -112,C(26)-C(27)-C(28) -114,C(54)-C(27)-C(28) -108,C(44)-C(30)-C(29) -111,O(69)-C(30)-C(29) -105,C(43)-C(44)-C(30) -115,C(1)-C(2)-C(31) -112,C(33)-C(32)-C(31) -111,C(42)-C(41)-C(31) -109,C(2)-C(31)-C(32) -105,C(6)-C(33)-C(32) -106,C(34)-C(33)-C(32) -113,C(41)-C(31)-C(32) -111,C(35)-C(33)-C(32) -111,C(1)-C(6)-C(33) -112,C(29)-C(34)-C(33) -116,O(68)-C(34)-C(33) -114,C(30)-C(29)-C(34) -115,C(6)-C(33)-C(35) -107,C(34)-C(33)-C(35) -110,C(33)-C(35)-C(36) -112,C(38)-C(37)-C(36) -108,C(35)-C(36)-C(37) -111,C(32)-C(38)-C(37) -106,C(39)-C(38)-C(37) -111,C(31)-C(32)-C(38) -113,C(33)-C(32)-C(38) -112,C(32)-C(38)-C(39) -111,C(41)-C(40)-C(39) -107,C(38)-C(39)-C(40) -111,C(31)-C(41)-C(40) -112,C(42)-C(41)-C(40) -111,O(66)-C(39)-C(40) -116,O(70)-C(41)-C(40) -102,C(2)-C(31)-C(41) -106,C(15)-C(42)-C(41) -107,C(43)-C(42)-C(41) -109,C(47)-C(42)-C(41) -110,C(22)-C(15)-C(42) -110,C(16)-C(15)-C(42) -110,C(15)-C(42)-C(43) -115,C(47)-C(42)-C(43) -108,C(42)-C(43)-C(44) -117,C(50)-C(43)-C(44) -113,C(39)-C(40)-C(45) -112,C(41)-C(40)-C(45) -107,C(47)-C(46)-C(45) -108,C(51)-C(46)-C(45) -111,C(40)-C(45)-C(46) -113,C(42)-C(47)-C(46) -110,C(52)-C(51)-C(46) -109,C(48)-C(47)-C(46) -112,O(71)-C(47)-C(46) -101,O(67)-C(51)-C(46) -119,C(15)-C(42)-C(47) -108,C(51)-C(46)-C(47) -108,C(53)-C(48)-C(47) -111,C(42)-C(47)-C(48) -110,C(54)-C(53)-C(48) -106,O(71)-C(47)-C(48) -111,C(52)-C(53)-C(48) -108,O(73)-C(53)-C(48) -117,C(55)-C(56)-C(49) -115,C(43)-C(50)-C(49) -114,C(42)-C(43)-C(50) -116,C(56)-C(49)-C(50) -112,C(25)-C(52)-C(51) -109,C(53)-C(52)-C(51) -114,C(24)-C(25)-C(52) -112,C(54)-C(53)-C(52) -114,O(73)-C(53)-C(52) -102,C(27)-C(54)-C(53) -109,C(55)-C(54)-C(53) -114,C(26)-C(27)-C(54) -109,C(27)-C(54)-C(55) -113,C(54)-C(55)-C(56) -118,C(7)-C(8)-O(57) -109,C(9)-C(10)-O(58) -106,C(11)-C(12)-O(59) -105,C(15)-C(14)-O(60) -102,C(19)-C(14)-O(60) -114,C(25)-C(20)-O(61) -109,C(21)-C(20)-O(61) -105,C(27)-C(28)-O(62) -114,C(2)-C(16)-O(63) -116,C(7)-C(5)-O(64) -111,C(6)-C(5)-O(64) -101,C(36)-C(37)-O(65) -112,C(38)-C(37)-O(65) -118,C(38)-C(39)-O(66) -116,C(52)-C(51)-O(67) -115,C(29)-C(34)-O(68) -110,C(44)-C(30)-O(69) -107,C(31)-C(41)-O(70) -110,C(42)-C(41)-O(70) -113,C(42)-C(47)-O(71) -112,C(56)-C(49)-O(72) -104,C(50)-C(49)-O(72) -106,C(54)-C(53)-O(73) -110,C(2)-C(1)-H(74) -111,C(2)-C(1)-H(75) -113,C(2)-C(3)-H(76) -105,C(1)-C(6)-H(77) -107,C(36)-C(7)-H(78) -106,C(7)-C(8)-H(79) -107,C(8)-C(9)-H(80) -109,C(8)-C(9)-H(81) -109,C(10)-C(11)-H(82) -108,C(10)-C(11)-H(83) -113,C(2)-C(16)-H(84) -108,C(12)-C(17)-H(85) -108,C(12)-C(17)-H(86) -112,C(17)-C(18)-H(87) -102,C(21)-C(22)-H(88) -111,C(21)-C(22)-H(89) -110,C(18)-C(23)-H(90) -107,C(18)-C(23)-H(91) -112,C(23)-C(24)-H(92) -107,C(23)-C(24)-H(93) -108,C(25)-C(26)-H(94) -112,C(25)-C(26)-H(95) -110,C(26)-C(27)-H(96) -107,C(27)-C(28)-H(97) -109,C(30)-

C(29)-H(98) -111,C(30)-C(29)-H(99) -109,C(31)-C(32)-H(100) -108,C(33)-C(32)-H(100) -106,C(29)-C(34)-H(101) -106,C(33)-C(35)-H(102) -110,C(33)-C(35)-H(103) -112,C(35)-C(36)-H(104) -108,C(36)-C(37)-H(105) -110,C(38)-C(37)-H(105) -108,C(38)-C(39)-H(106) -107,C(42)-C(43)-H(107) -107,C(43)-C(44)-H(108) -107,C(43)-C(44)-H(109) -113,C(40)-C(45)-H(110) -111,C(40)-C(45)-H(111) -111,C(43)-C(50)-H(112) -107,C(43)-C(50)-H(113) -113,C(52)-C(51)-H(114) -107,C(25)-C(52)-H(115) -108,C(53)-C(52)-H(115) -108,C(27)-C(54)-H(116) -107,C(54)-C(55)-H(117) -109,C(54)-C(55)-H(118) -108,C(55)-C(56)-H(119) -107,C(55)-C(56)-H(120) -112,C(8)-O(57)-H(121) -112,C(10)-O(58)-H(122) -113,C(12)-O(59)-H(123) -113,C(14)-O(60)-H(124) -118,C(20)-O(61)-H(125) -115,C(28)-O(62)-H(126) -116,C(16)-O(63)-H(127) -116,C(5)-O(64)-H(128) -116,C(37)-O(65)-H(129) -115,C(39)-O(66)-H(130) -117,C(51)-O(67)-H(131) -117,C(34)-O(68)-H(132) -114,C(30)-O(69)-H(133) -113,C(41)-O(70)-H(134) -117,C(47)-O(71)-H(135) -118,C(49)-O(72)-H(136) -113,C(53)-O(73)-H(137) -115.

Заряды на атомах: C(1) –(+0.015),C(2) –(-0.073),C(3) –(+0.004),C(4) –(-0.020),C(5) –(+0.146),C(6) –(-0.013),C(7) –(-0.049),C(8) –(+0.139),C(9) –(-0.050),C(10) –(+0.126),C(11) –(-0.038),C(12) –(+0.122),C(13) –(-0.028),C(14) –(+0.156),C(15) –(-0.054),C(16) –(+0.182),C(17) –(-0.013),C(18) –(-0.020),C(19) –(-0.063),C(20) –(+0.134),C(21) –(-0.049),C(22) –(+0.027),C(23) –(-0.004),C(24) –(+0.007),C(25) –(-0.092),C(26) –(+0.019),C(27) –(-0.068),C(28) –(+0.160),C(29) –(-0.052),C(30) –(+0.111),C(31) –(-0.026),C(32) –(+0.006),C(33) –(-0.090),C(34) –(+0.154),C(35) –(+0.018),C(36) –(-0.075),C(37) –(+0.149),C(38) –(-0.094),C(39) –(+0.180),C(40) –(-0.056),C(41) –(+0.150),C(42) –(-0.070),C(43) –(-0.017),C(44) –(-0.014),C(45) –(+0.031),C(46) –(-0.050),C(47) –(+0.154),C(48) –(-0.050),C(49) –(+0.110),C(50) –(-0.013),C(51) –(+0.184),C(52) –(-0.032),C(53) –(+0.143),C(54) –(-0.056),C(55) –(+0.002),C(56) –(-0.025),O(57) –(-0.330),O(58) –(-0.314),O(59) –(-0.325),O(60) –(-0.324),O(61) –(-0.327),O(62) –(-0.308),O(63) –(-0.316),O(64) –(-0.314),O(65) –(-0.306),O(66) –(-0.308),O(67) –(-0.316),O(68) –(-0.324),O(69) –(-0.346),O(70) –(-0.329),O(71) –(-0.324),O(72) –(-0.347),O(73) –(-0.312),H(74) –(+0.041),H(75) –(+0.007),H(76) –(+0.064),H(77) –(+0.033),H(78) –(+0.040),H(79) –(0.000),H(80) –(+0.008),H(81) –(+0.023),H(82) –(-0.005),H(83) –(+0.032),H(84) –(+0.014),H(85) –(-0.003),H(86) –(+0.030),H(87) –(-0.003),H(88) –(+0.007),H(89) –(+0.060),H(90) –(0.000),H(91) –(+0.022),H(92) –(-0.002),H(93) –(+0.019),H(94) –(+0.006),H(95) –(+0.014),H(96) –(+0.032),H(97) –(+0.024),H(98) –(+0.029),H(99) –(+0.015),H(100) –(+0.024),H(101) –(+0.035),H(102) –(+0.020),H(103) –(+0.008),H(104) –(+0.032),H(105) –(+0.035),H(106) –(+0.017),H(107) –(-0.004),H(108) –(-0.003),H(109) –(+0.031),H(110) –(+0.057),H(111) –(+0.009),H(112) –(-0.003),H(113) –(+0.032),H(114) –(+0.016),H(115) –(+0.040),H(116) –(+0.027),H(117) –(+0.015),H(118) –(+0.004),H(119) –(+0.002),H(120) –(+0.025),H(121) –(+0.186),H(122) –(+0.179),H(123) –(+0.179),H(124) –(+0.204),H(125) –(+0.184),H(126) –(+0.190),H(127) –(+0.205),H(128) –(+0.204),H(129) –(+0.178),H(130) –(+0.200),**H(131)** –(**+0.211**),H(132) –(+0.184),H(133) –(+0.185),H(134) –(+0.198),H(135) –(+0.20),H(136) –(+0.187),H(137)-(+0.191), (см. рис.1).

Используя формулу, полученную авторами для MNDO — pKa=42.11 - 147.18q_{max}^{H+} [7] (q_{max}^{H+}= +0.211, см. табл. 1, находим значение pKa=11.

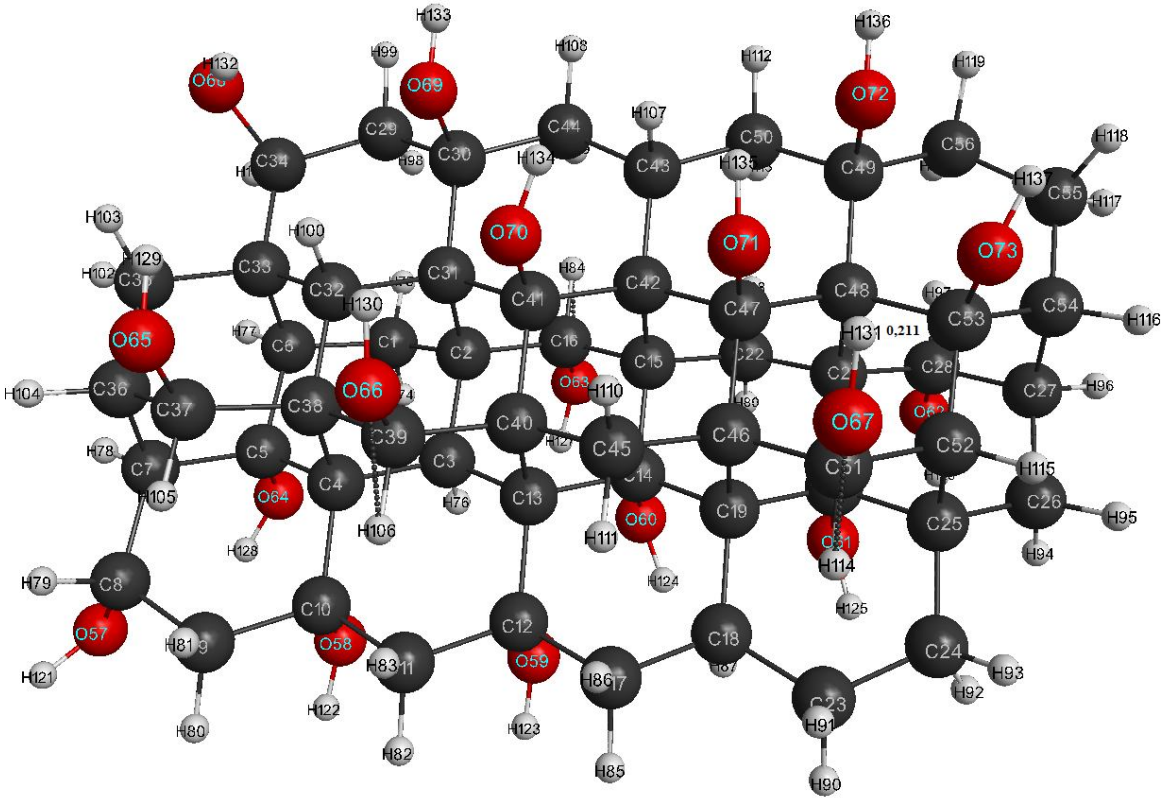

Рис.1. Геометрическое и электронное строение молекулы оксида графена в рамках модели Накадзима-Мацуо

Таблица 1

Квантово-химические параметры(E_0, E_{el} ,q_{max}^{H+}) и (pKa) исследуемого оксид графена в рамках модели Накадзима-Мацуо.

Оксид графена	E_0 кДж/моль	E_{el} кДж/моль	q_{max}^{H+}	pKa
Модель Накадзима-Мацуо	-1305352	-21782410	+0.211	11

Таким образом, получена оптимизированная атомно-молекулярная структура изучаемого оксида графена в рамках модели Накадзима-Мацуо, исследуемая методом MNDO. Рассчитаны, квантово-химические параметры (E_0 , E_{el} ,q_{max}^{H+}), дипольные моменты, распределение электронной плотности на атомах, которая находится в полном соответствии с законом сохранения заряда и др. Доказано, что исследуемый оксид графена относится к классу средних бренстедовских кислот (*9 ≤pKa≤14*).

Список литературы

1. Оксид графита [Электронный ресурс] – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org/wiki/Оксид_графита
2. http://www.nanometer.ru/2010/11/22/12904497319765_226493.html.
3. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html

4. M.W.Schmidt, K.K.Baldridge, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.H.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.J.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery. "General Atomic and Molecular Electronic Structure System". Journal of Computational Chemistry, Vol. 14, 1347-1363(1993). Doi:10.1002/jcc.540141112
5. B. M. Bode, M. S. Gordon. "MacMolPlt: A graphical user interface for GAMESS". Journal of Molecular Graphics and Modelling, Vol. 16, No. 3, 1998, p. 133-138.
6. V.A. Babkin, Yu.A. Sangalov, K.S. Minsker, et al. Theoretical estimation of acidic strength of fluorine hydrogen – boron fluoride complexes. Intern. J. Polymeric. Mater, 2000, Vol. 47, pp. 513-518.
7. V.A. Babkin, Yu.A. Sangalov, K.S. Minsker, et al. Theoretical estimation of acidic strength of fluorine hydrogen – boron fluoride complexes. Intern. J. Polymeric. Mater, 2000, Vol. 47, pp. 513-518.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ ОКСИД ГРАФЕНА В РАМКАХ МОДЕЛИ РЕССА МЕТОДОМ MNDO

***Бабкин В.А., *Чепурнов С.В., *Болдырев Р.О., *Борисов Д.А., **Янборисов В.М., ***Ценев Н.К.**

*Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

**Башкирский государственный университет

*** Уфимский государственный нефтяной технический университет

Аннотация

В настоящей работе выполнен квантово-химический расчёт молекулы оксида графена методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Установлено, что изучаемая молекула оксид графена относится к классу слабых бренстедовских кислот (pKa>14).

Summary

In this paper, a quantum chemical calculation of the graphene oxide molecule is performed using the MNDO method. The optimized geometric and electronic structure of this compound is obtained. It is established that the studied graphene oxide molecule belongs to the class of weak Brönsted acids (pKa>14).

Ключевые слова: *квантово-химический расчет, метод MNDO, оксид графена, кислотная сила, pKa, универсальный показатель кислотности.*

Key words*: quantum-chemical calculation, method MNDO, graphene oxide, acid strength, pKa, universal acidity index.*

Несмотря на то, что ещё в 19-20 веках оксиды графенов были синтезированы, и были предложены различные модели (Гоффмана, Накадзимы-Мацуо, Лерфа-Клиновского и др. [1,2]), квантово-химический расчёт этих моделей до сих пор не выполнялся. В связи с этим, целью настоящей работы является квантово-химический расчёт оксида графена в рамках модели Ресса методом MNDO по методике и с использованием программ [3-5], аналогично [6] с оптимизации геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Общий заряд изучаемой молекулярной системы в основном состоянии был равен 0, а мультиплетность 1, так как в основном состоянии молекул все электроны спарены, и суммарный спин равен 0. Поэтому, M=2S+1=1.

Результаты расчетов

Геометрическое и электронное строение модели оксида графена в рамках модели Ресса после оптимизации его структуры показано на рис.1. Оптимизированные длины связей между атомами углерода в кольце находится в диапазоне 1.35-1.61 (в ангстремах), C-H -1.09-1.13, C-O-1.41-1.46, H-O-0, 95. Оптимизированные значения валенных углов (в градусах) получены соответственно следующие: C(17)-C(16)-C(15)-80, C(16)-C(15)-C(12)-106, C(15)-C(12)-C(13)-113, C(12)-C(13)-C(18)-113, C(13)-C(18)-C(17)-117, C(18)-C(17)-C(16)-110, C(13)-C(12)-C(11)-111, C(12)-C(11)-C(8)-100, C(11)-C(8)-C(9)-104, C(8)-C(9)-C(14)-107, C(9)-C(14)-C(13)-112, C(14)-C(13)-C(12)-121, C(9)-C(8)-C(7)-108, C(8)-C(7)-C(3)-115, C(7)-C(3)-C(1)-119, C(3)-C(1)-C(10)-116, C(1)-C(10)-C(9)-110, C(10)-C(9)-C(8)-109, C(1)-C(3)-C(5)-120, C(3)-C(5)-C(6)-114, C(5)-C(6)-C(4)-111, C(6)-C(4)-C(2)-115, C(4)-C(2)-C(1)-122, C(2)-C(1)-C(3)-114, C(16)-C(15)-C(28)-119, C(15)-C(28)-C(27)-119, C(28)-C(27)-C(26)-111, C(27)-C(26)-C(11)-113, C(26)-C(11)-C(12)-115, C(11)-C(12)-C(15)-112, C(12)-C(15)-C(28)-112, C(11)-C(26)-C(25)-120, C(26)-C(25)-C(24)-124, C(25)-C(24)-C(7)-116, C(24)-C(7)-C(8)-114, C(7)-C(8)-C(11)-117, C(8)-C(11)-C(26)-113, C(7)-C(24)-C(23)-111, C(24)-C(23)-C(19)-116, C(23)-C(19)-C(5)-126, C(19)-C(5)-C(3)-110, C(5)-C(3)-C(7)-119, C(3)-C(7)-C(24)-127, C(5)-C(19)-C(20)-118, C(19)-C(20)-C(22)-121, C(20)-C(22)-C(21)-111, C(22)-C(21)-C(6)-116, C(21)-C(6)-C(5)-114, C(6)-C(5)-C(19)-112, C(4)-C(6)-C(21)-113, C(28)-C(27)-C(38)-110, C(27)-C(38)-C(37)-114, C(38)-C(37)-C(36)-112, C(37)-C(36)-C(25)-114, C(36)-C(25)-C(26)-122, C(25)-C(26)-C(27)-125, C(26)-C(27)-C(38)-110, C(25)-C(36)-C(35)-110, C(36)-C(35)-C(34)-119, C(35)-C(34)-C(23)-112, C(34)-C(23)-C(24)-114, C(23)-C(24)-C(25)-117, C(24)-C(25)-C(36)-112, C(23)-C(34)-C(33)-111, C(34)-C(33)-C(29)-118, C(33)-C(29)-C(20)-122, C(19)-C(20)-C(19)-120, C(20)-C(19)-C(23)-114, C(19)-C(23)-C(34)-111, C(20)-C(29)-C(30)-115, C(29)-C(30)-C(31)-107, C(30)-C(31)-C(32)-109, C(31)-C(32)-C(22)-81, C(32)-C(22)-C(20)-113, C(22)-C(20)-C(29)-116, C(21)-C(22)-C(32)-123, C(38)-C(37)-C(48)-122, C(37)-C(48)-C(47)-81, C(48)-C(47)-C(46)-113, C(47)-C(46)-C(35)-113, C(46)-C(35)-C(36)-118, C(35)-C(36)-C(37)-106, C(36)-C(37)-C(48)-108, C(35)-C(46)-C(45)-122, C(46)-C(45)-C(44)-117, C(45)-C(44)-C(33)-115, C(44)-C(33)-C(34)-120, C(33)-C(34)-C(35)-113, C(34)-C(35)-C(46)- 120, C(33)-C(44)-C(43)-110, C(44)-C(43)-C(39)-117, C(43)-C(39)-C(30)-114, C(39)-C(30)-C(29)-110, C(30)-C(29)-C(33)-122, C(29)-C(33)-C(44)-120, C(30)-C(39)-C(40)-109, C(39)-C(40)-C(41)-81, C(40)-C(41)-C(42)-112, C(41)-C(42)-C(31)-109, C(42)-C(31)-C(30)-110, C(31)-C(30)-C(39)-110, C(32)-C(31)-C(42)-125, C(40)-C(39)-C(43)-120, C(43)-C(44)-C(45)-113, C(45)-C(46)-C(47)-123, C(2)-C(1)-C(10)-128, C(10)-C(9)-C(14)-86, C(14)-C(13)-C(18)-123, O(49)-C(14)-C(9)-86, O(49)-C(10)-C(9)-86, O(10)-O(49)-C(14)-93, O(49)-C(10)-C(1)-129, O(49)-C(14)-C(13)-130, C(14)-C(9)-O(60)-84, O(60)-C(8)-C(9)-30, C(7)-C(8)-O(60)-104, C(11)-C(8)-O(60)-106, C(8)-C(11)-O(54)-111, C(12)-C(11)-O(54)-108, C(26)-C(11)-O(54)-108, C(12)-C(13)-O(50)-107, C(17)-C(15)-O(50)-44, C(16)-C(15)-O(50)-49, C(27)-O(56)-O(38)-108, C(28)-C(27)-O(56)-110, C(36)-C(37)-O(51)-107, C(38)-C(37)-O(51)-115, C(48)-C(37)-O(51)-87, C(47)-O(51)-C(37)-91, C(36)-C(35)-O(64)-35,

C(25)-C(36)-O(64)-106, C(37)-C(36)-O(64)-106, C(35)-C(36)-O(64)-112, C(40)-C(39)-O(52)-49, C(30)-C(39)-O(52)-105, C(40)-C(39)-O(52)-43, C(30)-C(31)-O(62)-109, C(29)-C(30)-O(62)-111, O(62)-C(30)-O(52)-133, C(22)-C(31)-O(53)-92, C(32)-C(31)-O(53)-87, C(30)-C(31)-O(53)-109, C(32)-C(22)-O(53)-87, C(20)-C(22)-O(53)-101, C(6)-C(5)-O(58)-35, C(19)-C(5)-O(58)-107, C(3)-C(5)-O(58)-107.

Заряды на атомах: C(1)-(-0.093), C(2) –(-0.033), C(3) –(-0.076), C(4) –(+0.026), C(5) –(+0.214), C(6) –(-0.022), C(7) –(-0.118), C(8) –(+0.122), C(9) –(-0.108), C(10) –(+0.146), C(11) –(+0.179), C(12) –(+0.018), C(13) –(-0.061), C(14) –(+0.179), C(15) –(+0.066), C(16) –(-0.052), C(17) –(+0.116), C(18) –(-0.088), C(19) –(-0.132), C(20) –(-0.042), C(21) –(+0.034), C(22) –(+0.102), C(23) –(+0.027), C(24) –(+0.064), C(25) –(-0.057), C(26) –(-0.081), C(27) –(+0.158), C(28) –(+0.015), C(29) –(-0.094), C(30) –(+0.132), C(31) –(+0.058), C(32) –(-0.009), C(33) –(-0.052), C(34) –(+0.064), C(35) –(-0.126), C(36) –(+0.181), C(37) –(+0.072), C(38) –(+0.01), C(39) –(+0.075), C(40) –(-0.034), C(41) –(+0.08), C(42) –(+0.017), C(43) –(+0.035), C(44) –(+0.001), C(45) –(+0.059), C(46) –(-0.095), C(47) –(+0.122), C(48) –(-0.031), O(49) –(-0.29), O(50) –(-0.273), O(51) –(-0.281), O(52) –(-0.282), O(53) –(-0.273), O(54) –(-0.301), H(55) –(+0.192), O(56) –(-0.31), H(57) –(+0.187), O(58) –(-0.319), H(59) –(+0.183), O(60) –(-0.319), **H(61) –(+0.192)**, O(62) –(-0.318), H(63) –(+0.189), O(64) –(-0.32), H(65) –(+0.188), H(66) –(+0.068), H(67) –(+0.017), H(68) –(+0.014), H(69) –(+0.038), H(70) –(+0.069), H(71) –(+0.035), H(72) –(+0.052), H(73) –(+0.024), H(74) –(+0.034), H(75) –(+0.031), H(76) –(+0.056), H(77) –(+0.069), H(78) –(+0.026), H(79) –(+0.014), H(80) –(+0.022), H(81) –(+0.038), H(82) –(+0.015), H(83) –(+0.018), H(84) –(+0.036), H(85) –(+0.032), H(86) –(+0.035), H(87) –(+0.028), H(88) –(+0.017), H(89) –(+0.045), H(90) –(+0.029), H(91) –(+0.054), H(92) –(+0.019), H(93) –(+0.032), H(94) –(+0.011), H(95) –(+0.029), H(96) –(+0.024), H(97) –(+0.015), H(98) –(+0.015), H(99) –(+0.061), H(100) –(+0.035), H(101) –(+0.038), (см. рис.1).

Используя формулу полученную авторами для MNDO — pKa=42.11 – 147.18q_{max}^{H+} [7] (q_{max}^{H+}= +0.192, см. табл. 1), находим значение pKa=14.

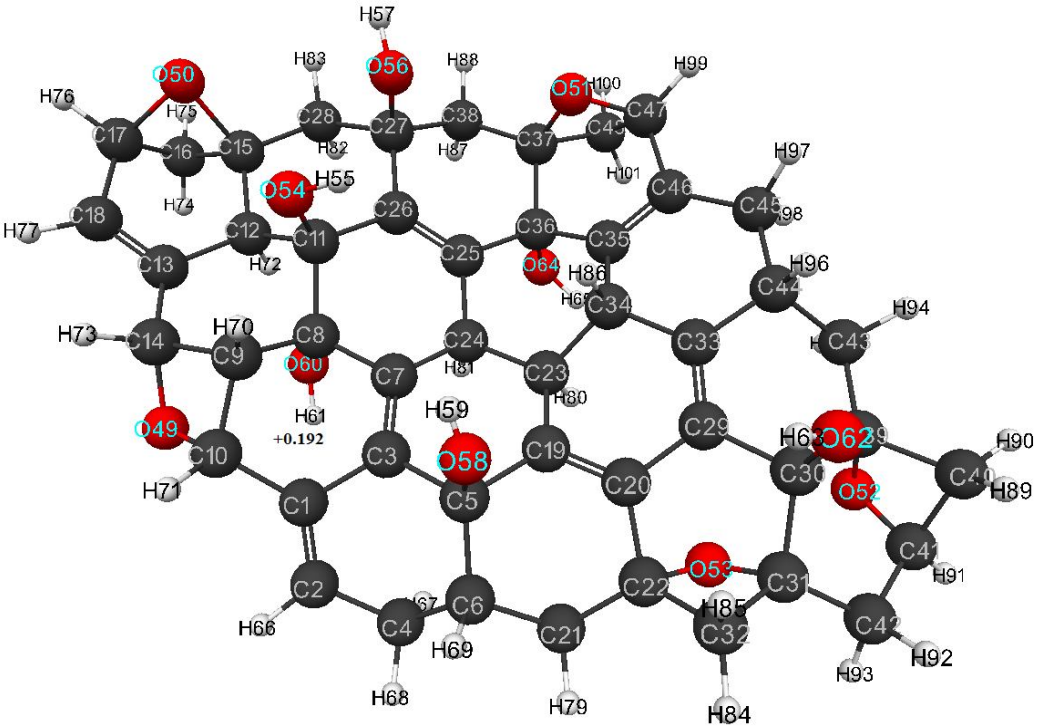

Рис. 1. Геометрическое и электронное строение молекулы оксид графена в рамках модели Ресса

Таблица 1

Квантово-химические параметры(E_0, E_{el} , q_{max}^{H+}) и (pKa) исследуемого оксида графена в рамках модели Ресса

Оксида графена	E0 кДж/моль	Eel кДж/моль	q_{max}^{H+}	pKa
Модель Ресса	-990003	-12884710	+0.192	14

Таким образом, получена оптимизированная атомно-молекулярная структура изучаемого оксида графена в рамках модели Ресса, исследуемая методом MNDO. Рассчитаны, квантово-химические параметры (E_0, E_{el}, q_{max}^{H+}), дипольные моменты, распределение электронной плотности на атомах, которая находится в полном соответствии с законом сохранения заряда и др. Доказано, что исследуемый оксид графена относятся к классу слабых бренстедовских кислот (pKa>14).

Список литературы

1. https://ru.wikipedia.org/wiki/Оксид_графита
2. http://www.nanometer.ru/2010/11/22/12904497319765_226493.html
3. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
4. M.W.Schmidt, K.K.Baldridge, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.H.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.J.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery. “General Atomic and Molecular Electronic Structure System”. Journal of Computational Chemistry, Vol. 14, 1347-1363(1993). Doi:10.1002/jcc.540141112
5. B. M. Bode, M. S. Gordon. “MacMolPlt: A graphical user interface for GAMESS”. Journal of Molecular Graphics and Modelling, Vol. 16, No. 3, 1998, p. 133-138.
6. V.A. Babkin, Yu.A. Sangalov, K.S. Minsker, et al. Theoretical estimation of acidic strength of fluorine hydrogen – boron fluoride complexes. Intern. J. Polymeric. Mater, 2000, Vol. 47, pp. 513-518.
7. V.A. Babkin, Yu.A. Sangalov, K.S. Minsker, et al. Theoretical estimation of acidic strength of fluorine hydrogen – boron fluoride complexes. Intern. J. Polymeric. Mater, 2000, Vol. 47, pp. 513-518.

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF THE PROTONATION MECHANISM OF ALLYLCYCLOPENTANE BY THE AB INITIO METHOD

***Andreev D.S., *Voronina N.I., *Ignatov A.V., **Belousova V.S.**

*Sebryakovsky Branch of the Volgograd State Technical University

**I. M. Sechenov First Moscow State Medical University

Summary

For the first time we studied the protonation mechanism of allylcyclopentane by the quantum-chemical method MNDO. It is shown that this mechanism is the usual reaction of attaching a proton to the double bond of a monomer. The reaction is exothermic and is of the barrier-free type. The energy gain as a result of the reaction of attacking the α-carbon atom is 491 kJ/mol.

***Keywords**: protonation mechanism, MNDO method, allylcyclopentane.*

There have been relatively few studies on the cationic polymerization of the allylcyclopentane olefin. Theoretical studies on the mechanism of elementary acts (initiation — growth of the material chain — break) of allylcyclopentane are practically absent to date. The energy of these reactions and the nature of the active centers are unknown, and the role of the solvent on the properties of the polymer under study has not been established. In this regard, it is of undoubted interest to study these mechanisms.

According to modern ideas about the initiation mechanism of cationic polymerization of allylcyclopentane, the true catalyst of this reaction is the aquacomplex of Lewis acids of the type $AlCl_3 \cdot H_2O$, $AlCl_2C_2H_5 \cdot H_2O$, $BF_3 \cdot H_2O$, etc. (i.e., the impurities of water in the system always exist) from which, due to complex coordinated interactions, the initiating particle $H^{+\delta}$ is being formed and, in turn, in accordance with the Markovnikov rule, attacks the most hydrogenated carbon atom C_α [1-3]. Study of the protonation mechanism of allylcyclopentane is a first step in studying the mechanism of elementary act of initiating cationic polymerization of the monomer. In connection with this, the purpose of this work is a quantum chemical study of the protonation mechanism of allylcyclopentane using the classical method MNDO.

Methodical Part

To study the protonation mechanism we chose the quantum chemical method MNDO with geometry optimization of all parameters by the gradient method built-in Firefly [4], which is partly based on the GAMESS (US) source code [5], in view of the fact that this method is specifically parameterized for the best reproduction of the energy characteristics of molecular systems, which is an important factor in the analysis of the mechanisms of cation processes. The calculations were performed in the approximation of an isolated molecule in the gas phase. The system $H^+ \ldots C_8H_{14}$ (allylcyclopentane) consists of 23 atoms, $M = 2S + 1 = 1$ (where S is the total spin of all electrons in the system and is equal zero (all electrons are paired), M is multiplicity), the total charge of the molecular system is $\sum q_c = 1$.

To research the protonation mechanism of allylcyclopentane, we performed the calculation of potential energy of proton interaction with allylcyclopentane using the same techniques as in [6-15]. The distances from the proton H_1 to C_2 (R_{H1C2}) and from H_1 to C_3 (R_{H1C3}) were chosen as the reaction coordinates. The initial values of R_{H1C2} and R_{H1C3} were assumed to be 0.31 nm. Further, changing the values of R_{H1C2} with a step of 0.01 nm, the quantum-chemical calculation of the molecular system was performed by changing the values of R_{H1C3} with the same step of 0.01 nm. According to the obtained energy values along the reaction coordinates, an equipotential surface of proton interactions with allylcyclopentane was constructed. The primary model of the proton attack of the allylcyclopentane molecule is shown in Fig. 1. The renowned *MacMolPlt* program [16] was used to picture the molecular models.

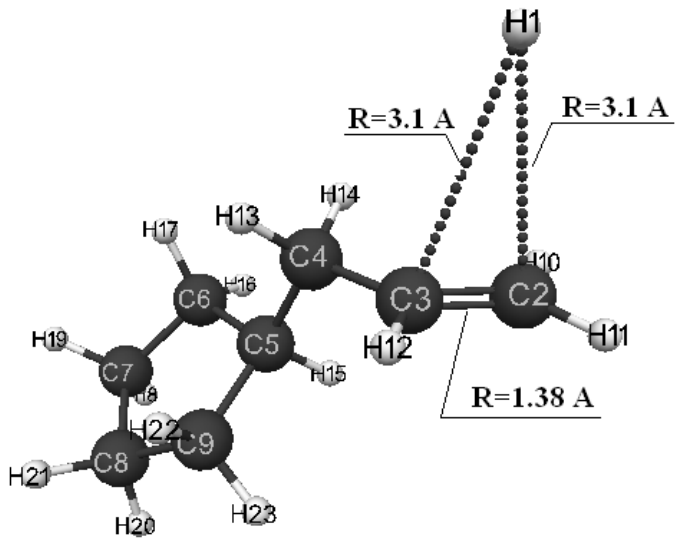

Fig. 1. Primary model of the proton attack of the allylcyclopentane molecule

Calculation Results

The final structure of the carbocation formed after the H_1 proton attack on the α-carbon atom of allylcyclopentane (C_2) and the rupture of the double bond of allylcyclopentane are shown in Fig. 2. Change in the total energy during the protonation of allylcyclopentane is shown in Fig. 4, from which it can be seen that on the entire path of the proton (the initiating particle) $H^{+\delta}$ motion along the reaction coordinates R_{H1C2} and R_{H1C3} the negative value of the total energy of the system H^+ … C_8H_{14} (E_0) steadily increases up to the complete formation of the carbocation and has a barrier-free type as in attacking the α- and β-carbon atoms of allylcyclopentane. The energy gain as a result of the reaction when attacking the α-carbon atom is 491 kJ/mol, and when attacking the β-carbon atom it is equal to 433 kJ/mol. Fig. 5. Shows the change in the total energy along the pathway of the proton H1 addition reaction to the α-carbon atom of allylcyclopentane. On the Fig. 6. The change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the α-carbon atom of allylcyclopentane is displayed. Fig. 7. Shows the total energy change along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of allylcyclopentane. Fig. 8. Displays the change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of allylcyclopentane.

Moreover, using the formula pKa=42,11-147,18q_{max}^{H+} [17] (q_{max}^{H+} = +0,114 – is the maximum charge on the hydrogen atom, pKa is the universal indicator of acidity), we find the acid strength of the formed carbocations equal to pKa = 25.

In addition, an analysis of the results of quantum chemical calculations and a change in the bond lengths and valence angles along the reaction coordinate in both cases when the proton attacks the α- and β-carbon atoms of allylcyclopentane suggests that the protonation mechanism for the cationic polymerization of allylcyclopentane proceeds according to the classical scheme of attaching a proton to the double bond of the monomer.

Thus, we first studied the protonation mechanism of allylcyclopentane by the quantum-chemical MNDO method. It was shown that this mechanism is a common reaction of attaching a proton to the double bond of an olefin. The reaction is exothermic and is of the barrier-free type.

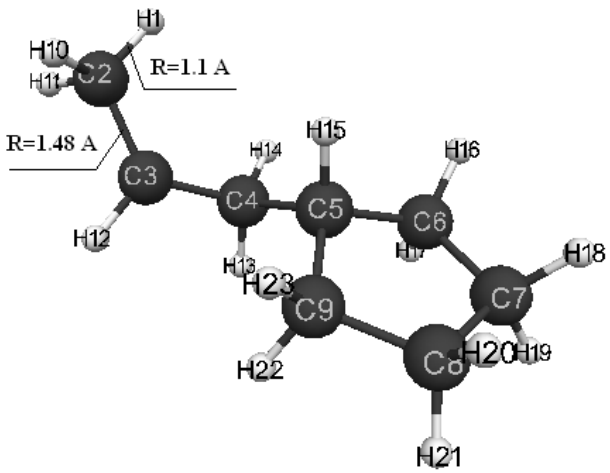

Fig.2. Final structure of the formed carbocation after the proton (H_1) attack of the α-carbon atom of allylcyclopentane (C_2)

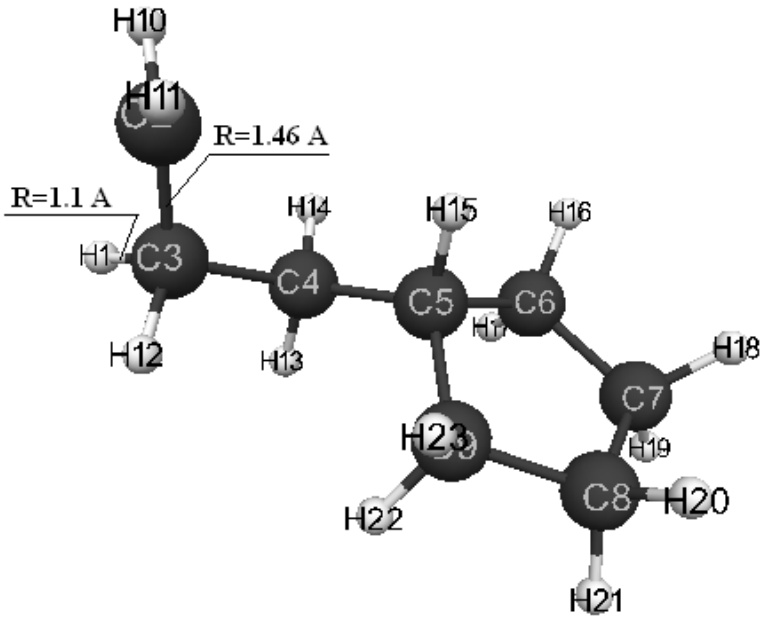

Fig.3. Final structure of the formed carbocation after the proton (H_1) attack of the β-carbon atom of allylcyclopentane (C_3)

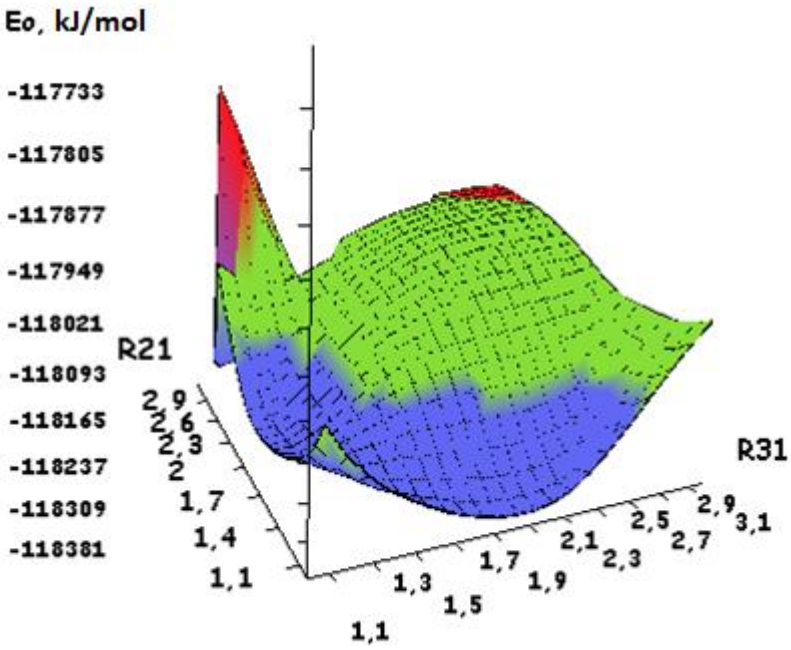

Fig. 4. Potential surface of the energies of proton interactions with allylcyclopentane

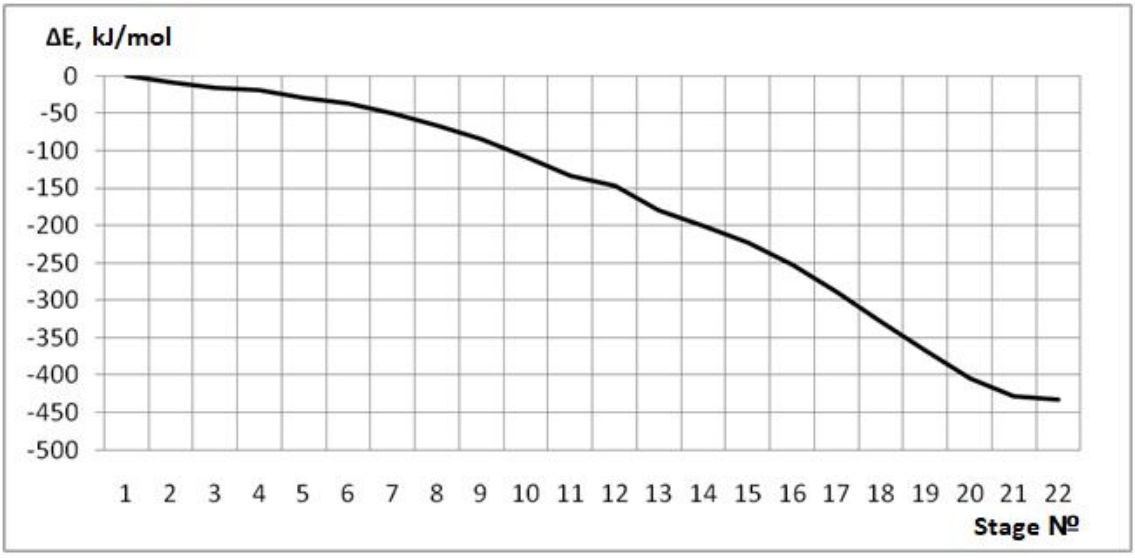

Fig. 5. Change in the total energy along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the α-carbon atom of allylcyclopentane

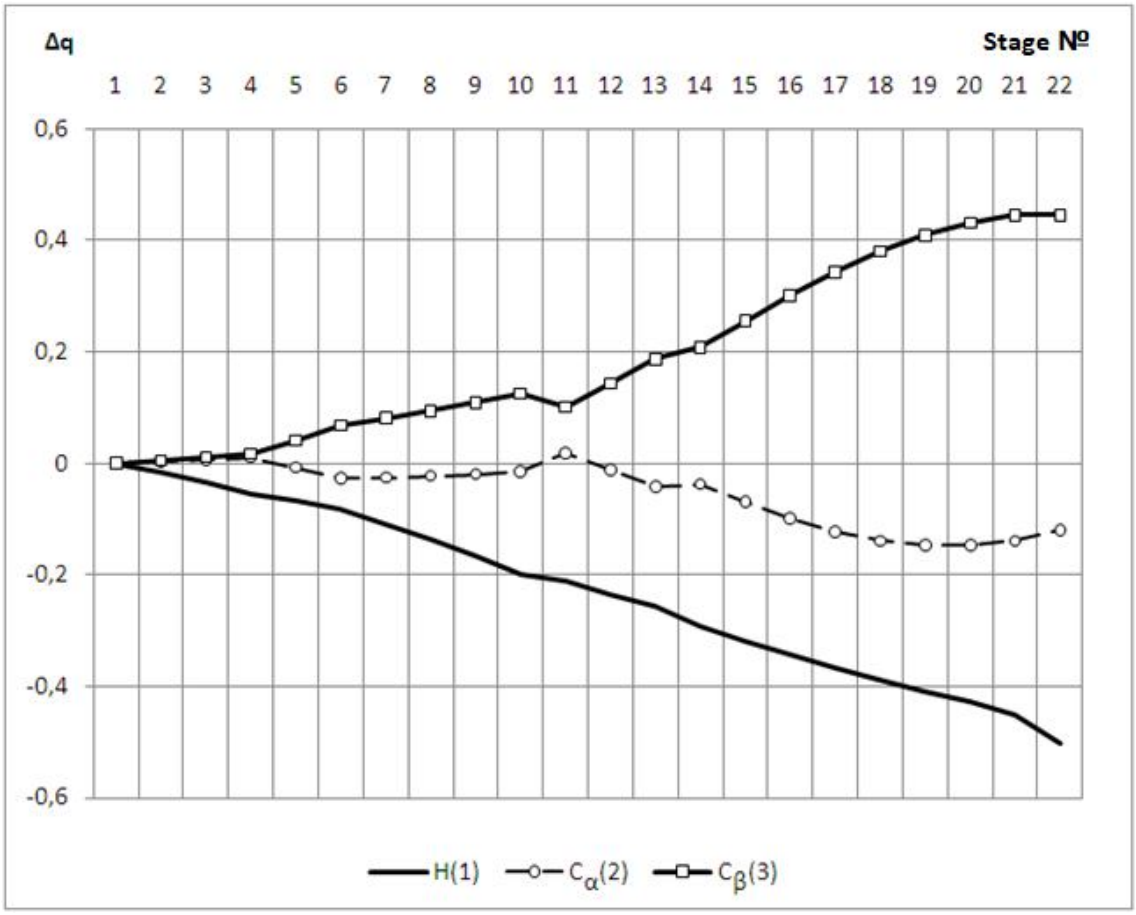

Fig. 6. Change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the α carbon atom of allylcyclopentane

Fig. 7. Change in the total energy along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of allylcyclopentane

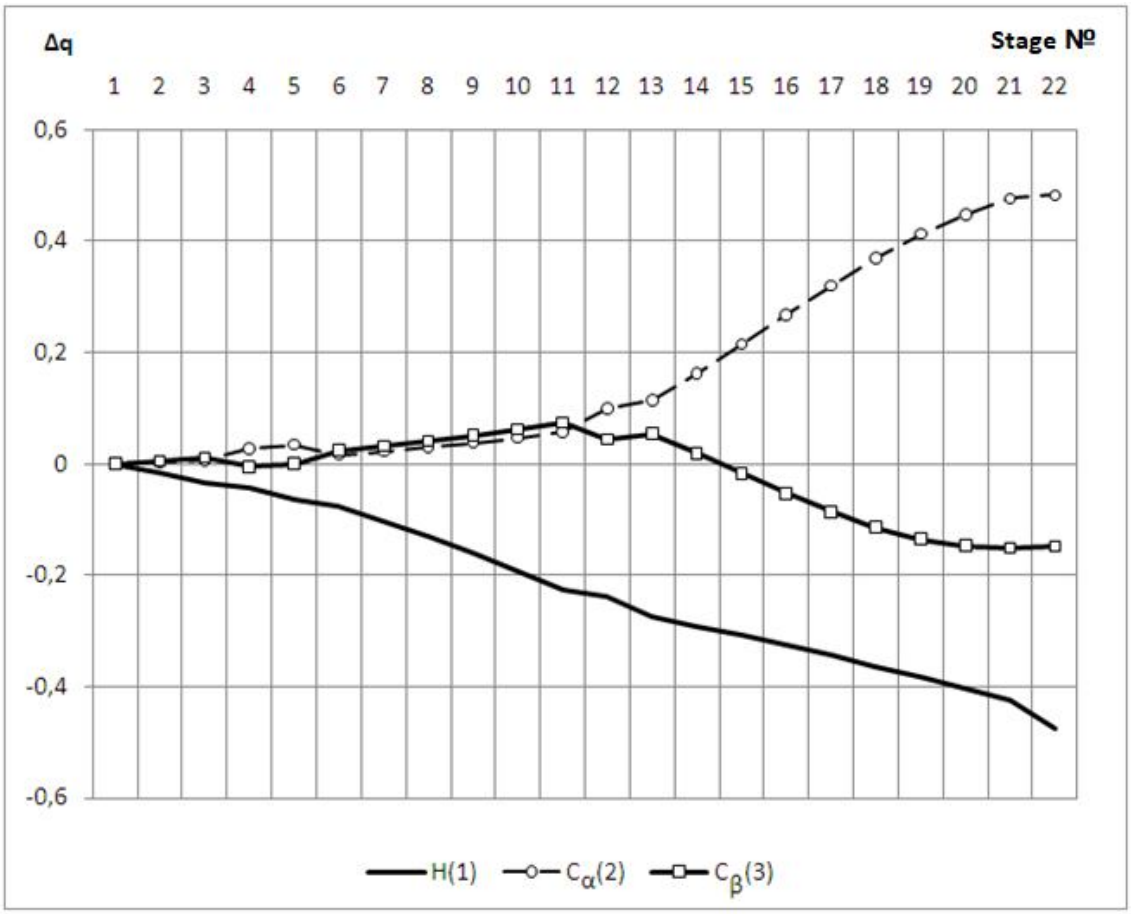

Fig. 8. Change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of allylcyclopentane

References

1. Kennedy J. Cationic polymerization of olefins / – Moscow, 1978. – 431 p.
2. Sangalov Yu.A., Minsker K.S. Polymers and copolymers of 4-methylpentene-1 / – Ufa, 2001. – 381 p.
3. Babkin V.A., Zaikov G.E., Minsker K.S. Quantum-chemical aspect of cationic polymerization of olefins / – Ufa, 1996. – 182 p.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. Babkin V.A. Quantum-chemical study of the mechanism of protonation of 2,3,4,5-tetramethylstyrene by the AB INITIO method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Rakhimov A.I., Rakhimova N.A., Titova E.S. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – C. 22-28.
7. Babkin V.A. Potential interaction surface of a proton and a monomer of the cationic polymerization of 1-methylene-4-vinylcyclohexane. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Ovcharova V.A., Pristanskov A.A., Rakhimov A.I., Rakhimova N.A. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – No. 4 (199). – S. 43-47.

8. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the ab initio method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // In the collection: Materials of the I All-Russian scientific-practical conference of the Sebryakovsky Branch of the Volgograd State Technical University and the National University of Science and Technology "MISiS". – 2018 .- p. 164-170.
9. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the ab initio method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // In the collection: Materials of the I All-Russian Scientific and Practical Conference of the Sebryakovsky Branch of the Volgograd State Technical University and the National University of Science and Technology "MISiS". – 2018 .- p. 170-186.
10. Ovcharova V.A. Potential interaction surface of a proton and a monomer of the cationic polymerization of allylcyclohexane. / Ovcharova V.A., Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Bakholdin I.I., Fomichev V.T., Fedunov R.G., Stoyanov O.V., Zaikov G.E., Sangalov Yu.A. // In the collection: State, problems and prospects for the development of a socially-oriented building complex at the regional level. Materials of the IV All-Russian scientific and technical Internet conference dedicated to the 15th anniversary of the Sebryakovsky Branch of Volgograd State Technical University. – 2017 .- p. 116-129.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – No. 4 (125). – S. 5-6.
12. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // In the collection: Materials of the II All-Russian student scientific and technical Internet conference. – 2017 .- p. 17-22.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // In the collection: Materials of the II All-Russian scientific-practical conference of the Sebryakovsky branch of the Volgograd State Technical University. – Volgograd, 2020 .- p. 107-112.
14. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // In the collection: Materials of the II All-Russian Scientific and Practical Conference of the Sebryakovsky branch of the Volgograd State Technical University. – Volgograd, 2020 .- p. 30-36.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // In the collection: Materials of the II All-Russian scientific-practical conference of the Sebryakovsky branch of the Volgograd State Technical University. – Volgograd, 2020 .- p. 36-42.
16. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
17. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF THE PROTONATION MECHANISM OF 4-METHYLPENTADIENE-1,3 BY THE AB INITIO METHOD

***Andreev D.S., *Voronina N.I., *Ignatov A.V., **Belousova V.S.**

*Sebryakovsky Branch of the Volgograd State Technical University

**I. M. Sechenov First Moscow State Medical University

Summary

For the first time we studied the protonation mechanism of 4-methylpentadiene-1,3 by the quantum-chemical method MNDO. It is shown that this mechanism is the usual reaction of attaching a proton to the double bond of a monomer. The reaction is exothermic and is of the barrier-free type. The energy gain as a result of the reaction of attacking the α-carbon atom is 533 kJ/mol.

Keywords: *protonation mechanism, MNDO method, 4-methylpentadiene-1,3.*

There have been relatively few studies on the cationic polymerization of the 4-methylpentadiene-1,3 olefin. Theoretical studies on the mechanism of elementary acts (initiation — growth of the material chain — break) of 4-methylpentadiene-1,3 are practically absent to date. The energy of these reactions and the nature of the active centers are unknown, and the role of the solvent on the properties of the polymer under study has not been established. In this regard, it is of undoubted interest to study these mechanisms.

According to modern ideas about the initiation mechanism of cationic polymerization of 4-methylpentadiene-1,3, the true catalyst of this reaction is the aquacomplex of Lewis acids of the type $AlCl_3 \cdot H_2O$, $AlCl_2C_2H_5 \cdot H_2O$, $BF_3 \cdot H_2O$, etc. (i.e., the impurities of water in the system always exist) from which, due to complex coordinated interactions, the initiating particle $H^{+\delta}$ is being formed and, in turn, in accordance with the Markovnikov rule, attacks the most hydrogenated carbon atom C_α [1-3]. Study of the protonation mechanism of 4-methylpentadiene-1,3 is a first step in studying the mechanism of elementary act of initiating cationic polymerization of the monomer. In connection with this, the purpose of this work is a quantum chemical study of the protonation mechanism of 4-methylpentadiene-1,3 using the classical method MNDO.

Methodical Part

To study the protonation mechanism we chose the quantum chemical method MNDO with geometry optimization of all parameters by the gradient method built-in Firefly [4], which is partly based on the GAMESS (US) source code [5], in view of the fact that this method is specifically parameterized for the best reproduction of the energy characteristics of molecular systems, which is an important factor in the analysis of the mechanisms of cation processes. The calculations were performed in the approximation of an isolated molecule in the gas phase. The system $H^+ \ldots C_6H_{10}$ (4-methylpentadiene-1,3) consists of 17 atoms, M = 2 S + 1 = 1 (where S is

the total spin of all electrons in the system and is equal zero (all electrons are paired), M is multiplicity), the total charge of the molecular system is $\sum q_c = 1$.

To research the protonation mechanism of 4-methylpentadiene-1,3, we performed the calculation of potential energy of proton interaction with 4-methylpentadiene-1,3 using the same techniques as in [6-15]. The distances from the proton H_1 to C_2 (R_{H1C2}) and from H_1 to C_3 (R_{H1C3}) were chosen as the reaction coordinates. The initial values of R_{H1C2} and R_{H1C3} were assumed to be 0.31 nm. Further, changing the values of R_{H1C2} with a step of 0.01 nm, the quantum-chemical calculation of the molecular system was performed by changing the values of R_{H1C3} with the same step of 0.01 nm. According to the obtained energy values along the reaction coordinates, an equipotential surface of proton interactions with 4-methylpentadiene-1,3 was constructed. The primary model of the proton attack of the 4-methylpentadiene-1,3 molecule is shown in Fig. 1. The renowned *MacMolPlt* program [16] was used to picture the molecular models.

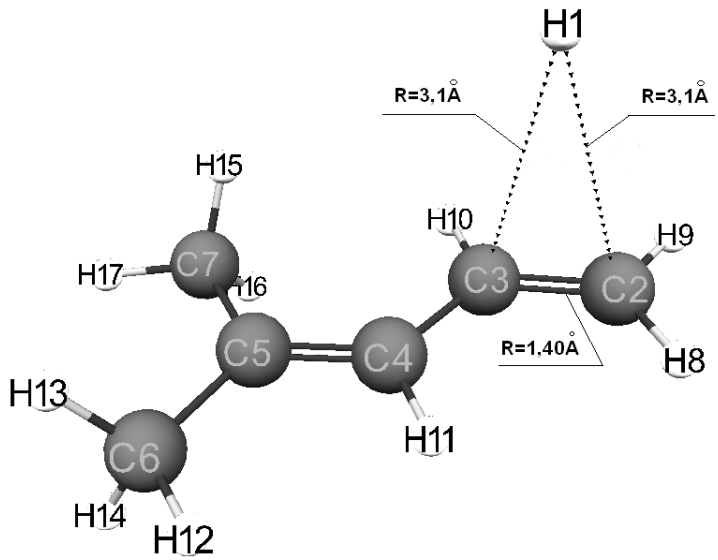

Fig. 1. Primary model of the proton attack of the 4-methylpentadiene-1,3 molecule

Calculation Results

The final structure of the carbocation formed after the H_1 proton attack on the α-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3 (C_2) and the rupture of the double bond of 4-methylpentadiene-1,3 are shown in Fig. 2. Change in the total energy during the protonation of 4-methylpentadiene-1,3 is shown in Fig. 4, from which it can be seen that on the entire path of the proton (the initiating particle) $H^{+\delta}$ motion along the reaction coordinates R_{H1C2} and R_{H1C3} the negative value of the total energy of the system $H^+ \ldots C_6H_{10}$ (E_0) steadily increases up to the complete formation of the carbocation and has a barrier-free type as in attacking the α- and β-carbon atoms of 4-methylpentadiene-1,3. The energy gain as a result of the reaction when attacking the α-carbon atom is 533 kJ/mol, and when attacking the β-carbon atom it is equal to 464 kJ/mol. Fig. 5. Shows the change in the total energy along the pathway of the proton H1 addition reaction to the α-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3. On the Fig. 6. The change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the α-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3 is displayed. Fig. 7. Shows the total energy change along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3. Fig. 8. Displays

the change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3.

Moreover, using the formula pKa=42,11-147,18q_{max}^{H+} [17] (q_{max}^{H+} = +0,112 – is the maximum charge on the hydrogen atom, pKa is the universal indicator of acidity), we find the acid strength of the formed carbocations equal to pKa = 26.

In addition, an analysis of the results of quantum chemical calculations and a change in the bond lengths and valence angles along the reaction coordinate in both cases when the proton attacks the α- and β-carbon atoms of 4-methylpentadiene-1,3 suggests that the protonation mechanism for the cationic polymerization of 4-methylpentadiene-1,3 proceeds according to the classical scheme of attaching a proton to the double bond of the monomer.

Thus, we first studied the protonation mechanism of 4-methylpentadiene-1,3 by the quantum-chemical MNDO method. It was shown that this mechanism is a common reaction of attaching a proton to the double bond of an olefin. The reaction is exothermic and is of the barrier-free type.

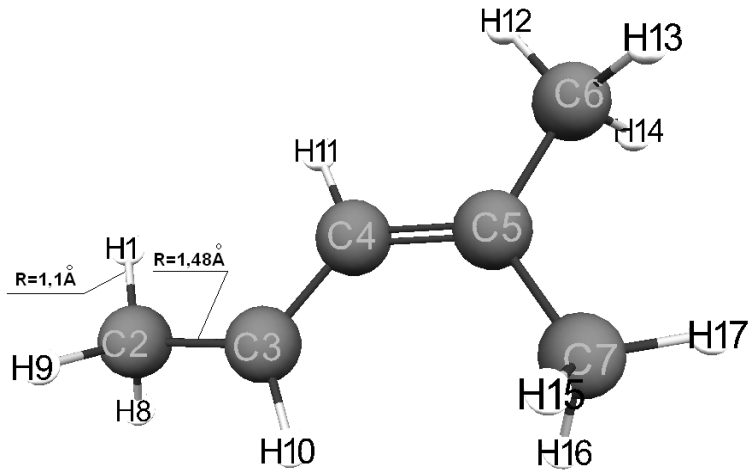

Fig.2. Final structure of the formed carbocation after the proton (H_1) attack of the α-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3 (C_2)

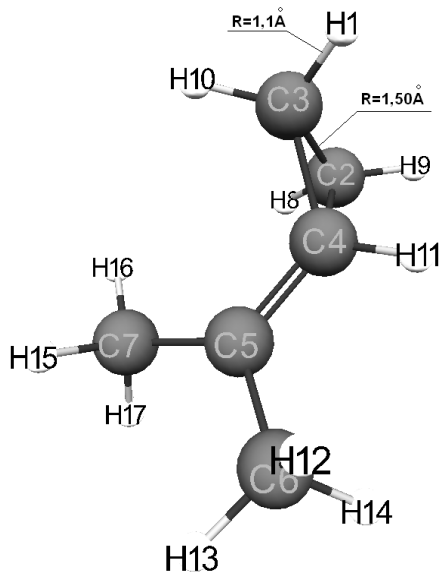

Fig.3. Final structure of the formed carbocation after the proton (H_1) attack of the β-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3 (C_3)

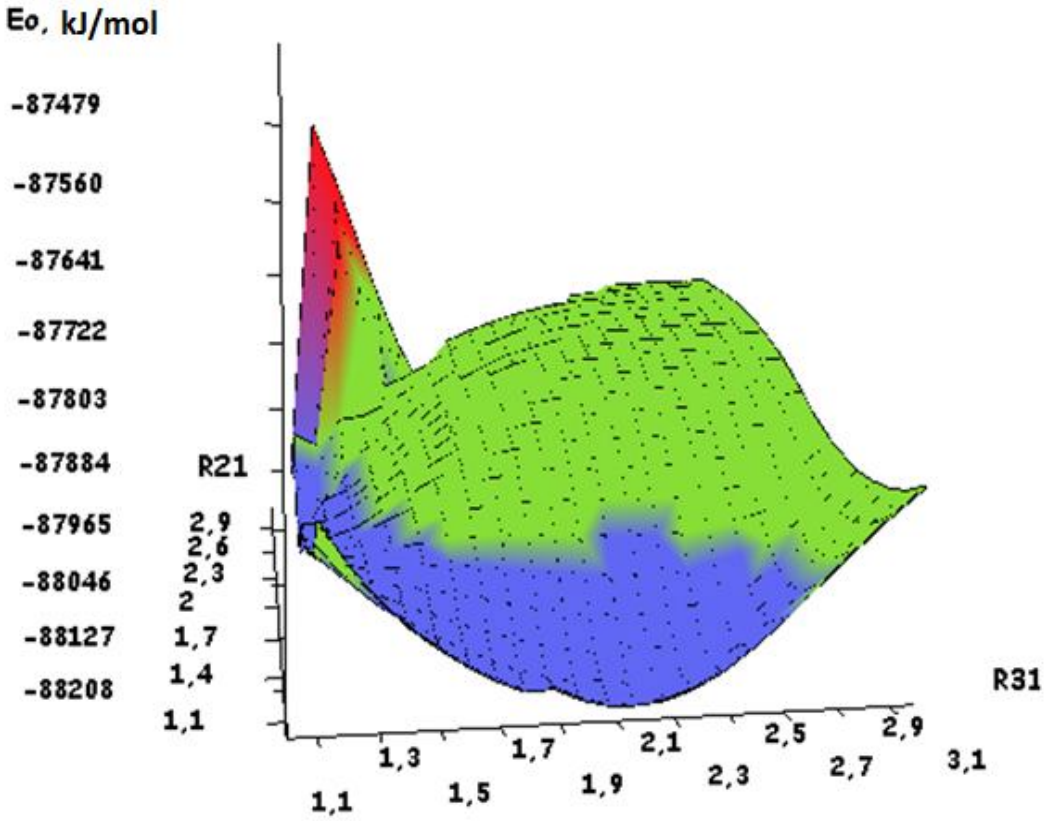

Fig. 4. Potential surface of the energies of proton interactions with 4-methylpentadiene-1,3

Fig. 5. Change in the total energy along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the α-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3

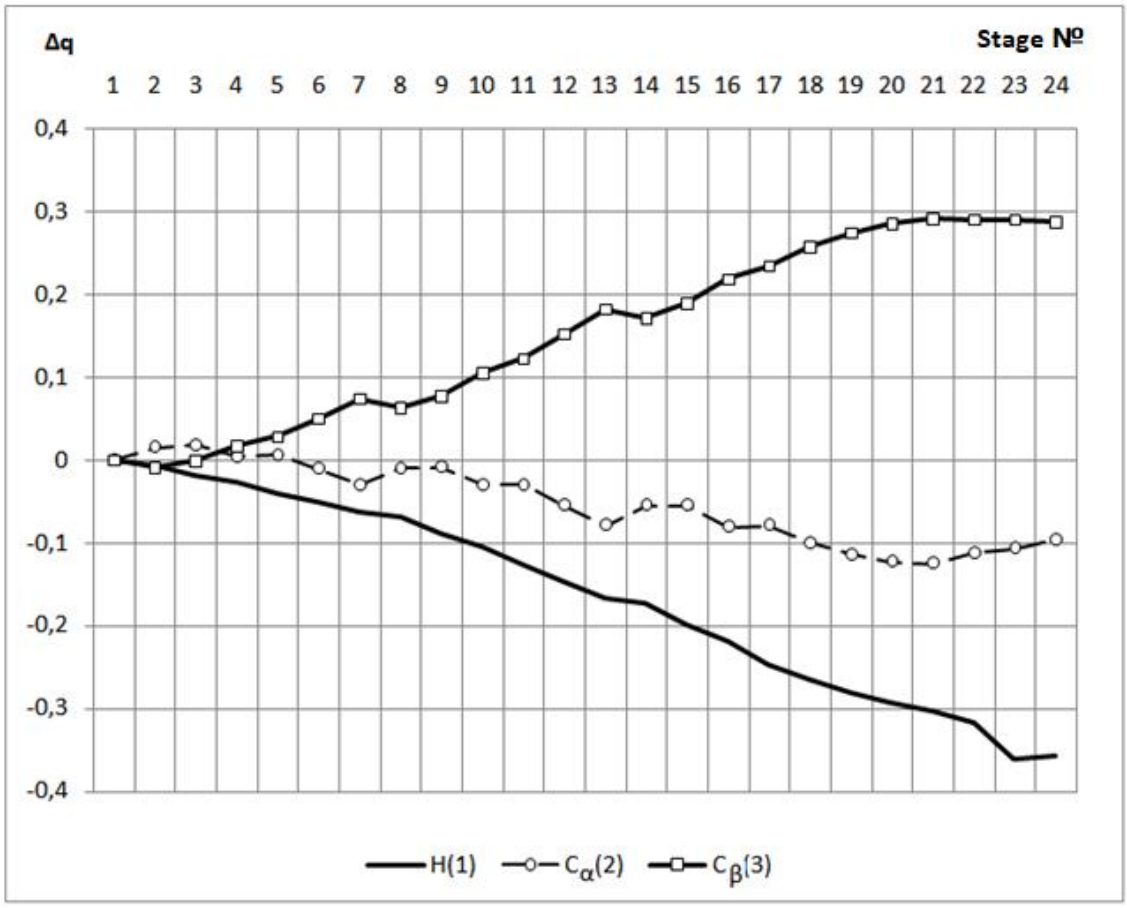

Fig. 6. Change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the α carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3

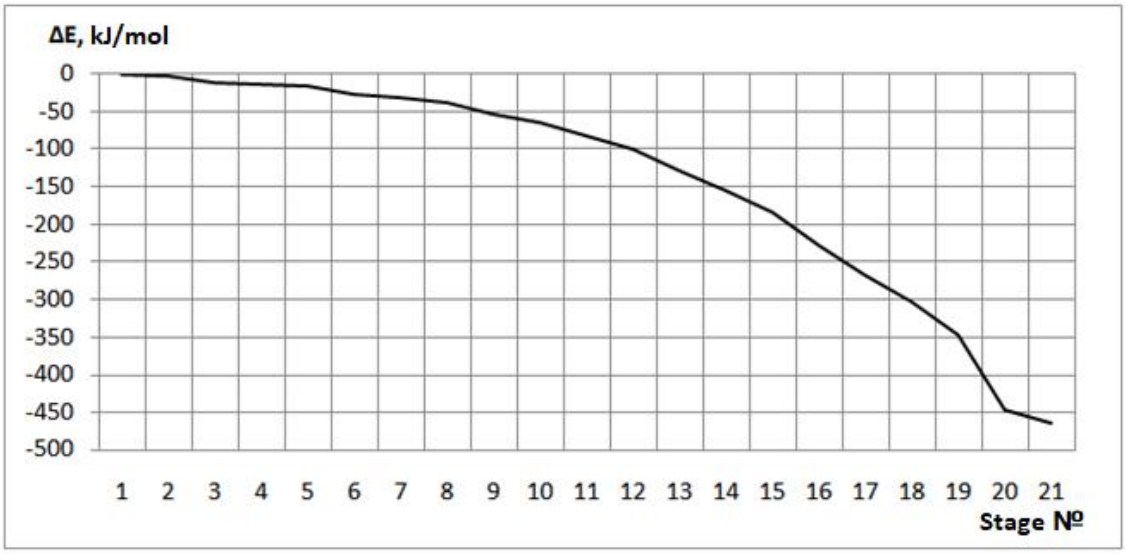

Fig. 7. Change in the total energy along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3

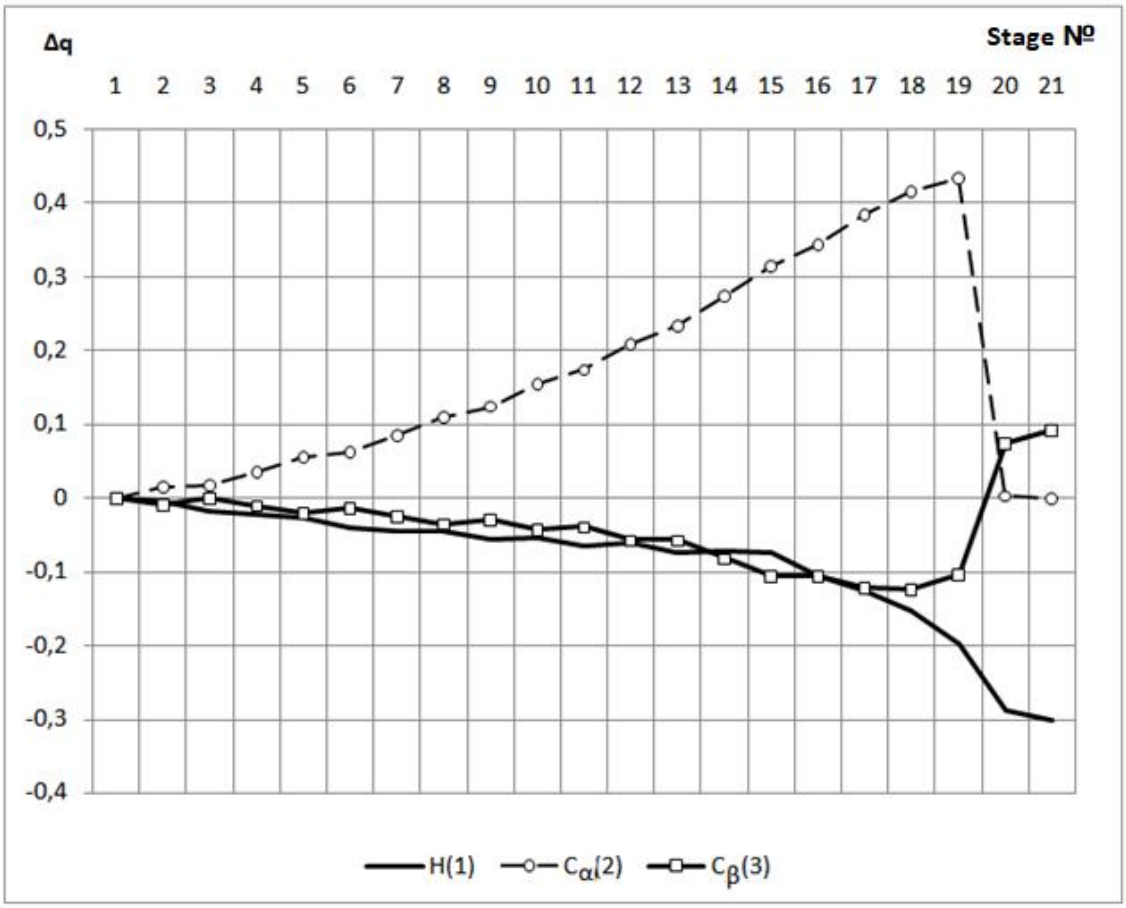

Fig. 8. Change in some atom charges along the pathway of the proton H_1 addition reaction to the β-carbon atom of 4-methylpentadiene-1,3

References

1. Kennedy J. Cationic polymerization of olefins / – Moscow, 1978. – 431 p.
2. Sangalov Yu.A., Minsker K.S. Polymers and copolymers of 4-methylpentene-1 / – Ufa, 2001. – 381 p.
3. Babkin V.A., Zaikov G.E., Minsker K.S. Quantum-chemical aspect of cationic polymerization of olefins / – Ufa, 1996. – 182 p.
4. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363.
6. Babkin V.A. Quantum-chemical study of the mechanism of protonation of 2,3,4,5-tetramethylstyrene by the AB INITIO method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Rakhimov A.I., Rakhimova N.A., Titova E.S. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2019. – № 5 (228). – C. 22-28.
7. Babkin V.A. Potential interaction surface of a proton and a monomer of the cationic polymerization of 1-methylene-4-vinylcyclohexane. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Ovcharova V.A., Pristanskov A.A., Rakhimov A.I., Rakhimova N.A. // Izvestia Volgograd State Technical University. – 2017. – No. 4 (199). – S. 43-47.
8. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of styrene by the ab initio method. / Babkin V.A., Ignatov A.V., Andreev D.S. // In the collection: Materials of the I All-Russian scientific-practical conference of the Sebryakovsky Branch of the Volgograd

State Technical University and the National University of Science and Technology "MISiS". – 2018 .- p. 164-170.
9. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of trimethylstyrene by the ab initio method. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // In the collection: Materials of the I All-Russian Scientific and Practical Conference of the Sebryakovsky Branch of the Volgograd State Technical University and the National University of Science and Technology "MISiS". – 2018 .- p. 170-186.
10. Ovcharova V.A. Potential interaction surface of a proton and a monomer of the cationic polymerization of allylcyclohexane. / Ovcharova V.A., Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Bakholdin I.I., Fomichev V.T., Fedunov R.G., Stoyanov O.V., Zaikov G.E., Sangalov Yu.A. // In the collection: State, problems and prospects for the development of a socially-oriented building complex at the regional level. Materials of the IV All-Russian scientific and technical Internet conference dedicated to the 15th anniversary of the Sebryakovsky Branch of Volgograd State Technical University. – 2017 .- p. 116-129.
11. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-fluorstyrol by the MNDO method. / Babkin V.A., Vashuta Yu.A., Kozhukhova A.V., Andreev D.S., Ignatov A.V., Knyazev A.P., Rakhimov A.I., Titova E.S., Belousova V.S., Rakhimova O.S., Prochukhan K.Yu., Denisyuk A.R. // Fluorine notes. – 2019. – No. 4 (125). – S. 5-6.
12. Potential surface of interaction of proton and cationic polymerization monomer 4-methylpentene-1. / Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Skorchenko V.Yu., Fomichev V.T., Prochukhan K.Yu., Sangalov Yu.A. // In the collection: Materials of the II All-Russian student scientific and technical Internet conference. – 2017 .- p. 17-22.
13. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of vinylcyclopentane by the MNDO method. / Shishkov D.A., Andreev D.S., Ignatov A.V. // In the collection: Materials of the II All-Russian scientific-practical conference of the Sebryakovsky branch of the Volgograd State Technical University. – Volgograd, 2020 .- p. 107-112.
14. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of allylbenzole by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Buravleva E.A. // In the collection: Materials of the II All-Russian Scientific and Practical Conference of the Sebryakovsky branch of the Volgograd State Technical University. – Volgograd, 2020 .- p. 30-36.
15. Quantum-chemical study of the protonation mechanism of p-xymelene by the MNDO method. / Anisimova V.S., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. // In the collection: Materials of the II All-Russian scientific-practical conference of the Sebryakovsky branch of the Volgograd State Technical University. – Volgograd, 2020 .- p. 36-42.
16. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
17. Quantum-chemical calculation of parameters of acidic strength of reactive fuels by MNDO method. / Babkin V.A., Fedunov R.G., Ponomarev O.A., Sangalov Yu.A., Sangalov E.Yu., Minsker K.S., Minsker S.K., Zaikov G.E. // Oxidation Communications, – Vol.21, – №4, 1998. – pp. 454-460.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ ОВАЛЕНА МЕТОДОМ PM3 В РАМКАХ НЕЛИНЕЙНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МОДЕЛИ ГРАФЕНА

Андреев Д.С., Игнатов А.В., Мощенко К.С.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы овалена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила (pKa= 40). Установлено, что молекула метилинден относится к классу очень слабых H-кислот (pKa>14).

Ключевые слова: *квантово-химический расчет, метод PM3, графен, овален, кислотная сила.*

Summary

The first quantum-chemical calculation of the molecule ovalene by the method PM3 was performed with optimization of the geometry for all parameters by a standard gradient method. The optimized geometric and electronic structure of ovalene was obtained and its acid strength was theoretically evaluated (pKa = 40). It was found that the molecule belongs to the class of very weak H-acids (pKa> 14).

Keywords*: quantum-chemical calculation, PM3, graphene, ovalene, acid strength*

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы овалена [1] в рамках нелинейной молекулярной модели графена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в программу Firefly [2], который частично основан на исходном коде GAMESS (US) [3], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [4].

Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекулы овалена получены методом PM3 и показаны на рис. 1 и в табл.1. Используя формулу для PM3 — pKa=51.52 - 103.867q_{max}^{H+} [5-7] (q_{max}^{H+}= +0.11, см. табл. 1), где q_{max}^{H+} — максимальный заряд на атоме водорода, pKa — универсальный показатель кислотности, находим значение кислотной силы pKa=40.

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы овалена в рамках молекулярной модели графена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его

кислотная сила (pKa=40). Установлено, что молекула метилинден относится к классу очень слабых Н-кислот (pKa>14).

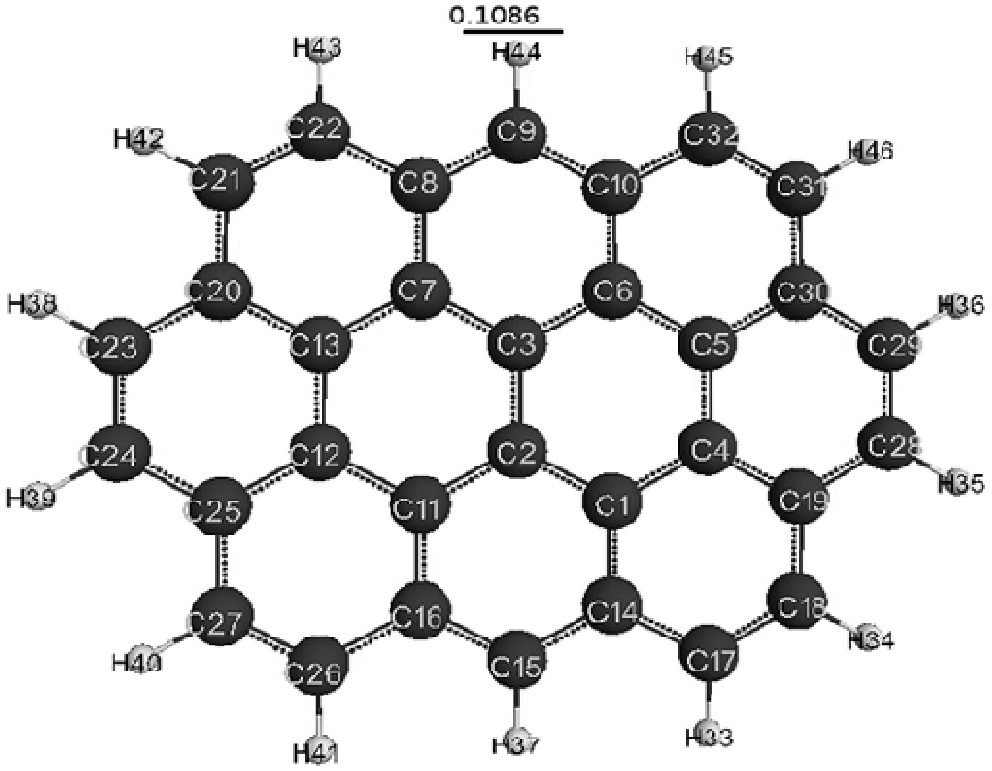

Рис.1. Геометрическое и электронное строение молекулы овалена в рамках молекулярной модели графена

(E_0= −386439 кДж/моль, $E_{эл}$= −3598988 кДж/моль)

Таблица 1.

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы овалена, полученные методом PM3

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(1)-C(4)	1,43	C(1)-C(14)-C(15)	120	C(1)	-0.0058
C(4)-C(19)	1,40	C(14)-C(15)-C(16)	121	C(2)	-0.0041
C(19)-C(18)	1,44	C(15)-C(16)-C(11)	120	C(3)	-0.0041
C(18)-C(17)	1,36	C(16)-C(11)-C(2)	120	C(4)	-0.0072
C(17)-C(14)	1,44	C(11)-C(2)-C(1)	120	C(5)	-0.0073
C(14)-C(1)	1,44	C(2)-C(1)-C(14)	120	C(6)	-0.0058
C(14)-C(15)	1,40	C(16)-C(26)-C(27)	121	C(7)	-0.0058
C(15)-C(16)	1,40	C(26)-C(27)-C(25)	121	C(8)	-0.0312
C(16)-C(11)	1,42	C(27)-C(25)-C(12)	119	C(9)	-0.0720

C(11)-C(2)	1,41	C(25)-C(12)-C(11)	120	C(10)	-0.0312
C(2)-C(1)	1,41	C(12)-C(11)-C(16)	120	C(11)	-0.0058
C(11)-C(12)	1,43	C(11)-C(16)-C(26)	118	C(12)	-0.0072
C(12)-C(25)	1,40	C(25)-C(24)-C(23)	121	C(13)	-0.0073
C(25)-C(27)	1,44	C(24)-C(23)-C(20)	121	C(14)	-0.0312
C(27)-C(26)	1,36	C(23)-C(20)-C(13)	119	C(15)	-0.0720
C(26)-C(16)	1,44	C(20)-C(13)-C(12)	120	C(16)	-0.0312
C(25)-C(24)	1,41	C(13)-C(12)-C(25)	120	C(17)	-0.0863
C(24)-C(23)	1,38	C(12)-C(25)-C(24)	119	C(18)	-0.0845
C(23)-C(20)	1,41	C(13)-C(20)-C(21)	119	C(19)	-0.0320
C(20)-C(13)	1,40	C(20)-C(21)-C(22)	121	C(20)	-0.0320
C(13)-C(12)	1,42	C(21)-C(22)-C(8)	121	C(21)	-0.0845
C(20)-C(21)	1,44	C(22)-C(8)-C(7)	118	C(22)	-0.0863
C(21)-C(22)	1,36	C(8)-C(7)-C(13)	120	C(23)	-0.0855
C(22)-C(8)	1,44	C(7)-C(13)-C(20)	120	C(24)	-0.0854
C(8)-C(7)	1,42	C(7)-C(8)-C(9)	120	C(25)	-0.0319
C(7)-C(13)	1,43	C(8)-C(9)-C(10)	121	C(26)	-0.0863
C(8)-C(9)	1,40	C(9)-C(10)-C(6)	120	C(27)	-0.0845
C(9)-C(10)	1,40	C(10)-C(6)-C(3)	120	C(28)	-0.0855
C(10)-C(6)	1,42	C(6)-C(3)-C(7)	120	C(29)	-0.0855
C(6)-C(3)	1,41	C(3)-C(7)-C(8)	120	C(30)	-0.0319
C(3)-C(7)	1,41	C(6)-C(10)-C(32)	119	C(31)	-0.0845
C(10)-C(32)	1,44	C(10)-C(32)-C(31)	121	C(32)	-0.0863
C(32)-C(31)	1,36	C(32)-C(31)-C(30)	121	C(33)	0.1050
C(31)-C(30)	1,44	C(31)-C(30)-C(5)	119	C(34)	0.1052
C(30)-C(5)	1,40	C(30)-C(5)-C(6)	120	C(35)	0.1059
C(5)-C(6)	1,43	C(5)-C(6)-C(10)	120	C(36)	0.1059
C(30)-C(29)	1,41	C(5)-C(30)-C(29)	119	H(37)	0.1086
C(29)-C(28)	1,38	C(30)-C(29)-C(28)	121	H(38)	0.1059
C(28)-C(19)	1,41	C(29)-C(28)-C(19)	121	H(39)	0.1059
C(3)-C(2)	1,44	C(28)-C(19)-C(4)	119	H(40)	0.1052
C(17)-H(33)	1,10	C(19)-C(4)-C(5)	120	H(41)	0.1050
C(15)-H(37)	1,10	C(4)-C(5)-C(30)	120	H(42)	0.1053
C(26)-H(41)	1,10	C(1)-C(4)-C(19)	120	H(43)	0.1050
C(27)-H(40)	1,10	C(4)-C(19)-C(18)	119	**H(44)**	**0.1086**
C(24)-H(39)	1,10	C(19)-C(18)-C(17)	121	H(45)	0.1050
C(23)-H(38)	1,10	C(18)-C(17)-C(14)	121	H(46)	0.1052
C(21)-H(42)	1,10	C(17)-C(14)-C(1)	118		
C(22)-H(43)	1,10	C(14)-C(1)-C(4)	120		
C(9)-H(44)	1,10	C(1)-C(4)-C(5)	120		
C(32)-H(45)	1,10	C(4)-C(5)-C6)	120		
C(31)-H(46)	1,10	C(5)-C(6)-C(3)	120		
C(29)-H(36)	1,10	C(6)-C(3)-C(2)	120		
C(28)-H(35)	1,10	C(3)-C(2)-C(1)	120		

C(18)-H(34)	1,10	C(2)-C(1)-C(4)	120		
		C(2)-C(3)-C(7)	120		
		C(3)-C(7)-C(13)	120		
		C(7)-C(13)-C(12)	120		
		C(13)-C(12)-C(11)	120		
		C(12)-C(11)-C(2)	120		
		C(11)-C(2)-C(3)	120		
		C(15)-C(14)-C(17)	122		
		C(18)-C(19)-C(28)	122		
		C(29)-C(30)-C(31)	122		
		C(32)-C(10)-C(9)	122		
		C(9)-C(8)-C(22)	122		
		C(21)-C(20)-C(23)	122		
		C(24)-C(25)-C(27)	122		
		C(26)-C(16)-C(15)	122		
		C(16)-C(15)-H(37)	120		
		H(37)-C(15)-C(14)	120		
		C(14)-C(17)-H(33)	118		
		H(33)-C(17)-C(18)	121		
		C(17)-C(18)-H(34)	121		
		H(34)-C(18)-C(19)	118		
		C(19)-C(28)-H(35)	119		
		H(35)-C(28)-C(29)	120		
		C(28)-C(29)-H(36)	120		
		H(36)-C(29)-C(30)	119		
		C(30)-C(31)-H(46)	118		
		H(46)-C(31)-C(32)	121		
		C(31)-C(32)-H(45)	121		
		H(45)-C(32)-C(10)	118		
		C(10)-C(9)-H(44)	120		
		H(44)-C(9)-C(8)	120		
		C(8)-C(22)-H(43)	118		
		H(43)-C(22)-C(21)	121		
		C(22)-C(21)-H(42)	121		
		H(42)-C(21)-C(20)	118		
		C(20)-C(23)-H(38)	119		
		H(38)-C(23)-C(24)	120		
		C(23)-C(24)-H(39)	120		
		H(39)-C(24)-C(25)	119		
		C(25)-C(27)-H(40)	118		
		H(40)-C(27)-C(26)	121		
		C(27)-C(26)-H(41)	121		
		H(41)-C(26)-C(16)	118		

Список литературы

1. https://ru.wikipedia.org/wiki/Овален
2. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
3. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363
4. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
5. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Дмитриев В.Ю., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.В., Заиков Г.Е. Квантово-химический расчет оптической системы SiO_2-Na_2O в рамках молекулярной модели. // Вестник Технологического университета. 2015. Т. 18. № 1. С. 31-33.
6. Бабкин В.А., Дмитриев В.Ю., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.Н., Храмогин Д.А., Фомичёв В.Т., Заиков Г.Е. Конформер оптической системы диоксид кремния – $4Na_2O$.// Вестник Технологического университета. 2019. Т. 22. № 1. С. 8-10.
7. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Петров В.В., Игнатов А.В., Титова Е.С., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Денисюк А.Р. Об электронной структуре мономеров катионной полимеризации 2-метилиндена и его производных. // Известия Волгоградского государственного технического университета. 2018. № 12 (222). С. 13-21.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ ДИБЕНЗО[G,P]ХРИЗЕНА МЕТОДОМ PM3 В РАМКАХ НЕЛИНЕЙНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МОДЕЛИ ГРАФЕНА

Андреев Д.С., Игнатов А.В., Мощенко К.С.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы дибензо[g,p]хризена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила (pKa= 39). Установлено, что молекула дибензо[g,p]хризена относится к классу очень слабых H-кислот (pKa>14).

Ключевые слова: *квантово-химический расчет, метод PM3, графен, дибензо[g,p]хризен, кислотная сила.*

Summary

The first quantum-chemical calculation of the molecule dibenzo[g,p]chrysene by the method PM3 was performed with optimization of the geometry for all parameters by a standard gradient method. The optimized geometric and electronic structure of dibenzo[g,p]chrysene was obtained and its acid strength was theoretically evaluated (pKa = 39). It was found that the molecule belongs to the class of very weak H-acids (pKa> 14).

***Keywords**: quantum-chemical calculation, PM3, graphene, dibenzo[g,p]chrysene, acid strength*

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы дибензо[g,p]хризена [1] в рамках нелинейной молекулярной модели графена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в программу Firefly [2], который частично основан на исходном коде GAMESS (US) [3], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [4].

Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекулы метилинден получены методом PM3 и показаны на рис. 1 и в табл.1. Используя формулу для PM3 — pKa=51.52 - 103.867q_{max}^{H+} [5-7] (q_{max}^{H+}= +0,12, см. табл. 1), где q_{max}^{H+} — максимальный заряд на атоме водорода, pKa — универсальный показатель кислотности, находим значение кислотной силы pKa=39.

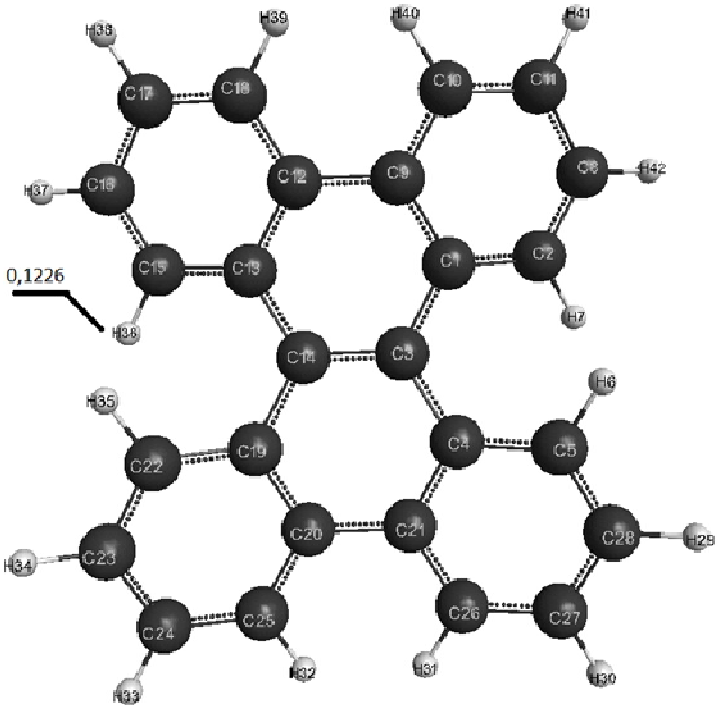

Рис.1. Геометрическое и электронное строение молекулы дибензо[g,p]хризена

(E_0= -320250 кДж/моль, $E_{эл}$= -2706375 кДж/моль)

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы дибензо[g,p]хризена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила (pKa=39). Установлено, что молекула графена из 6 гексагонов относится к классу очень слабых Н-кислот (pKa>14).

Таблица 1

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы дибензо[g,p]хризена, полученные методом PM3

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(1)-C(2)	1.41	C(17)-C(18)-C(12)	121	C(1)	-0.0128
C(2)-C(8)	1.38	C(18)-C(12)-C(13)	120	C(2)	-0.1100
C(8)-C(11)	1.40	C(12)-C(13)-C(15)	117	C(3)	0.0006
C(11)-C(10)	1.38	C(13)-C(15)-C(16)	122	C(4)	-0.0133
C(10)-C(9)	1.41	C(15)-C(16)-C(17)	120	C(5)	-0.1091
C(9)-C(1)	1.41	C(16)-C(17)-C(18)	119	H(6)	0.1221
C(1)-C(3)	1.46	C(15)-C(13)-C(14)	123	H(7)	0.1225
C(3)-C(14)	1.39	C(18)-C(12)-C(9)	120	C(8)	-0.1017
C(14)-C(13)	1.46	C(12)-C(9)-C(10)	120	C(9)	-0.0225
C(13)-C(12)	1.41	C(13)-C(12)-C(9)	119	C(10)	-0.1008
C(12)-C(9)	1.45	C(12)-C(9)-C(1)	119	C(11)	-0.0964
C(12)-C(18)	1.41	C(9)-C(1)-C(3)	119	C(12)	-0.0226
C(18)-C(17)	1.38	C(1)-C(3)-C(14)	119	C(13)	-0.0126
C(17)-C(16)	1.40	C(3)-C(14)-C(13)	119	C(14)	0.0006
C(16)-C(15)	1.38	C(14)-C(13)-C(12)	119	C(15)	-0.1101
C(15)-C(13)	1.41	C(3)-C(1)-C(2)	123	C(16)	-0.1018
C(14)-C(19)	1.46	C(1)-C(3)-C(4)	121	C(17)	-0.0963
C(19)-C(20)	1.41	C(3)-C(4)-C(5)	124	C(18)	-0.1009
C(20)-C(21)	1.45	C(13)-C(14)-C(19)	121	C(19)	-0.0133
C(21)-C(4)	1.41	C(14)-C(19)-C(22)	124	C(20)	-0.0229
C(4)-C(3)	1.46	C(1)-C(2)-C(8)	122	C(21)	-0.0228
C(4)-C(5)	1.41	C(2)-C(8)-C(11)	120	C(22)	-0.1091
C(5)-C(28)	1.38	C(8)-C(11)-C(10)	119	C(23)	-0.1021
C(28)-C(27)	1.40	C(11)-C(10)-C(9)	121	C(24)	-0.0962
C(27)-C(26)	1.38	C(10)-C(9)-C(1)	120	C(25)	-0.1005
C(26)-C(21)	1.41	C(9)-C(1)-C(2)	117	C(26)	-0.1004
C(21)-C(20)	1.45	C(14)-C(3)-C(4)	119	C(27)	-0.0962
C(20)-C(25)	1.41	C(3)-C(4)-C(21)	119	C(28)	-0.1021
C(25)-C(24)	1.38	C(4)-C(21)-C(20)	119	H(29)	0.1044
C(24)-C(23)	1.40	C(21)-C(20)-C(19)	119	H(30)	0.1048

C(23)-C(22)	1.38	C(20)-C(19)-C(14)	119	H(31)	0.1123
C(22)-C(19)	1.41	C(19)-C(14)-C(3)	119	H(32)	0.1122
C(10)-H(40)	1.10	C(25)-C(20)-C(21)	120	H(33)	0.1049
C(11)-H(41)	1.09	C(20)-C(21)-C(26)	120	H(34)	0.1044
C(8)-H(42)	1.09	C(21)-C(4)-C(5)	117	H(35)	0.1222
C(2)-H(7)	1.10	C(4)-C(5)-C(28)	122	**H(36)**	**0.1226**
C(5)-H(6)	1.10	C(5)-C(28)-C(27)	120	H(37)	0.1043
C(28)-H(29)	1.09	C(28)-C(27)-C(26)	119	H(38)	0.1048
C(27)-H(30)	1.09	C(27)-C(26)-C(21)	121	H(39)	0.1122
C(26)-H(31)	1.10	C(26)-C(21)-C(4)	120	H(40)	0.1122
C(25)-H(32)	1.10	C(19)-C(20)-C(25)	120	H(41)	0.1048
C(24)-H(33)	1.09	C(20)-C(25)-C(24)	121	H(42)	0.1043
C(23)-H(34)	1.09	C(25)-C(24)-C(23)	119		
C(22)-H(35)	1.10	C(24)-C(23)-C(22)	120		
C(15)-H(36)	1.10	C(23)-C(22)-C(19)	122		
C(16)-H(37)	1.09	C(22)-C(19)-C(20)	117		
C(17)-H(38)	1.09	C(9)-C(10)-H(40)	119		
C(18)-H(39)	1.10	H(40)-C(10)-C(11)	120		
		C(10)-C(11)-H(41)	121		
		H(41)-C(11)-C(8)	120		
		C(11)-C(8)-H(42)	120		
		H(42)-C(8)-C(2)	120		
		C(8)-C(2)-H(7)	119		
		H(7)-C(2)-C(1)	120		
		C(4)-C(5)-H(6)	120		
		H(6)-C(5)-C(28)	119		
		C(5)-C(28)-H(29)	120		
		H(29)-C(28)-C(27)	120		
		C(28)-C(27)-H(30)	120		
		H(30)-C(27)-C(26)	121		
		C(27)-C(26)-H(31)	120		
		H(31)-C(26)-C(21)	119		
		C(20)-C(25)-H(32)	119		
		H(32)-C(25)-C(24)	120		
		C(25)-C(24)-H(33)	121		
		H(33)-C(24)-C(23)	120		
		C(24)-C(23)-H(34)	120		
		H(34)-C(23)-C(22)	120		
		C(23)-C(22)-H(35)	119		
		H(35)-C(22)-C(19)	120		
		C(13)-C(15)-H(36)	120		
		H(36)-C(15)-C(16)	119		
		C(15)-C(16)-H(37)	120		
		H(37)-C(16)-C(17)	120		

		C(16)-C(17)-H(38) H(38)-C(17)-C(18) C(17)-C(18)-H(39) H(39)-C(18)-C(12)	120 121 120 119		

Список литературы

1. National Center for Biotechnology Information. “PubChem Compound Summary for CID 67449, Dibenzo[g,p]chrysene” PubChem, https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Dibenzo_g_p_chrysene. Accessed 31 October, 2020.
2. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
3. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363
4. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
5. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Дмитриев В.Ю., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.В., Заиков Г.Е. Квантово-химический расчет оптической системы SiO_2-Na_2O в рамках молекулярной модели. // Вестник Технологического университета. 2015. Т. 18. № 1. С. 31-33.
6. Бабкин В.А., Дмитриев В.Ю., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.Н., Храмогин Д.А., Фомичёв В.Т., Заиков Г.Е. Конформер оптической системы диоксид кремния – $4Na_2O$.// Вестник Технологического университета. 2019. Т. 22. № 1. С. 8-10.
7. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Петров В.В., Игнатов А.В., Титова Е.С., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Денисюк А.Р. Об электронной структуре мономеров катионной полимеризации 2-метилиндена и его производных. // Известия Волгоградского государственного технического университета. 2018. № 12 (222). С. 13-21.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛ НЕЛИНЕЙНЫХ ГРАФЕНОВ ИЗ 10, 13 И 14 ГЕКСАГОНОВ МЕТОДОМ MNDO

Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В.

СФ ВолгГТУ, кафедра МиЕНД

Аннотация

Впервые выполнен квантово-химический расчет молекул нелинейных графенов из 10, 13 и 14 гексагонов методом MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена их кислотная сила

(pKa=33). Установлено, что изученные молекулы относится к классу очень слабых кислот (pKa>14).

Ключевые слова: квантово-химический расчет, метод MNDO, графен, кислотная сила.

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул нелинейных графенов из 10, 13 и 14 гексагонов методом MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в Firefly [1-2], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [3].

Результаты расчетов.

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул графена из 10, 13 и 14 гексагонов получены методом MNDO и показаны на рис.1-3 и в табл.1-3. Используя известную формулу pKa=42.11-147.18q_{max}^{H+}[4] (q_{max}^{H+} = +0,06- максимальный заряд на атоме водорода, pKa – универсальный показатель кислотности см. табл.1) находим значение кислотной силы, равное pKa=33.

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул графена из 10, 13 и 14 гексагонов методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценена их кислотная сила pKa=33. Установлено, что изученные молекулы относится к классу очень слабых кислот (pKa>14).

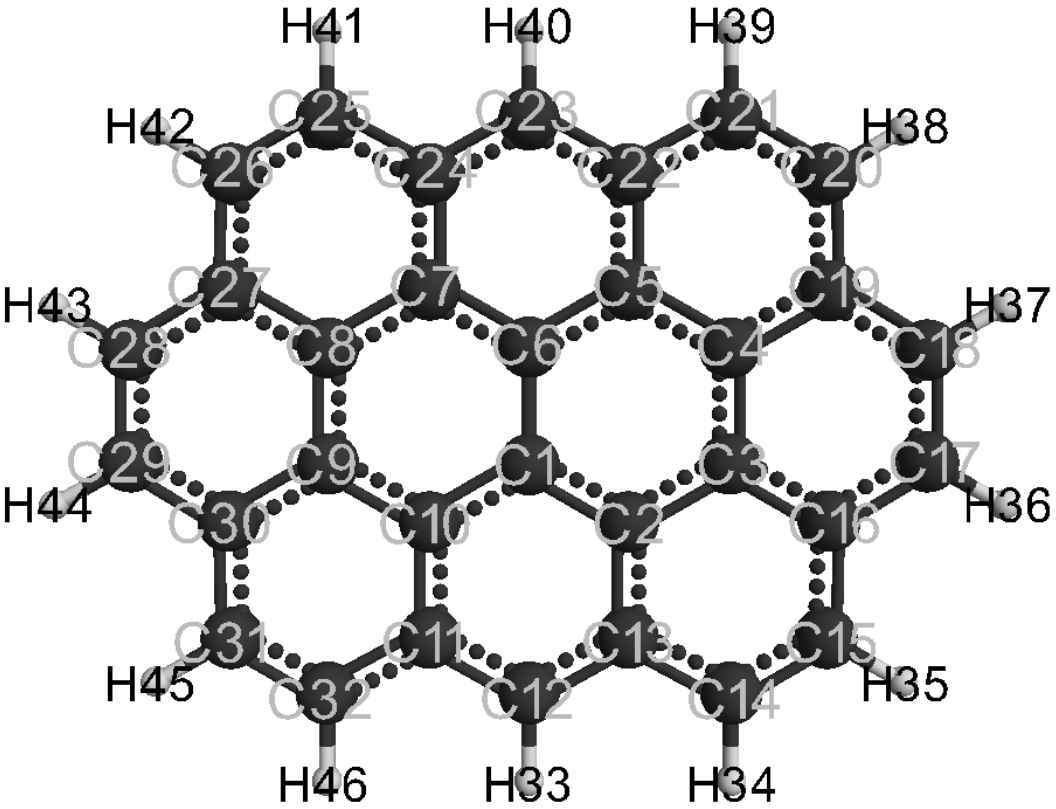

Рис.1. Геометрическое и электронное строение молекулы графена из 10 гексагонов. (E_0= -413506 кДж/моль, $E_{эл}$= -3632268 кДж/моль)

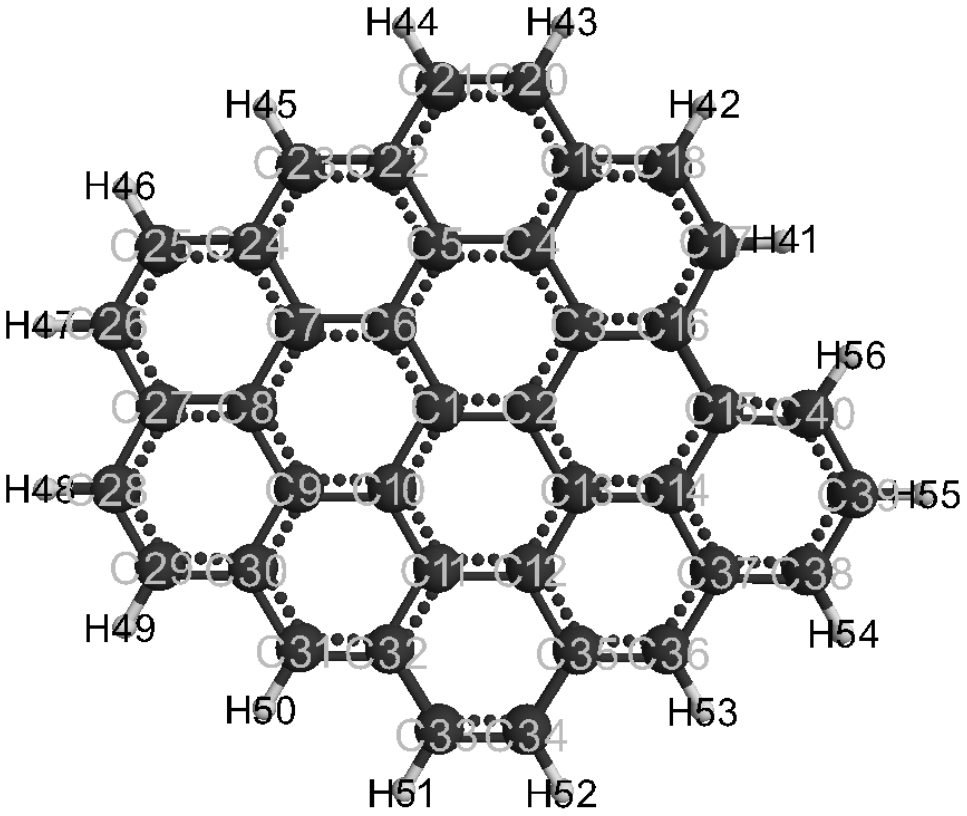

Рис. 2. Геометрическое и электронное строение молекулы графена из 13 гексагонов. (E_0= -514815 кДж/моль, $E_{эл}$= -5077771 кДж/моль)

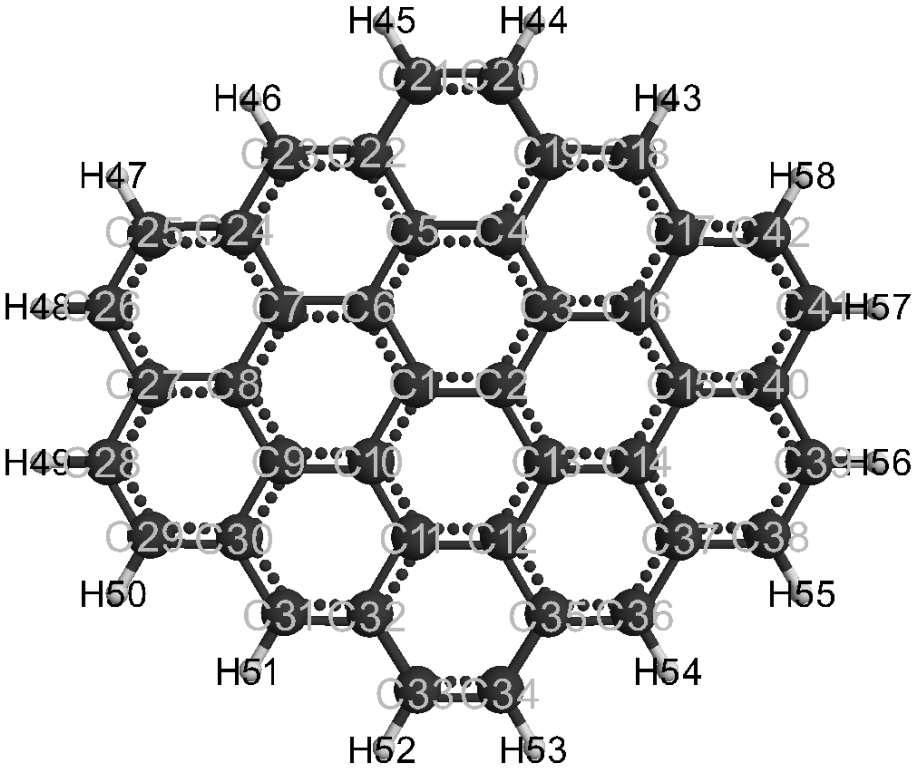

Рис.3. Геометрическое и электронное строение молекулы графена из 14 гексагонов. (E_0= -539487 кДж/моль, $E_{эл}$= -5452416 кДж/моль)

Таблица 1.

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы графена из 10 гексагонов.

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(2)-C(1)	1.43	C(13)-C(2)-C(1)	120	C(1)	-0.007
C(2)-C(13)	1.44	C(5)-C(6)-C(1)	120	C(2)	-0.004
C(3)-C(2)	1.46	C(12)-C(13)-C(2)	119	C(3)	-0.01
C(4)-C(3)	1.44	C(14)-C(13)-C(2)	118	C(4)	-0.01
C(5)-C(4)	1.46	C(1)-C(2)-C(3)	120	C(5)	-0.004
C(6)-C(5)	1.43	C(13)-C(2)-C(3)	120	C(6)	-0.007
C(6)-C(1)	1.46	C(2)-C(3)-C(4)	120	C(7)	-0.004
C(7)-C(6)	1.43	C(16)-C(3)-C(4)	120	C(8)	-0.01
C(7)-C(24)	1.44	C(3)-C(4)-C(5)	120	C(9)	-0.01
C(8)-C(7)	1.46	C(19)-C(4)-C(5)	120	C(10)	-0.004
C(9)-C(8)	1.44	C(4)-C(5)-C(6)	120	C(11)	-0.036
C(9)-C(10)	1.46	C(2)-C(1)-C(6)	120	C(12)	-0.012
C(10)-C(1)	1.43	C(22)-C(5)-C(6)	120	C(13)	-0.036
C(11)-C(10)	1.44	C(24)-C(7)-C(6)	120	C(14)	-0.039
C(11)-C(32)	1.45	C(5)-C(6)-C(7)	120	C(15)	-0.041
C(12)-C(11)	1.41	C(1)-C(6)-C(7)	120	C(16)	-0.029
C(13)-C(12)	1.41	C(23)-C(24)-C(7)	119	C(17)	-0.038
C(14)-C(13)	1.45	C(25)-C(24)-C(7)	118	C(18)	-0.038
C(15)-C(14)	1.37	C(6)-C(7)-C(8)	120	C(19)	-0.029
C(15)-C(16)	1.45	C(24)-C(7)-C(8)	120	C(20)	-0.041
C(16)-C(3)	1.43	C(10)-C(9)-C(8)	120	C(21)	-0.039
C(17)-C(16)	1.43	C(7)-C(8)-C(9)	120	C(22)	-0.036
C(18)-C(17)	1.39	C(1)-C(10)-C(9)	120	C(23)	-0.012
C(18)-C(19)	1.43	C(27)-C(8)-C(9)	120	C(24)	-0.036
C(19)-C(4)	1.43	C(11)-C(10)-C(9)	120	C(25)	-0.039
C(20)-C(19)	1.45	C(2)-C(1)-C(10)	120	C(26)	-0.041
C(21)-C(20)	1.37	C(32)-C(11)-C(10)	118	C(27)	-0.029
C(21)-C(22)	1.45	C(1)-C(10)-C(11)	120	C(28)	-0.038
C(22)-C(5)	1.44	C(31)-C(32)-C(11)	122	C(29)	-0.038
C(23)-C(22)	1.41	C(10)-C(11)-C(12)	119	C(30)	-0.029
C(24)-C(23)	1.41	C(32)-C(11)-C(12)	123	C(31)	-0.041
C(25)-C(24)	1.45	C(11)-C(12)-C(13)	122	C(32)	-0.039
C(26)-C(25)	1.37	C(12)-C(13)-C(14)	123	H(33)	+0.059
C(26)-C(27)	1.45	C(16)-C(15)-C(14)	122	H(34)	+0.059
C(27)-C(8)	1.43	C(13)-C(14)-C(15)	122	H(35)	+0.059
C(28)-C(27)	1.43	C(3)-C(16)-C(15)	119	**H(36)**	**+0.06**
C(29)-C(28)	1.39	C(17)-C(16)-C(15)	123	H(37)	+0.06
C(29)-C(30)	1.43	C(2)-C(3)-C(16)	120	H(38)	+0.059
C(30)-C(9)	1.43	C(3)-C(16)-C(17)	119	H(39)	+0.059
C(31)-C(30)	1.45	C(19)-C(18)-C(17)	121	H(40)	+0.059
C(32)-C(31)	1.37	C(16)-C(17)-C(18)	121	H(41)	+0.059
H(33)-C(12)	1.09	C(4)-C(19)-C(18)	119	H(42)	+0.059
H(34)-C(14)	1.09	C(20)-C(19)-C(18)	123	H(43)	+0.06
H(35)-C(15)	1.09	C(3)-C(4)-C(19)	120	H(44)	+0.06
H(36)-C(17)	1.09	C(4)-C(19)-C(20)	119	H(45)	+0.059

H(37)-C(18)	1.09	C(22)-C(21)-C(20)	122	H(46)	+0.059
H(38)-C(20)	1.09	C(19)-C(20)-C(21)	122		
H(39)-C(21)	1.09	C(5)-C(22)-C(21)	118		
H(40)-C(23)	1.09	C(23)-C(22)-C(21)	123		
H(41)-C(25)	1.09	C(4)-C(5)-C(22)	120		
H(42)-C(26)	1.09	C(5)-C(22)-C(23)	119		
H(43)-C(28)	1.09	C(22)-C(23)-C(24)	122		
H(44)-C(29)	1.09	C(23)-C(24)-C(25)	123		
H(45)-C(31)	1.09	C(27)-C(26)-C(25)	122		
H(46)-C(32)	1.09	C(24)-C(25)-C(26)	122		
		C(8)-C(27)-C(26)	119		
		C(28)-C(27)-C(26)	123		
		C(7)-C(8)-C(27)	120		
		C(8)-C(27)-C(28)	119		
		C(30)-C(29)-C(28)	121		
		C(27)-C(28)-C(29)	121		
		C(9)-C(30)-C(29)	119		
		C(31)-C(30)-C(29)	123		
		C(8)-C(9)-C(30)	120		
		C(10)-C(9)-C(30)	120		
		C(9)-C(30)-C(31)	119		
		C(30)-C(31)-C(32)	122		
		C(11)-C(12)-H(33)	119		
		C(13)-C(14)-H(34)	118		
		C(14)-C(15)-H(35)	120		
		C(16)-C(15)-H(35)	118		
		C(16)-C(17)-H(36)	119		
		C(17)-C(18)-H(37)	119		
		C(19)-C(18)-H(37)	119		
		C(19)-C(20)-H(38)	118		
		C(20)-C(21)-H(39)	120		
		C(22)-C(21)-H(39)	118		
		C(22)-C(23)-H(40)	119		
		C(24)-C(25)-H(41)	118		
		C(25)-C(26)-H(42)	120		
		C(27)-C(26)-H(42)	118		
		C(27)-C(28)-H(43)	119		
		C(28)-C(29)-H(44)	119		
		C(30)-C(29)-H(44)	119		
		C(30)-C(31)-H(45)	118		
		C(31)-C(32)-H(46)	120		

Таблица 2.

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы графена из 13 гексагонов.

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(2)-C(1)	1.41	C(3)-C(2)-C(1)	121	C(1)	-0.001
C(2)-C(3)	1.46	C(13)-C(2)-C(1)	120	C(2)	-0.002
C(2)-C(13)	1.45	C(5)-C(6)-C(1)	120	C(3)	-0.006
C(3)-C(4)	1.44	C(7)-C(6)-C(1)	120	C(4)	-0.011
C(4)-C(19)	1.43	C(9)-C(10)-C(1)	120	C(5)	-0.002
C(5)-C(4)	1.46	C(4)-C(3)-C(2)	119	C(6)	-0.009
C(6)-C(5)	1.42	C(12)-C(13)-C(2)	120	C(7)	-0.002
C(6)-C(1)	1.46	C(16)-C(3)-C(2)	121	C(8)	-0.013
C(6)-C(7)	1.44	C(14)-C(13)-C(2)	120	C(9)	-0.003
C(7)-C(24)	1.43	C(19)-C(4)-C(3)	120	C(10)	-0.007
C(8)-C(7)	1.45	C(13)-C(2)-C(3)	120	C(11)	-0.005
C(9)-C(8)	1.45	C(5)-C(4)-C(3)	120	C(12)	-0.003
C(10)-C(9)	1.45	C(18)-C(19)-C(4)	119	C(13)	-0.008
C(10)-C(1)	1.45	C(20)-C(19)-C(4)	119	C(14)	-0.002
C(11)-C(10)	1.42	C(19)-C(4)-C(5)	119	C(15)	-0.02
C(11)-C(32)	1.46	C(7)-C(6)-C(5)	120	C(16)	-0.009
C(12)-C(11)	1.44	C(4)-C(5)-C(6)	120	C(17)	-0.042
C(13)-C(12)	1.42	C(2)-C(1)-C(6)	120	C(18)	-0.039
C(14)-C(13)	1.45	C(24)-C(7)-C(6)	120	C(19)	-0.03
C(15)-C(14)	1.45	C(22)-C(5)-C(6)	120	C(20)	-0.041
C(15)-C(16)	1.48	C(8)-C(7)-C(6)	120	C(21)	-0.039
C(16)-C(3)	1.43	C(23)-C(24)-C(7)	119	C(22)	-0.038
C(17)-C(16)	1.42	C(25)-C(24)-C(7)	119	C(23)	-0.012
C(18)-C(17)	1.40	C(24)-C(7)-C(8)	120	C(24)	-0.038
C(19)-C(18)	1.41	C(7)-C(8)-C(9)	120	C(25)	-0.037
C(20)-C(19)	1.46	C(27)-C(8)-C(9)	120	C(26)	-0.042
C(21)-C(20)	1.36	C(8)-C(9)-C(10)	120	C(27)	-0.026
C(21)-C(22)	1.46	C(2)-C(1)-C(10)	120	C(28)	-0.041
C(22)-C(5)	1.44	C(30)-C(9)-C(10)	120	C(29)	-0.037
C(23)-C(22)	1.40	C(32)-C(11)-C(10)	120	C(30)	-0.036
C(24)-C(23)	1.42	C(9)-C(10)-C(11)	120	C(31)	-0.013
C(25)-C(24)	1.45	C(1)-C(10)-C(11)	120	C(32)	-0.036
C(26)-C(25)	1.37	C(31)-C(32)-C(11)	120	C(33)	-0.041
C(26)-C(27)	1.45	C(33)-C(32)-C(11)	118	C(34)	-0.04
C(27)-C(8)	1.42	C(10)-C(11)-C(12)	120	C(35)	-0.039
C(28)-C(27)	1.44	C(32)-C(11)-C(12)	121	C(36)	-0.011
C(29)-C(28)	1.38	C(11)-C(12)-C(13)	120	C(37)	-0.044
C(29)-C(30)	1.44	C(35)-C(12)-C(13)	120	C(38)	-0.03
C(30)-C(9)	1.43	C(12)-C(13)-C(14)	120	C(39)	-0.065
C(31)-C(30)	1.44	C(16)-C(15)-C(14)	119	C(40)	-0.031
C(32)-C(31)	1.39	C(13)-C(14)-C(15)	121	H(41)	+0.058
C(33)-C(32)	1.46	C(3)-C(16)-C(15)	120	H(42)	+0.061
C(34)-C(33)	1.36	C(37)-C(14)-C(15)	120	H(43)	+0.059
C(34)-C(35)	1.46	C(17)-C(16)-C(15)	122	H(44)	+0.059
C(35)-C(12)	1.46	C(4)-C(3)-C(16)	120	H(45)	+0.059

C(36)-C(35)	1.38	C(3)-C(16)-C(17)	118	H(46)	+0.059
C(36)-C(37)	1.44	C(16)-C(17)-C(18)	122	H(47)	+0.06
C(37)-C(14)	1.43	C(17)-C(18)-C(19)	121	H(48)	+0.06
C(38)-C(37)	1.43	C(18)-C(19)-C(20)	122	H(49)	+0.06
C(39)-C(38)	1.39	C(22)-C(21)-C(20)	121	H(50)	+0.059
C(39)-C(40)	1.42	C(19)-C(20)-C(21)	122	H(51)	+0.058
C(40)-C(15)	1.40	C(5)-C(22)-C(21)	118	H(52)	+0.058
H(41)-C(17)	1.09	C(23)-C(22)-C(21)	122	H(53)	+0.058
H(42)-C(18)	1.09	C(4)-C(5)-C(22)	120	H(54)	+0.061
H(43)-C(20)	1.09	C(5)-C(22)-C(23)	120	**H(55)**	**+0.062**
H(44)-C(21)	1.09	C(22)-C(23)-C(24)	122	H(56)	+0.058
H(45)-C(23)	1.09	C(23)-C(24)-C(25)	122		
H(46)-C(25)	1.09	C(27)-C(26)-C(25)	121		
H(47)-C(26)	1.09	C(24)-C(25)-C(26)	121		
H(48)-C(28)	1.09	C(8)-C(27)-C(26)	119		
H(49)-C(29)	1.09	C(28)-C(27)-C(26)	122		
H(50)-C(31)	1.09	C(7)-C(8)-C(27)	120		
H(51)-C(33)	1.09	C(8)-C(27)-C(28)	119		
H(52)-C(34)	1.09	C(30)-C(29)-C(28)	121		
H(53)-C(36)	1.09	C(27)-C(28)-C(29)	121		
H(54)-C(38)	1.09	C(9)-C(30)-C(29)	119		
H(55)-C(39)	1.09	C(31)-C(30)-C(29)	122		
H(56)-C(40)	1.09	C(8)-C(9)-C(30)	120		
		C(9)-C(30)-C(31)	119		
		C(30)-C(31)-C(32)	122		
		C(31)-C(32)-C(33)	122		
		C(35)-C(34)-C(33)	122		
		C(32)-C(33)-C(34)	122		
		C(12)-C(35)-C(34)	118		
		C(36)-C(35)-C(34)	123		
		C(11)-C(12)-C(35)	120		
		C(37)-C(36)-C(35)	122		
		C(12)-C(35)-C(36)	119		
		C(14)-C(37)-C(36)	119		
		C(38)-C(37)-C(36)	121		
		C(13)-C(14)-C(37)	119		
		C(14)-C(37)-C(38)	119		
		C(40)-C(39)-C(38)	120		
		C(37)-C(38)-C(39)	120		
		C(15)-C(40)-C(39)	122		
		C(14)-C(15)-C(40)	118		
		C(16)-C(15)-C(40)	123		
		C(16)-C(17)-H(41)	121		
		C(17)-C(18)-H(42)	119		
		C(19)-C(20)-H(43)	118		
		C(20)-C(21)-H(44)	120		
		C(22)-C(21)-H(44)	118		
		C(22)-C(23)-H(45)	120		
		C(24)-C(25)-H(46)	119		
		C(25)-C(26)-H(47)	120		

		C(27)-C(26)-H(47)	119		
		C(27)-C(28)-H(48)	119		
		C(28)-C(29)-H(49)	120		
		C(30)-C(29)-H(49)	119		
		C(30)-C(31)-H(50)	118		
		C(32)-C(33)-H(51)	118		
		C(33)-C(34)-H(52)	120		
		C(35)-C(34)-H(52)	118		
		C(35)-C(36)-H(53)	120		
		C(37)-C(36)-H(53)	118		
		C(37)-C(38)-H(54)	120		
		C(38)-C(39)-H(55)	120		
		C(40)-C(39)-H(55)	119		
		C(15)-C(40)-H(56)	122		

Таблица 3.

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы графена из 14 гексагонов.

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(2)-C(1)	1.41	C(13)-C(2)-C(1)	120	C(1)	-0.002
C(2)-C(13)	1.45	C(5)-C(6)-C(1)	120	C(2)	-0.002
C(3)-C(2)	1.45	C(9)-C(10)-C(1)	120	C(3)	-0.007
C(4)-C(3)	1.42	C(12)-C(13)-C(2)	120	C(4)	-0.004
C(4)-C(19)	1.45	C(14)-C(13)-C(2)	120	C(5)	-0.004
C(5)-C(4)	1.45	C(1)-C(2)-C(3)	120	C(6)	-0.007
C(6)-C(5)	1.42	C(13)-C(2)-C(3)	120	C(7)	-0.003
C(6)-C(1)	1.45	C(19)-C(4)-C(3)	120	C(8)	-0.012
C(7)-C(6)	1.44	C(2)-C(3)-C(4)	120	C(9)	-0.003
C(8)-C(7)	1.45	C(18)-C(19)-C(4)	119	C(10)	-0.007
C(9)-C(8)	1.45	C(16)-C(3)-C(4)	120	C(11)	-0.004
C(10)-C(9)	1.44	C(20)-C(19)-C(4)	118	C(12)	-0.004
C(10)-C(1)	1.45	C(3)-C(4)-C(5)	120	C(13)	-0.007
C(11)-C(10)	1.42	C(19)-C(4)-C(5)	120	C(14)	-0.003
C(11)-C(32)	1.45	C(4)-C(5)-C(6)	120	C(15)	-0.012
C(12)-C(11)	1.45	C(2)-C(1)-C(6)	120	C(16)	-0.003
C(13)-C(12)	1.42	C(22)-C(5)-C(6)	120	C(17)	-0.036
C(14)-C(13)	1.44	C(5)-C(6)-C(7)	120	C(18)	-0.012
C(15)-C(14)	1.45	C(1)-C(6)-C(7)	120	C(19)	-0.036
C(15)-C(16)	1.45	C(6)-C(7)-C(8)	120	C(20)	-0.04
C(16)-C(3)	1.44	C(24)-C(7)-C(8)	120	C(21)	-0.04
C(17)-C(16)	1.43	C(7)-C(8)-C(9)	120	C(22)	-0.036
C(17)-C(42)	1.44	C(27)-C(8)-C(9)	120	C(23)	-0.012
C(18)-C(17)	1.43	C(8)-C(9)-C(10)	120	C(24)	-0.036
C(19)-C(18)	1.39	C(2)-C(1)-C(10)	120	C(25)	-0.037
C(20)-C(19)	1.46	C(30)-C(9)-C(10)	120	C(26)	-0.041
C(21)-C(20)	1.36	C(32)-C(11)-C(10)	120	C(27)	-0.026
C(21)-C(22)	1.46	C(9)-C(10)-C(11)	120	C(28)	-0.041
C(22)-C(5)	1.45	C(1)-C(10)-C(11)	120	C(29)	-0.037
C(23)-C(22)	1.39	C(31)-C(32)-C(11)	119	C(30)	-0.036

C(23)-C(24)	1.43	C(33)-C(32)-C(11)	118	C(31)	-0.012
C(24)-C(7)	1.43	C(10)-C(11)-C(12)	120	C(32)	-0.036
C(25)-C(24)	1.44	C(32)-C(11)-C(12)	120	C(33)	-0.04
C(26)-C(25)	1.38	C(11)-C(12)-C(13)	120	C(34)	-0.04
C(26)-C(27)	1.44	C(35)-C(12)-C(13)	120	C(35)	-0.036
C(27)-C(8)	1.42	C(12)-C(13)-C(14)	120	C(36)	-0.012
C(28)-C(27)	1.44	C(16)-C(15)-C(14)	120	C(37)	-0.036
C(29)-C(28)	1.38	C(13)-C(14)-C(15)	120	C(38)	-0.037
C(29)-C(30)	1.44	C(3)-C(16)-C(15)	120	C(39)	-0.041
C(30)-C(9)	1.43	C(37)-C(14)-C(15)	120	C(40)	-0.026
C(31)-C(30)	1.43	C(17)-C(16)-C(15)	120	C(41)	-0.041
C(32)-C(31)	1.39	C(2)-C(3)-C(16)	120	C(42)	-0.037
C(33)-C(32)	1.46	C(42)-C(17)-C(16)	118	H(43)	+0.059
C(34)-C(33)	1.36	C(3)-C(16)-C(17)	120	H(44)	+0.058
C(34)-C(35)	1.46	C(41)-C(42)-C(17)	121	H(45)	+0.058
C(35)-C(12)	1.45	C(16)-C(17)-C(18)	119	H(46)	+0.059
C(36)-C(35)	1.39	C(42)-C(17)-C(18)	122	**H(47)**	**+0.06**
C(36)-C(37)	1.43	C(17)-C(18)-C(19)	122	H(48)	+0.06
C(37)-C(14)	1.43	C(18)-C(19)-C(20)	123	H(49)	+0.06
C(38)-C(37)	1.44	C(22)-C(21)-C(20)	122	H(50)	+0.06
C(39)-C(38)	1.38	C(19)-C(20)-C(21)	122	H(51)	+0.059
C(39)-C(40)	1.44	C(5)-C(22)-C(21)	118	H(52)	+0.058
C(40)-C(15)	1.42	C(23)-C(22)-C(21)	123	H(53)	+0.058
C(41)-C(40)	1.44	C(4)-C(5)-C(22)	120	H(54)	+0.059
C(42)-C(41)	1.38	C(24)-C(23)-C(22)	122	H(55)	+0.06
H(43)-C(18)	1.09	C(5)-C(22)-C(23)	119	H(56)	+0.06
H(44)-C(20)	1.09	C(7)-C(24)-C(23)	119	H(57)	+0.06
H(45)-C(21)	1.09	C(25)-C(24)-C(23)	122	H(58)	+0.06
H(46)-C(23)	1.09	C(6)-C(7)-C(24)	120		
H(47)-C(25)	1.09	C(7)-C(24)-C(25)	118		
H(48)-C(26)	1.09	C(27)-C(26)-C(25)	121		
H(49)-C(28)	1.09	C(24)-C(25)-C(26)	121		
H(50)-C(29)	1.09	C(8)-C(27)-C(26)	119		
H(51)-C(31)	1.09	C(28)-C(27)-C(26)	123		
H(52)-C(33)	1.09	C(7)-C(8)-C(27)	120		
H(53)-C(34)	1.09	C(8)-C(27)-C(28)	119		
H(54)-C(36)	1.09	C(30)-C(29)-C(28)	121		
H(55)-C(38)	1.09	C(27)-C(28)-C(29)	121		
H(56)-C(39)	1.09	C(9)-C(30)-C(29)	118		
H(57)-C(41)	1.09	C(31)-C(30)-C(29)	122		
H(58)-C(42)	1.09	C(8)-C(9)-C(30)	120		
		C(9)-C(30)-C(31)	119		
		C(30)-C(31)-C(32)	122		
		C(31)-C(32)-C(33)	123		
		C(35)-C(34)-C(33)	122		
		C(32)-C(33)-C(34)	122		
		C(12)-C(35)-C(34)	118		
		C(36)-C(35)-C(34)	123		
		C(11)-C(12)-C(35)	120		
		C(37)-C(36)-C(35)	122		

		C(12)-C(35)-C(36)	119		
		C(14)-C(37)-C(36)	119		
		C(38)-C(37)-C(36)	122		
		C(13)-C(14)-C(37)	120		
		C(14)-C(37)-C(38)	118		
		C(40)-C(39)-C(38)	121		
		C(37)-C(38)-C(39)	121		
		C(15)-C(40)-C(39)	119		
		C(41)-C(40)-C(39)	123		
		C(14)-C(15)-C(40)	120		
		C(16)-C(15)-C(40)	120		
		C(15)-C(40)-C(41)	119		
		C(40)-C(41)-C(42)	121		
		C(17)-C(18)-H(43)	118		
		C(19)-C(20)-H(44)	118		
		C(20)-C(21)-H(45)	120		
		C(22)-C(21)-H(45)	118		
		C(22)-C(23)-H(46)	120		
		C(24)-C(23)-H(46)	118		
		C(24)-C(25)-H(47)	119		
		C(25)-C(26)-H(48)	120		
		C(27)-C(26)-H(48)	119		
		C(27)-C(28)-H(49)	119		
		C(28)-C(29)-H(50)	120		
		C(30)-C(29)-H(50)	119		
		C(30)-C(31)-H(51)	118		
		C(32)-C(33)-H(52)	118		
		C(33)-C(34)-H(53)	120		
		C(35)-C(34)-H(53)	118		
		C(35)-C(36)-H(54)	120		
		C(37)-C(36)-H(54)	118		
		C(37)-C(38)-H(55)	119		
		C(38)-C(39)-H(56)	120		
		C(40)-C(39)-H(56)	119		
		C(40)-C(41)-H(57)	119		
		C(41)-C(42)-H(58)	120		

Список литературы

1. A. A. Granovsky: Firefly. Version 8, 2013. http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html.
2. M. W. Schmidt, K. K. Baldridge, J. A. Boatz et al.: General Atomic and Molecular Electronic Structure System. J Comput Chem, **14**, 1347 (1993).
3. B. M. Bode, M. S. Gordon: MacMolPlt: a Graphical User Interface for GAMESS. J Mol Graphics Mod, **16**, 133 (1998).
4. Babkin V.A., Fedunov R.G., Minsker K.S. et al. Oxidation communication, 2002,№1, 25, 21-47.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ ХРИЗЕНА МЕТОДОМ PM3 В РАМКАХ НЕЛИНЕЙНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МОДЕЛИ ГРАФЕНА

Андреев Д.С., Игнатов А.В., Степанов Н.С.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы хризена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила (pKa= 40). Установлено, что молекула хризена относится к классу очень слабых H-кислот (pKa>14).

Ключевые слова: *квантово-химический расчет, метод PM3, графен, хризен, кислотная сила.*

Summary

The first quantum-chemical calculation of the molecule chrysene by the method PM3 was performed with optimization of the geometry for all parameters by a standard gradient method. The optimized geometric and electronic structure of chrysene was obtained and its acid strength was theoretically evaluated (pKa = 40). It was found that the molecule belongs to the class of very weak H-acids (pKa> 14).

Keywords*: quantum-chemical calculation, PM3, graphene, chrysene, acid strength*

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы хризена [1] в рамках нелинейной молекулярной модели графена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в программу Firefly [2], который частично основан на исходном коде GAMESS (US) [3], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [4].

Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекулы хризена получены методом PM3 и показаны на рис. 1 и в табл.1. Используя формулу для PM3 — pKa=51.52 - 103.867q_{max}^{H+} [5-7] (q_{max}^{H+}= +0,11, см. табл. 1), где q_{max}^{H+} — максимальный заряд на атоме водорода, pKa — универсальный показатель кислотности, находим значение кислотной силы pKa=40.

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы хризена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила (pKa=40.1). Установлено, что молекула хризена относится к классу очень слабых H-кислот (pKa>14).

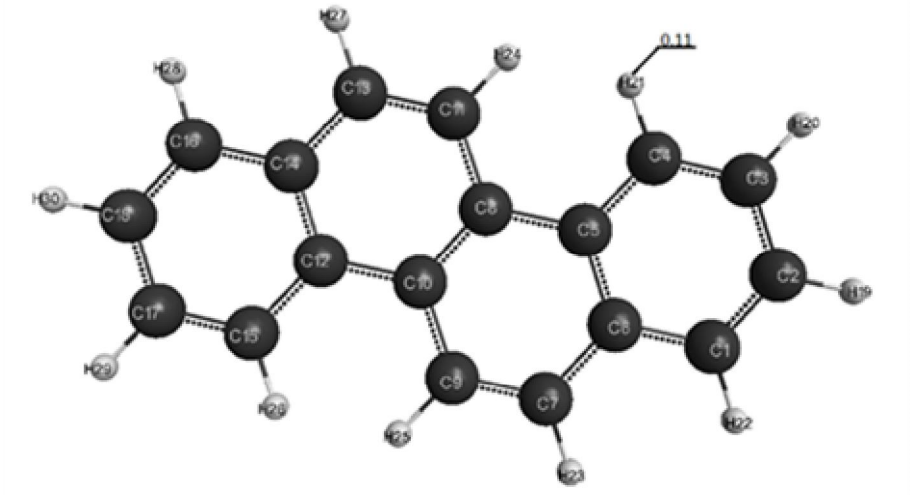

Рис.1. Геометрическое и электронное строение молекулы хризена

(E_0= -223458 кДж/моль, $E_{эл}$= -1519089 кДж/моль)

Таблица 1

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы хризена, полученные методом PM3.

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(1)-C(2)	1.37	C(1)-C(2)-C(3)	120.17	C(1)	-0.09
C(2)-C(3)	1.41	C(2)-C(3)-C(4)	120.29	C(2)	-0.10
C(3)-C(4)	1.37	C(3)-C(4)-C(5)	120.68	C(3)	-0.10
C(4)-C(5)	1.41	C(4)-C(5)-C(6)	118.85	C(4)	-0.10
C(5)-C(6)	1.41	C(5)-C(6)-C(1)	119.67	C(5)	-0.02
C(6)-C(7)	1.43	C(6)-C(1)-C(2)	120.33	C(6)	-0.04
C(7)-C(9)	1.36	C(5)-C(6)-C(7)	119.63	C(7)	-0.08
C(9)-C(10)	1.43	C(6)-C(7)-C(9)	120.53	C(8)	-0.02
C(10)-C(8)	1.40	C(7)-C(9)-C(10)	121.11	C(9)	-0.10
C(8)-C(5)	1.44	C(9)-C(10)-C(8)	119.60	C(10)	-0.02
C(10)-C(12)	1.44	C(10)-C(8)-C(5)	119.71	C(11)	-0.10
C(12)-C(14)	1.41	C(8)-C(5)-C(6)	119.41	C(12)	-0.02
C(14)-C(13)	1.43	C(8)-C(10)-C(12)	119.72	C(13)	-0.09
C(13)-C(11)	1.36	C(10)-C(12)-C(14)	119.41	C(14)	-0.04
C(11)-C(8)	1.43	C(12)-C(14)-C(13)	119.63	C(15)	-0.10
C(12)-C(15)	1.41	C(14)-C(13)-C(11)	120.55	C(16)	-0.09
C(15)-C(17)	1.37	C(13)-C(11)-C(8)	121.11	C(17)	-0.10
C(17)-C(18)	1.41	C(11)-C(8)-C(10)	119.59	C(18)	-0.10
C(18)-C(16)	1.37	C(14)-C(12)-C(15)	118.85	H(19)	0.10
C(16)-C(14)	1.41	C(12)-C(15)-C(17)	120.69	H(20)	0.10
C(1)-H(22)	1.10	C(15)-C(17)-C(18)	120.29	H(21)	0.11
C(2)-H(19)	1.09	C(17)-C(18)-C(16)	120.17	H(22)	0.10
C(3)-H(20)	1.09	C(18)-C(16)-C(14)	120.33	H(23)	0.10
C(4)-H(21)	1.10	C(16)-C(14)-C(12)	119.67	H(24)	0.11
C(7)-H(23)	1.10	C(6)-C(1)-(H22)	119.05	H(25)	0.11

C(9)-H(25)	1.10	C(1)-C(2)-H(22)	120.62	H(26)	0.11
C(11)-H(24)	1.10	C(1)-C(2)-H(19)	120.47	H(27)	0.10
C(13)-H(27)	1.10	C(2)-C(3)-H(19)	119.36	H(28)	0.10
C(15)-H(26)	1.10	C(2)-C(3)-H(20)	119.34	H(29)	0.10
C(16)-H(28)	1.10	C(4)-C(3)-H(20)	120.37	H(30)	0.10
C(17)-H(29)	1.09	C(4)-C(3)-H(21)	120.99		
C(18)-H(30)	1.09	C(5)-C(4)-H(21)	118.33		
		C(6)-C(7)-H(23)	118.58		
		C(7)-C(9)-H(23)	120.89		
		C(7)-C(9)-H(25)	121.16		
		C(9)-C(10)-H(25)	117.73		
		C(8)-C(11)-H(24)	117.75		
		C(11)-C(13)-H(24)	121.15		
		C(11)-C(13)-H(27)	120.91		
		C(13)-C(14)-H(27)	118.54		
		C(12)-C(15)-H(26)	118.32		
		C(15)-C(17)-H(26)	120.99		
		C(15)-C(17)-H(29)	120.37		
		C(17)-C(18)-H(29)	119.34		
		C(17)-C(18)-H(30)	119.37		
		C(16)-C(18)-H(30)	120.46		
		C(14)-C(16)-H(28)	119.01		
		C(16)-C(18)-H(28)	120.66		

Список литературы

1. National Center for Biotechnology Information. PubChem Compound Summary for CID 9171, Chrysene. https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Chrysene. Accessed Oct. 31, 2020.
2. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
3. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363
4. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
5. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Дмитриев В.Ю., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.В., Заиков Г.Е. Квантово-химический расчет оптической системы SiO_2-Na_2O в рамках молекулярной модели. // Вестник Технологического университета. 2015. Т. 18. № 1. С. 31-33.
6. Бабкин В.А., Дмитриев В.Ю., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.Н., Храмогин Д.А., Фомичёв В.Т., Заиков Г.Е. Конформер оптической системы диоксид кремния – $4Na_2O$.// Вестник Технологического университета. 2019. Т. 22. № 1. С. 8-10.
7. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Петров В.В., Игнатов А.В., Титова Е.С., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Денисюк А.Р. Об электронной структуре мономеров катионной полимеризации 2-метилиндена и его производных. // Известия Волгоградского государственного технического университета. 2018. № 12 (222). С. 13-21.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ ПИРЕНА МЕТОДОМ PM3 В РАМКАХ НЕЛИНЕЙНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МОДЕЛИ ГРАФЕНА

Андреев Д.С., Игнатов А.В., Степанов Н.С.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы пирена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила (pKa= 40). Установлено, что молекула пирена относится к классу очень слабых H-кислот (pKa>14).

Ключевые слова: *квантово-химический расчет, метод PM3, пирен, кислотная сила.*

Summary

The first quantum-chemical calculation of the molecule pyrene by the method pm3 was performed with optimization of the geometry for all parameters by a standard gradient method. The optimized geometric and electronic structure of pyrene was obtained and its acid strength was theoretically evaluated (pKa = 40). It was found that the molecule belongs to the class of very weak H-acids (pKa> 14).

Keywords*: quantum-chemical calculation, PM3, graphene, pyrene, acid strength*

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы пирена [1] в рамках нелинейной молекулярной модели графена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в программу Firefly [2], который частично основан на исходном коде GAMESS (US) [3], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [4].

Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекулы пирена получены методом PM3 и показаны на рис. 1 и в табл.1. Используя формулу для DFT:PBE0/3-21G — pKa=51.52 - 103.867q_{max}^{H+} [5-7] (q_{max}^{H+}= +0,11, см. табл. 1), где q_{max}^{H+} — максимальный заряд на атоме водорода, pKa — универсальный показатель кислотности, находим значение кислотной силы pKa=40.

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы пирена методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила (pKa=40.1). Установлено, что молекула пирена относится к классу очень слабых H-кислот (pKa>14).

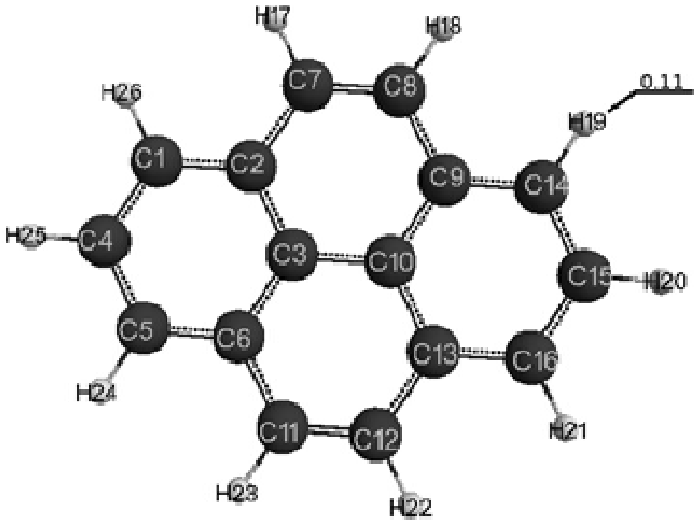

Рис.1. Геометрическое и электронное строение молекулы пирена (E_0= -197638 кДж/моль, $E_{эл}$= -1281242 кДж/моль)

Таблица 1.

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы пирена, полученные методом PM3.

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(1)-C(2)	1.40	C(1)-C(2)-C(3)	119.31	C(1)	-0.09
C(2)-C(3)	1.41	C(2)-C(3)-C(6)	120.11	C(2)	-0.03
C(3)-C(6)	1.41	C(3)-C(6)-C(5)	119.30	C(3)	-0.01
C(6)-C(5)	1.40	C(6)-C(5)-C(4)	120.23	C(4)	-0.10
C(5)-C(4)	1.39	C(5)-C(4)-C(1)	120.83	C(5)	-0.09
C(4)-C(1)	1.39	C(4)-C(1)-C(2)	120.22	C(6)	-0.03
C(2)-C(7)	1.44	C(2)-C(7)-C(8)	121.13	C(7)	-0.09
C(7)-C(8)	1.35	C(7)-C(8)-C(9)	121.13	C(8)	-0.09
C(8)-C(9)	1.44	C(8)-C(9)-C(10)	119.91	C(9)	-0.03
C(9)-C(10)	1.41	C(9)-C(10)-C(3)	119.96	C(10)	-0.01
C(10)-C(3)	1.43	C(10)-C(3)-C(2)	119.94	C(11)	-0.09
C(3)-C(2)	1.41	C(3)-C(2)-C(7)	118.92	C(12)	-0.09
C(2)-C(7)	1.44	C(9)-C(14)-C(15)	120.25	C(13)	-0.03
C(9)-C(14)	1.39	C(14)-C(15)-C(16)	120.81	C(14)	-0.09
C(14)-C(15)	1.39	C(15)-C(16)-C(13)	120.21	C(15)	-0.10
C(15)-C(16)	1.39	C(16)-C(13)-C(10)	119.33	C(16)	-0.09
C(16)-C(13)	1.39	C(13)-C(10)-C(9)	120.10	H(17)	0.10
C(13)-C(10)	1.41	C(10)-C(9)-C(14)	119.29	H(18)	0.10
C(10)C(9)	1.41	C(6)-C(3)-C(10)	119.95	H(19)	0.11
C(3)-C(10)	1.43	C(3)-C(10)-C(13)	119.84	H(20)	0.10
C(10)-C(13)	1.41	C(10)-C(13)-C(12)	118.92	H(21)	0.11
C(13)-C(12)	1.44	C(13)-C(12)-C(11)	121.13	H(22)	0.10

C(12)-C(11)	1.35	C(12)-C(11)-C(6)	121.13	H(23)	0.10
C(11)-C(6)	1.44	C(11)-C(6)-C(3)	118.92	H(24)	0.11
C(6)-C(3)	1.41	H(26)-C(1)-C(2)	119.69	H(25)	0.10
C(1)-H(26)	1.10	H(26)-C(1)-C(4)	120.09	H(26)	0.11
C(4)-H(25)	1.10	H(25)-C(1)-C(2)	119.56		
C(5)-H(24)	1.10	H(25)-C(4)-C(5)	119.61		
C(11)-H(23)	1.10	H(24)-C(4)-C(5)	120.08		
C(12)-H(22)	1.10	H(24)-C(5)-C(6)	119.69		
C(16)-H(21)	1.10	H(23)-C(11)-C(6)	117.89		
C(15)-H(20)	1.10	H(23)-C(11)-C(12)	120.98		
C(14)-H(19)	1.10	H(22)-C(11)-C(22)	121.02		
C(8)-H(18)	1.10	H(22)-C(12)-C(13)	117.85		
C(7)-H(17)	1.10	H(21)-C(13)-C(16)	119.66		
		H(21)-C(16)-C(15)	120.12		
		H(20)-C(16)-C(15)	119.59		
		H(20)-C(15)-C(14)	119.60		
		H(19)-C(15)-C(14)	120.09		
		H(19)-C(14)-C(9)	119.65		
		H(18)-C(8)-C(9)	117.88		
		H(18)-C(8)-C(7)	120.99		
		H(17)-C(7)-C(8)	121.03		
		H(17)-C(7)-C(2)	117.84		

Список литературы

1. National Center for Biotechnology Information. PubChem Compound Summary for CID 31423, Pyrene. https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Pyrene. Accessed Oct. 31, 2020..
2. Alex A. Granovsky. Firefly version 8. – 2013. // http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
3. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. –1993, –Vol.14, –PP.1347-1363
4. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
5. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Дмитриев В.Ю., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.В., Заиков Г.Е. Квантово-химический расчет оптической системы SiO_2-Na_2O в рамках молекулярной модели. // Вестник Технологического университета. 2015. Т. 18. № 1. С. 31-33.
6. Бабкин В.А., Дмитриев В.Ю., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.Н., Храмогин Д.А., Фомичёв В.Т., Заиков Г.Е. Конформер оптической системы диоксид кремния – $4Na_2O$.// Вестник Технологического университета. 2019. Т. 22. № 1. С. 8-10.
7. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Петров В.В., Игнатов А.В. и др. Об электронной структуре мономеров катионной полимеризации 2-метилиндена и его производных. // Известия Волгоградского государственного технического университета. 2018. № 12 (222). С. 13-21.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ ГРАФЕНА ИЗ 12 ГЕКСАГОНОВ МЕТОДОМ PM3

Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Клинов Д.А.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы графена из 12 гексагонов методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила (pKa= 23). Установлено, что молекула графена из 12 гексагонов относится к классу очень слабых H-кислот (pKa>14).

Abstracts

The first quantum-chemical calculation of the molecule graphene from 12 hexagons by the method PM3 was performed with optimization of the geometry for all parameters by a standard gradient method. The optimized geometric and electronic structure of graphene from 12 hexagons was obtained and its acid strength was theoretically evaluated (pKa = 23). It was found that the molecule belongs to the class of very weak H-acids (pKa> 14).

Ключевые слова: *квантово-химический расчет, метод PM3, графен из 12 гексагонов, кислотная сила.*

Keywords*: quantum-chemical calculation, PM3, graphene from 12 hexagons, acid strength*

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы графена из 12 гексагонов методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в программу Firefly [1], который частично основан на исходном коде GAMESS (US) [2], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [3].

Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекулы графена из 12 гексагонов получены методом PM3 и показаны на рис. 1 и в табл.1. Используя формулу для PM3 [4-6] — pKa=42.936 - $165.11q_{max}^{H+}$ (q_{max}^{H+}= +0.1184 см. табл. 1), где q_{max}^{H+} — максимальный заряд на атоме водорода, pKa — универсальный показатель кислотности, находим значение кислотной силы pKa=23.

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы графена из 12 гексагонов методом PM3 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила

(pKa=23). Установлено, что молекула графена из 12 гексагонов относится к классу очень слабых Н-кислот (pKa>14).

Кроме того, была оценена энергия запрещенной зоны E_x=7,30, которая свидетельствует о том, что изучаемая молекула графена из 7 гексагонов относится к диэлектрикам в связи с тем, что E_x>2.

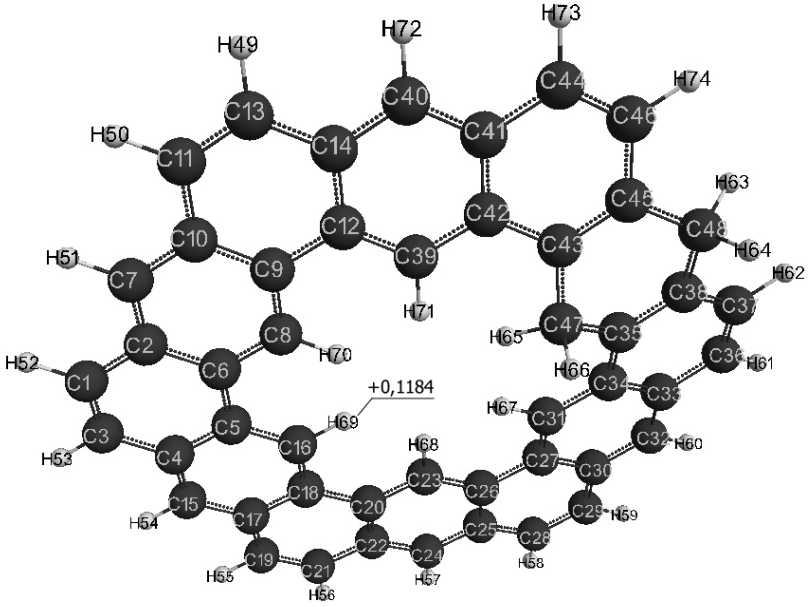

Рис.1. Геометрическое и электронное строение молекулы графена из 12 гексагонов (E_0= −587028 кДж/моль, $E_{эл}$= −6732377 кДж/моль)

Таблица 1

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы графена из 12 гексагонов, полученные методом PM3.

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(1)-C(2)	1.44	C(1)-C(2)-C(6)	119	C(1)	-0.0847
C(2)-C(6)	1.41	C(2)-C(6)-C(5)	120	C(2)	-0.0332
C(6)-C(5)	1.45	C(6)-C(5)-C(4)	120	C(3)	-0.0851
C(5)-C(4)	1.41	C(5)-C(4)-C(3)	119	C(4)	-0.0328
C(4)-C(3)	1.44	C(4)-C(3)-C(1)	121	C(5)	-0.0138
C(3)-C(1)	1.35	C(3)-C(1)-C(2)	121	C(6)	-0.0140
C(7)-C(10)	1.40	C(7)-C(10)-C(9)	120	C(7)	-0.0719
C(10)-C(9)	1.41	C(10)-C(9)-C(8)	119	C(8)	-0.1023
C(9)-C(8)	1.39	C(9)-C(8)-C(6)	121	C(9)	-0.0137
C(8)-C(6)	1.40	C(8)-C(6)-C(2)	120	C(10)	-0.0322
C(2)-C(7)	1.40	C(6)-C(2)-C(7)	119	C(11)	-0.0868
C(11)-C(13)	1.35	C(2)-C(7)-C(10)	121	C(12)	-0.0107
C(13)-C(14)	1.45	C(11)-C(13)-C(14)	122	C(13)	-0.0841
C(14)-C(12)	1.42	C(13)-C(14)-C(12)	119	C(14)	-0.0360
C(12)-C(9)	1.45	C(14)-C(12)-C(9)	119	C(15)	-0.0710

C(10)-C(11)	1.44	C(12)-C(9)-C(10)	120	C(16)	-0.1030
C(14)-C(40)	1.39	C(9)-C(10)-C(11)	119	C(17)	-0.0327
C(40)-C(41)	1.41	C(10)-C(11)-C(13)	121	C(18)	-0.0137
C(41)-C(42)	1.41	C(14)-C(40)-C(41)	121	C(19)	-0.0851
C(42)-C(39)	1.41	C(40)-C(41)-C(42)	120	C(20)	-0.0140
C(39)-C(12)	1.38	C(41)-C(42)-C(39)	119	C(21)	-0.0846
C(41)-C(44)	1.43	C(42)-C(39)-C(12)	121	C(22)	-0.0331
C(44)-C(46)	1.36	C(39)-C(12)-C(14)	120	C(23)	-0.1024
C(46)-C(45)	1.42	C(12)-C(14)-C(40)	120	C(24)	-0.0719
C(45)-C(43)	1.37	C(41)-C(44)-C(46)	121	C(25)	-0.0322
C(43)-C(42)	1.44	C(44)-C(46)-C(45)	121	C(26)	-0.0137
C(45)-C(48)	1.49	C(46)-C(45)-C(43)	120	C(27)	-0.0108
C(48)-C(38)	1.49	C(45)-C(43)-C(42)	120	C(28)	-0.0867
C(38)-C(35)	1.37	C(43)-C(42)-C(41)	120	C(29)	-0.0840
C(35)-C(47)	1.49	C(42)-C(41)-C(44)	119	C(30)	-0.0359
C(47)-C(43)	1.49	C(43)-C(45)-C(48)	121	C(31)	-0.1042
C(38)-C(37)	1.43	C(45)-C(48)-C(38)	114	C(32)	-0.0702
C(37)-C(36)	1.36	C(48)-C(38)-C(35)	121	C(33)	-0.0367
C(36)-C(33)	1.43	C(38)-C(35)-C(47)	120	C(34)	-0.0151
C(33)-C(34)	1.41	C(35)-C(47)-C(43)	114	C(35)	-0.0567
C(34)-C(35)	1.44	C(47)-C(43)-C(45)	120	C(36)	-0.0886
C(31)-C(34)	1.41	C(35)-C(38)-C(37)	120	C(37)	-0.0925
C(33)-C(32)	1.41	C(38)-C(37)-C(36)	121	C(38)	-0.0711
C(32)-C(30)	1.39	C(37)-C(36)-C(33)	121	C(39)	-0.1042
C(30)-C(27)	1.42	C(36)-C(33)-C(34)	119	C(40)	-0.0703
C(27)-C(31)	1.38	C(33)-C(34)-C(35)	119	C(41)	-0.0368
C(26)-C(27)	1.45	C(34)-C(35)-C(38)	120	C(42)	-0.0151
C(30)-C(29)	1.45	C(31)-C(34)-C(33)	119	C(43)	-0.0567
C(29)-C(28)	1.35	C(34)-C(33)-C(32)	120	C(44)	-0.0886
C(28)-C(25)	1.45	C(33)-C(32)-C(30)	121	C(45)	-0.0710
C(25)-C(26)	1.41	C(32)-C(30)-C(27)	120	C(46)	-0.0925
C(20)-C(23)	1.40	C(30)-C(27)-C(31)	120	C(47)	-0.0183
C(23)-C(26)	1.39	C(27)-C(31)-C(34)	121	C(48)	+0.0003
C(25)-C(24)	1.40	C(26)-C(27)-C(30)	119	H(49)	+0.1043
C(24)-C(22)	1.40	C(27)-C(30)-C(29)	119	H(50)	+0.1048
C(22)-C(20)	1.41	C(30)-C(29)-C(28)	122	H(51)	+0.1083
C(17)-C(18)	1.41	C(29)-C(28)-C(25)	121	H(52)	+0.1046
C(18)-C(20)	1.45	C(28)-C(25)-C(26)	119	H(53)	+0.1047
C(22)-C(21)	1.44	C(25)-C(26)-C(27)	120	H(54)	+0.1082
C(21)-C(19)	1.35	C(20)-C(23)-C(26)	121	H(55)	+0.1047
C(19)-C(17)	1.44	C(23)-C(26)-C(25)	119	H(56)	+0.1047
C(5)-C(16)	1.39	C(26)-C(25)-C(24)	120	H(57)	+0.1083
C(16)-C(18)	1.39	C(25)-C(24)-C(22)	121	H(58)	+0.1048
C(17)-C(15)	1.40	C(24)-C(22)-C(20)	119	H(59)	+0.1043
C(15)-C(4)	1.40	C(22)-C(20)-C(23)	120	H(60)	+0.1080
C(1)-H(52)	1.10	C(17)-C(18)-C(20)	120	H(61)	+0.1058
C(7)-H(51)	1.10	C(18)-C(20)-C(22)	120	H(62)	+0.1052
C(11)-H(50)	1.10	C(20)-C(22)-C(21)	119	H(63)	+0.0649
C(13)-H(49)	1.10	C(22)-C(21)-C(19)	121	H(64)	+0.0679
C(40)-H(72)	1.10	C(21)-C(19)-C(17)	121	H(65)	+0.0716

C(44)-H(73)	1.10	C(19)-C(17)-C(18)	119	H(66)	+0.0726
C(46)-H(74)	1.10	C(4)-C(5)-C(16)	119	H(67)	+0.1171
C(48)-H(63)	1.11	C(5)-C(16)-C(18)	121	H(68)	+0.1177
C(37)-H(62)	1.10	C(16)-C(18)-C(17)	119	**H(69)**	+0.1184
C(36)-H(61)	1.10	C(18)-C(17)-C(15)	119	H(70)	+0.1177
C(32)-H(60)	1.10	C(17)-C(15)-C(4)	121	H(71)	+0.1172
C(29)-H(59)	1.10	C(15)-C(4)-C(5)	119	H(72)	+0.1081
C(28)-H(58)	1.10	C(1)-C(2)-C(7)	122	H(73)	+0.1058
C(24)-H(57)	1.10	C(7)-C(10)-C(11)	121	H(74)	+0.1051
C(21)-H(56)	1.10	C(13)-C(14)-C(40)	122		
C(19)-H(55)	1.10	C(40)-C(41)-C(44)	121		
C(15)-H(54)	1.10	C(46)-C(45)-C(48)	119		
C(3)-H(53)	1.10	C(48)-C(38)-C(37)	119		
C(8)-H(70)	1.11	C(36)-C(33)-C(32)	121		
C(39)-H(71)	1.11	C(32)-C(30)-C(29)	122		
C(47)-H(65)	1.12	C(28)-C(25)-C(24)	121		
C(47)-H(66)	1.11	C(24)-C(22)-C(21)	122		
C(31)-H(67)	1.11	C(19)-C(17)-C(15)	122		
C(23)-H(68)	1.11	C(15)-C(4)-C(3)	122		
C(16)-H(69)	1.11	C(5)-C(6)-C(8)	121		
C(48)-H(64)	1.11	C(8)-C(9)-C(12)	121		
		C(9)-C(12)-C(39)	121		
		C(39)-C(42)-C(43)	122		
		C(42)-C(43)-C(47)	120		
		C(47)-C(35)-C(34)	120		
		C(35)-C(34)-C(31)	122		
		C(31)-C(27)-C(26)	121		
		C(27)-C(26)-C(23)	121		
		C(23)-C(20)-C(18)	121		
		C(20)-C(18)-C(16)	121		
		C(16)-C(5)-C(6)	121		
		C(3)-C(1)-H(52)	121		
		C(2)-C(1)-H(52)	118		
		C(2)-C(7)-H(51)	120		
		C(10)-C(7)-H(51)	120		
		C(10)-C(11)-H(50)	118		
		C(13)-C(11)-H(50)	121		
		C(11)-C(13)-H(49)	121		
		C(14)-C(13)-H(49)	118		
		C(14)-C(40)-H(72)	120		
		C(41)-C(40)-H(72)	119		
		C(41)-C(44)-H(73)	119		
		C(46)-C(44)-H(73)	121		
		C(44)-C(46)-H(74)	121		
		C(45)-C(46)-H(74)	119		
		C(45)-C(48)-H(63)	110		
		C(38)-C(48)-H(63)	110		
		C(45)-C(48)-H(64)	109		
		C(38)-C(48)-H(64)	109		
		C(38)-C(37)-H(62)	119		

		C(36)-C(37)-H(62)	121		
		C(37)-C(36)-H(61)	121		
		C(33)-C(36)-H(61)	119		
		C(33)-C(32)-H(60)	119		
		C(30)-C(32)-H(60)	120		
		C(30)-C(29)-H(59)	118		
		C(28)-C(29)-H(59)	121		
		C(29)-C(28)-H(58)	121		
		C(25)-C(28)-H(58)	118		
		C(25)-C(24)-H(57)	120		
		C(22)-C(24)-H(57)	120		
		C(22)-C(21)-H(56)	118		
		C(19)-C(21)-H(56)	121		
		C(21)-C(19)-H(55)	121		
		C(17)-C(19)-H(55)	118		
		C(17)-C(15)-H(54)	120		
		C(4)-C(15)-H(54)	120		
		C(4)-C(3)-H(53)	118		
		C(1)-C(3)-H(53)	121		
		C(35)-C(47)-H(65)	111		
		C(43)-C(47)-H(65)	111		
		C(35)-C(47)-H(66)	108		
		C(43)-C(47)-H(66)	108		
		C(34)-C(31)-H(67)	119		
		C(27)-C(31)-H(67)	120		
		C(26)-C(23)-H(68)	119		
		C(20)-C(23)-H(68)	120		
		C(18)-C(16)-H(69)	119		
		C(5)-C(16)-H(69)	119		
		C(6)-C(8)-H(70)	120		
		C(9)-C(8)-H(70)	119		
		C(12)-C(39)-H(71)	120		
		C(42)-C(39)-H(71)	119		

Список литературы

1. Alex A. Granovsky. Firefly version 8, 2013 // URL: http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
2. Schmidt, M.W., Baldridge, K.K., et al. General Atomic and Molecular Electronic Structure System // Journal of Computational Chemistry. - 1993. – Vol. 14. - pp. 1347-1363
3. Bode, B.M. and Gordon, M.S. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS // Journal of Molecular Graphics. - 1998. – Vol. 16. - pp. 133-138.
4. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Дмитриев В.Ю., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.В., Заиков Г.Е. Квантово-химический расчет оптической системы SiO_2-Na_2O в рамках молекулярной модели. // Вестник Технологического университета. 2015. Т. 18. № 1. С. 31-33.
5. Бабкин В.А., Дмитриев В.Ю., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Гулюкин М.Н., Белоусов А.С., Игнатов А.Н., Храмогин Д.А., Фомичёв В.Т., Заиков Г.Е. Конформер

оптической системы диоксид кремния – $4Na_2O$.// Вестник Технологического университета. 2019. Т. 22. № 1. С. 8-10.
6. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Петров В.В., Игнатов А.В., Титова Е.С., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Денисюк А.Р. Об электронной структуре мономеров катионной полимеризации 2-метилиндена и его производных. // Известия Волгоградского государственного технического университета. 2018. № 12 (222). С. 13-21.

ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ПОВЕРХНОСТЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АКВАКОМПЛЕКСА ХЛОРИДА АЛЮМИНИЯ С 2,3,3-ТРИМЕТИЛБУТЕНОМ-1 В ГЕПТАНЕ МЕТОДОМ DFT

Андреев Д.С., Игнатов А.В., Захаров Д.С.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Впервые выполнено квантово-химическое изучение механизма инициирования катионной полимеризации 2,3,3-триметилбутена-1 в присутствии комплексного катализатора хлорид алюминия – вода в гептане стехиометрического состава 1:1:1:1 методом DFT 3-21g через расчёт потенциальной поверхности взаимодействия катализатора и мономера. Показано, что эта реакция носит барьерный характер и эндотермична. Энергия активации равна 78 кДж/моль, тепловой эффект равен -78 кДж/моль.

Abstract

For the first time, a quantum-chemical study of the mechanism of initiation of the cationic polymerization of 2,3,3-trimethylbutene-1 in the presence of a complex catalyst aluminum chloride - water in heptane of stoichiometric composition 1: 1: 1: 1 by the DFT 3-21g method was carried out through the calculation of the potential interaction surface of the catalyst and monomer. It was shown that this reaction has a barrier character and is endothermic. The activation energy of the reaction is 78 kJ/mol, the thermal effect is -78 kJ/mol.

Ключевые слова: изоолефин, 2,3,3-триметилбутен-1, аквакомплекс хлорида алюминия, гептан, механизм инициирования, метод DFT, энергия активации, тепловой эффект.

Keywords: isoolefin, 2,3,3-trimethylbutene-1, chloride aluminium aquacomplex, heptane, initiation mechanism, DFT method, activation energy, thermal reaction effect.

Введение

До настоящего времени остаётся ряд важных фундаментальных вопросов, касающихся механизмов элементарных актов полимеризации этого олефина. И, в частности, до настоящего времени неизвестны механизмы инициирования, роста и обрыва 2,3,3-триметилбутена-1 в присутствии комплексного катализатора хлорид алюминия – вода в гептане стехиометрического состава 1:1:1:1. Поэтому целью настоящей работы является изучение механизма инициирования изоолефина 2,3,3-триметилбутена-1 этим

комплексным катализатором через расчёт поверхности взаимодействия этого мономера и инициатора в многомерном (63-мерном) гильбертовом пространстве.

Методическая часть

Изучался механизм инициирования катионной полимеризации 2,3,3-триметилбутена-1 в присутствиии комплексного катализатора в растворителе (гептане) через построение потенциальной поверхности взаимодействия катализатора $AlCl_3 \cdot H_2O$ с мономером квантовохимическим методом DFT PBE0/3-21G [1] с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в Firefly [2-3]. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в газовой фазе в рамках молекулярной модели. Механизм инициирования п-изопропилстирола выполнялся по методике, достаточно подробно описанной в работе [4] и использовавшейся в работе [5]. Для визульного представления молекулы использовалась программа MacMolPlt [6].

Результаты расчетов

Квантовохимическая информация реакции взаимодействия изоолефина 2,3,3-триметилбутена-1 и комплексного катализатора $AlCl_3 \cdot H_2O$ в гептане стехиометрического состава 1:1:1:1 представлена на рис. 1-4. На рис. 1 представлено геометрическое и электронное строение исходной модели. На рис. 2 показан результат реакции взаимодействия комплексного катализатора. На рис. 3 показан представлен энергетический профиль реакции взаимодействия изоолефина с комплексным катализатором. На рис. 4 – изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции взаимодействия.

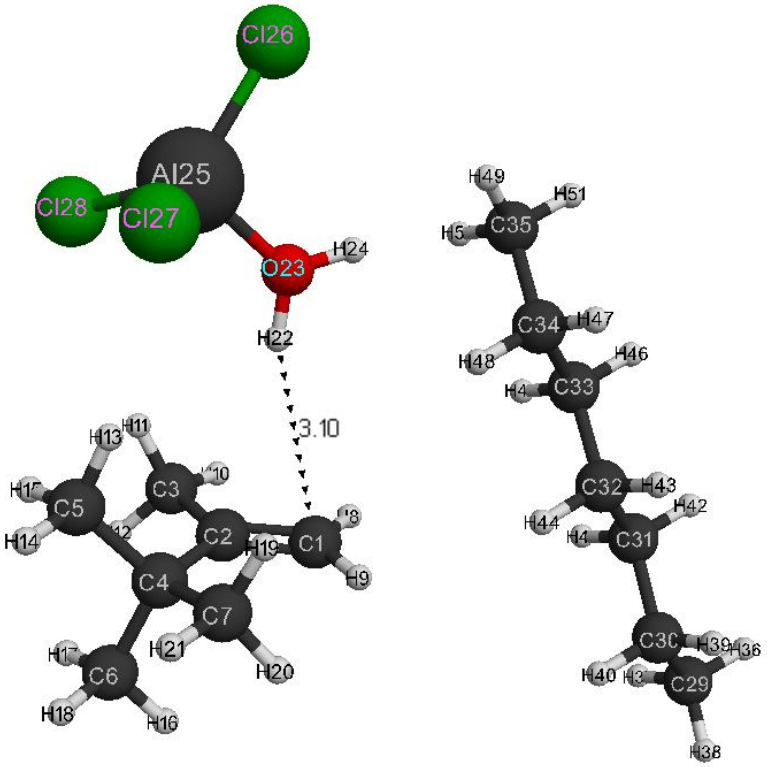

Рис. 1. Исходная модель реакции взаимодействия 2,3,3-триметилбутена-1 и комплексного катализатора $AlCl_3 \cdot H_2O$ в гептане стехиометрического состава 1:1:1:1.

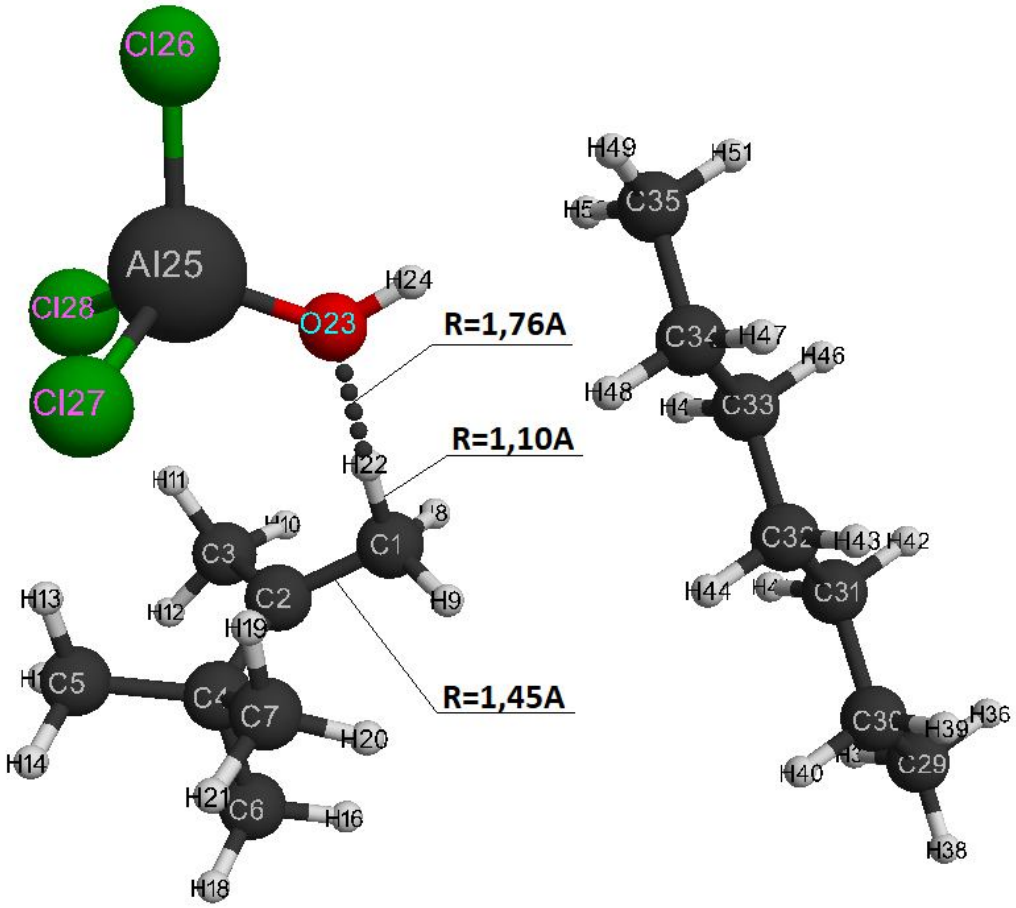

Рис. 2. Результат реакции взаимодействия 2,3,3-триметилбутена-1 и комплексного катализатора $AlCl_3 \cdot H_2O$ в гептане стехиометрического состава 1:1:1:1.

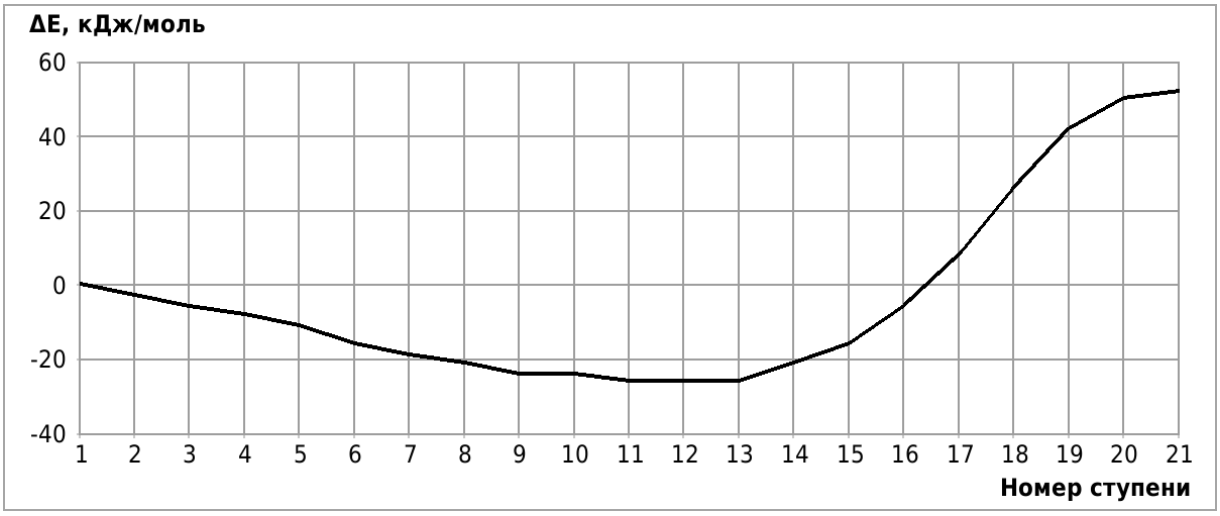

Рис. 3. Изменение общей энергии вдоль пути изучаемой реакции взаимодействия 2,3,3-триметилбутена-1 и комплексного катализатора $AlCl_3 \cdot H_2O$ в гептане стехиометрического состава 1:1:1:1.

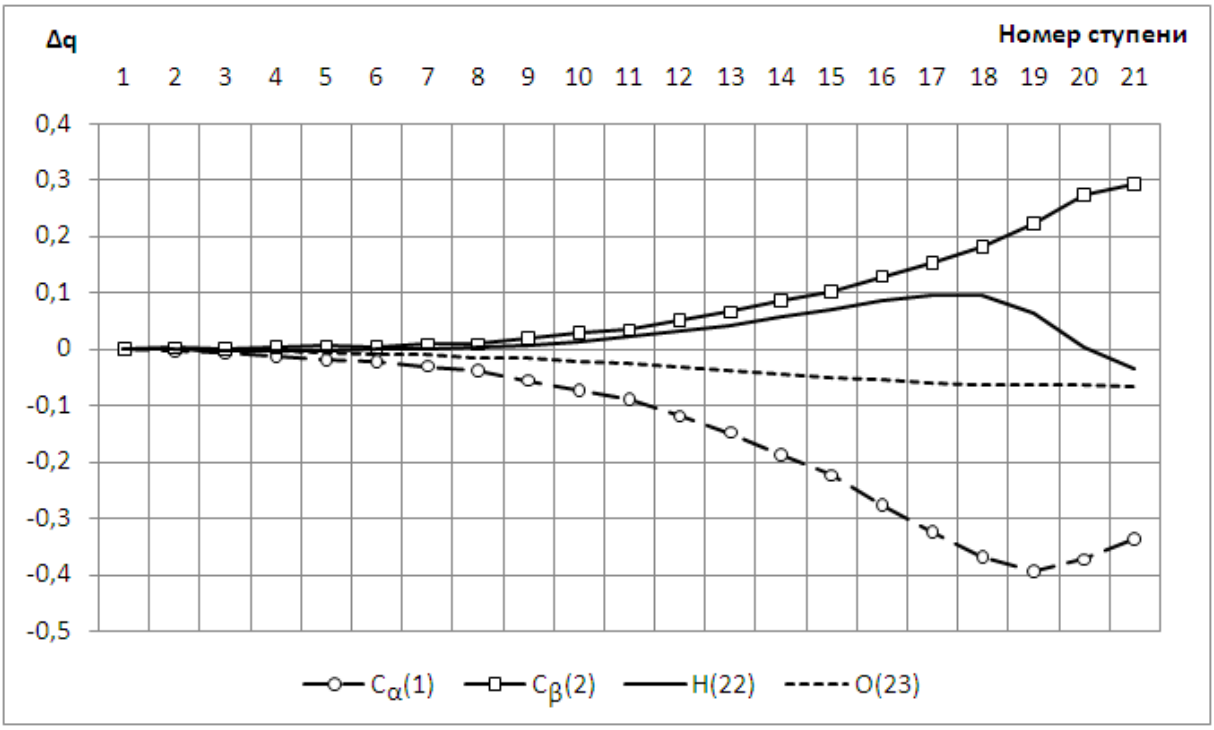

Рис. 4. Изменение зарядов на некоторых атомах вдоль пути реакции взаимодействия 2,3,3-триметилбутена-1 и комплексного катализатора $AlCl_3 \cdot H_2O$ в гептане стехиометрического состава 1:1:1:1.

Выводы

Нами впервые выполнен квантово-химический расчёт механизма инициирования катионной полимеризации изоолефина 2,3,3-триметилбутена-1 в присутствии комплексного катализатора хлорид алюминия – вода в гептане стехиометрического состава 1:1:1:1 DFT PBE0/3-21G с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом на каждом шаге взаимодействия. Установлено, что эта реакция носит барьерный характер, эндоотермична и представляет собой согласованный процесс – S_N2-нуклеофильное замещение. Энергия активации при атаке инициирующей частицы на α-углеродный атом изоолефина –78 кДж/моль, тепловой эффект реакции – -78 кДж/моль.

Список литературы

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. - М.: Бином, 2010. - 496 с.
2. Alex A. Granovsky. Firefly version 8, 2013 // URL: http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
3. Schmidt, M.W., Baldridge, K.K., et al. General Atomic and Molecular Electronic Structure System // Journal of Computational Chemistry. - 1993. – Vol. 14. - pp. 1347-1363.
4. Андреев Д.С., Бабкин В.А., Заиков Г.Е. Квантово-химическое изучение механизма инициирования изоолефина о-метилстирол в присутствии аквакомплекса хлорида алюминия // «Вестник» Казанского технологического университета. - 2015. - Т. 18, № 1. - С. 28-31.

5. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Князев А.П., Крутилин А.А., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Заиков Г.Е. Потенциальная поверхность взаимодействия аквакомплекса метилэтилалюминийхлорида с n-этилстиролом // «Известия» ВолгГТУ. Серия «Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов». - 2017. - №4 (199). - С. 47-54.
6. Bode, B.M. and Gordon, M.S. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS // Journal of Molecular Graphics. - 1998. – Vol. 16. - pp. 133-138.
7. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Рахимов А.И., Рахимова О.С., Фомичёв В.Т. Квантово-химическое изучение механизма инициирования катионной полимеризации изоолефина 2-метилбутен-1 в присутствии комплексного катализатора фторид бора – фтористый водород. Известия ВолгГТУ. Серия «Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов». 2018. №4 (214). с. 31-39.

ФОРМИРОВАНИЕ ЦИФРОВЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ В СИСТЕМЕ ПОДГОТОВКИ ВЫПУСКНИКА ВУЗА

Карпушова С.Е., Секачева Т.В.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Обоснована целесообразность использования компетентностного подхода, дан анализ стандартов образовательного процесса, реализуемого в цифровом пространстве.

Abstract

The expediency of using the competence approach is justified, and the analysis of the standards of the educational process implemented in the digital space is given.

Ключевые слова: развитие информационных технологий, будущие специалисты, формирование цифровых компетенций, соответствовать требованиям работодателей

Keywords: development of information technologies, future specialists, formation of digital competencies, meet the requirements of employers

Уровень развития цифровой экономики в ближайшем будущем будет напрямую определять конкурентоспособность нашей страны. Она рассматривается как инновационный ресурс, меняющий формат государственного управления, его структур и всего общества в целом. Тем самым появляется новая возрастающая потребность в формировании цифровых компетенций как у нынешних студентов, так и у персонала промышленных предприятий.

Цифровизация экономической системы снижает конкурентоспособность традиционной модели образования, основной доминантой которой является получение знаний. Ее стратегические изменения направлены на разработку такой систему

управления знаниями, которая будет постоянно обновляться. Это позволит организовать образовательный процесс на основе принципов непрерывного обучения. Все перечисленное будет формировать высокий уровень знаний и способствовать эффективной цифровой трансформации экономических систем на макро-, мезо- и микроуровнях.

Постепенный переход российской экономики на инновационную траекторию развития, позволяет активно использовать в управлении производством новые информационные и телекоммуникационные технологии. Кроме того, формируется правовая инфраструктура цифровизации. Правительством Российской Федерации сформирована национальная программа «Цифровая экономика РФ». Основными ее направлениями являются:

- создание устойчивой и безопасной информационной и телекоммуникационной инфраструктуры;
- организация высокоскоростной передачи, обработки и хранения больших объемов данных;
- доступность цифровых технологий как для организаций, так и для домохозяйств.

Современная интеграция новых информационных технологий во все социально-экономические процессы, оказывает существенное влияние на развитие практически всех отраслей экономики и макроэкономическую стабильность. Подавляющее большинство российских компаний используют интернет в своей текущей деятельности. Практика использования облачных технологий постепенно распространяется и среди российских предприятий.

Знание новых информационных технологий, а также умение применять их на практике, является главным фактором в формировании цифровых компетенций у административно-управленческого аппарата. Поэтому, современный студент, чтобы быть востребованным на рынке труда, помимо общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций, должен стремится к овладению цифровыми компетенциями.

Для успешного формирования информационно-коммуникационных возможностей будущих специалистов необходимо создать соответствующие условия в процессе педагогической деятельности образовательных организаций. Прежде всего, это касается непрерывного развития мотивации студентов, что определяет использование современных информационных и телекоммуникационных технологий в будущей профессиональной деятельности. Эта мотивация достигается путем включения в учебный план предметов, связанных с информацией, а также учебных заданий, выполнение которых повышает ценность компьютерных технологий.

Использование информационных технологий в учебном процессе подготовки специалистов позволило повысить его эффективность за счет персонифицированного и усиленного обучения.

Формирование информационных технологий на межпредметном уровне способствует развитию цифровых возможностей будущих специалистов. Это предполагает интеграцию различных видов деятельности: образования, научных исследований, методов и организаций, в единый научно-образовательный комплекс, все процессы которого реализуются в рамках единой методологии с использованием информационных технологий. Важным аспектом сферы преподавания в образовательных учреждениях является моделирование непосредственной близости будущей профессиональной деятельности специалистов к учебному процессу.

Возрастающая компьютеризация преподаваемых учебных дисциплин привела к формированию информационной образовательной среды (ИОС), эффективное функционирование которой требует создания специализированных структур, в частности отдела технического обеспечения информационных систем. Кроме того, целесообразно проводить специализированные методические семинары и практические занятия по использованию новых информационных технологий с профессорско-преподавательским составом.

В Себряковском филиале будущих экономистов готовят по двум направлениям подготовки: 38.03.01 Экономика и 38.03.02 Менеджмент. В результате анализа федерального государственного стандарта (ФГОС) по каждому из направлений было установлено, что обучение цифровым навыкам осуществляется за счет следующих компетенций.

Таблица 1

Формирование цифровых компетенций по направлению подготовки 38.03.01 Экономика

Общепрофессиональные компетенции	Профессиональные компетенции
ОПК-1 способностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности	ПК-7 способностью, используя отечественные и зарубежные источники информации, собрать необходимые данные, проанализировать их и подготовить информационный обзор и/или аналитический отчет
ОПК-2 способностью осуществлять сбор, анализ и обработку данных, необходимых для решения профессиональных задач	ПК-8 способностью использовать для решения аналитических и исследовательских задач современные технические средства и информационные технологии
	ПК-10 способностью использовать для решения коммуникативных задач современные технические средства и информационные технологии

Таблица 2.

Формирование цифровых компетенций по направлению подготовки 38.03.02 Менеджмент

Общепрофессиональные компетенции	Профессиональные компетенции
ОПК-4 способностью осуществлять деловое общение и публичные выступления, вести переговоры, совещания, осуществлять деловую переписку и поддерживать электронные коммуникации	ПК-11 владением навыками анализа информации о функционировании системы внутреннего документооборота организации, ведения баз данных по различным показателям и формирования информационного обеспечения участников организационных проектов
ОПК-5 владением навыками составления финансовой отчетности с учетом последствий влияния различных методов и способов финансового учета на финансовые результаты деятельности организации на основе использования современных методов обработки деловой информации и корпоративных информационных систем	ПК-12 умением организовать и поддерживать связи с деловыми партнерами, используя системы сбора необходимой информации для расширения внешних связей и обмена опытом при реализации проектов, направленных на развитие организации (предприятия, органа государственного или муниципального управления)
ОПК-7 способностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности	ПК-13 умением моделировать бизнес-процессы и использовать методы реорганизации бизнес-процессов в практической деятельности организаций

Проанализировав ФГОС приходим к выводу, что в условиях цифровизации студентам важно владеть не только профессиональными компетенциями, но и цифровыми.

Кроме того, для формирования цифровых компетенций, на наш взгляд, можно рекомендовать активно использовать программы повышения квалификации и переподготовки. В цифровом мире будущие специалисты должны приобрести навыки межотраслевой коммуникации, предполагающие понимание технологий, процессов и рыночной ситуации в разных отраслях экономики. Работа в режиме высокой неопределенности и стремительной смены условий задач предполагает умение быстро принимать решения, реагировать на изменение условий работы, распределять ресурсы и управлять своим временем.

Таким образом, система Российского образования имеет высокий потенциал для подготовки специалистов цифровой экономики. Овладение будущими бакалаврами цифровых компетенций откроет для них новые возможности и будет полностью соответствовать требованиям работодателей. Поэтому можно резюмировать, что интеграция и развитие принципов цифровой экономики на базе высшего образования создаст синергетический эффект и будет способствовать общему росту экономики России.

Список литературы

1. Баймуратова Л.Р., Долгова О.А., Имаева Г.Р. и др. Цифровая грамотность для экономики будущего. - М.: Издательство НАФИ, 2018. – 86 с.

НОВЕЙШИЕ ПОДХОДЫ К ИЗУЧЕНИЮ ОСОБЕННОСТЕЙ СИНТАКСИЧЕСКОГО СТРОЯ АНГЛИЙСКОГО ЯЗЫКА

Лисина Л.М.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В статье рассматриваются проблемы изучения особенностей синтаксического строя английского языка с точки зрения психолингвистики и теории речевой деятельности. Представлены новейшие принципы и подходы к организации процесса изучения синтактического строя английского языка. Ведущими научными положениями при этом являются акустическая природа языка и эмоциональный характер речи. Эти положения позволяют сформировать подходы к раннему обучению неродному языку, не противоречащие процессу естественного овладения неродным языком. Учитывается наличие универсальных и национально специфических признаков речи.

Ключевые слова: инновации в образовательном процессе, изучение иностранных языков, билингвизм, синтаксический строй, обучение английскому языку.

Abstract

The article deals with the problems of studying the peculiarities of the syntactic structure of the English language from the point of view of psycholinguistics and the theory of speech activity. The newest principles and approaches to organizing the process of studying the syntactic structure of the English language by students of Russian universities are presented. The leading scientific positions are the acoustic nature of language and the emotional nature of speech. These provisions make it possible to form approaches to early learning of a non-native language that do not contradict the process of natural mastery of a non-native language. The presence of universal and nationally specific speech signs is taken into account.

Key words: innovations in the educational process, learning foreign languages, bilingualism, syntactic structure, teaching English.

Согласно ФГОС ООО, приоритетной целью в процессе обучения иностранному языку является формирование коммуникативной иноязычной компетенции. Ведущее место в процессе коммуникации занимает диалогическая речь, в процессе формирования которой, в свою очередь, важную роль играет синтаксический строй. Следовательно, одна из важнейших целей преподавания иностранного языка в ВУЗах – это обучение изучение синтаксического строя. Одним из способов развития умений диалогической речи является использование в процессе обучения различных видов опор [1].

В. Б. Царькова, давая определение опорам, говорит о том, что они призваны вызывать у учащихся ассоциации с конкретным жизненным опытом. Она понимает под опорами «структуры, которые призваны вызвать ассоциации с жизненным опытом

учащихся и с тем, что возможно (в силу языковой подготовленности) в его речевом опыте» [2].

В. И. Кунин писал о том, что опоры как ориентиры речевой деятельности, призваны ограничивать зону поиска, а также способствовать развертыванию мысли, сокращая при этом меру неопределенности, что в свою очередь должно привести к уменьшению числа допускаемых при говорении ошибок, к большей правильности и логичности речи.

Содержательные опоры затрагивают определённые факты высказывания, а смысловые призваны установить причинно-следственные связи между этими фактами. Стоит отметить, что содержательные опоры всегда содержат наиболее развернутую информацию, в то время как смысловые опоры сжаты по своему содержанию. Рассмотрим данные виды опор подробнее:

К вербальным содержательным опорам следует относить микротекст (он может преподноситься зрительно, аудированно, либо же совмещенно), план (тезисный, в виде вопросов), лексико-синтаксические схемы.

Изобразительные содержательные опоры могут включать: различные видеоматериалы (короткие видеоролики, кинофильмы), серии картинок, отдельные изображения или фотографии, рисунки.

Вербальные смысловые опоры: слова, как смысловые вехи, лозунги, поговорки, афоризмы.

К изобразительным смысловым опорам в свою очередь относятся следующие: схемы, таблицы, диаграммы, плакаты и пр.

Целесообразность использования опор при обучении диалогической речи объясняется такой особенностью данного вида речевой деятельности как ее спонтанность, незапланированность. Стоит также отметить, что особую роль опоры играют именно на начальном этапе обучения, помогая, помимо всего прочего, снимать психологические трудности при говорении. Подчеркивая важность применения опор на начальном этапе обучения английскому языку, Ф. М. Рабинович сравнивает опоры с пунктирной линией, которая помогает определить характер и выстроить логику будущего высказывания [3]. Е. И. Пассов же говорит о том, опоры носят временный характер, и с повышением ступени обучения опоры должны упрощаться, наиболее интенсивно же их нужно применять на начальном этапе [4].

Рассмотрим процесс обучения диалогической речи с использованием изобразительных и вербальных опор. Зарубежными методистами в качестве изобразительных опор широко используются комиксы. Выполняя функцию изобразительной опоры, комиксы раскрывают предмет высказывания, снимают необходимость удержания в памяти последовательности излагаемых событий, тем самым концентрируя внимание учащихся на отборе языковых средств при составлении собственного диалогического высказывания [5, с. 190]. С помощью комикса возможно обучение диалогической речи как по дедуктивному, так и по индуктивному путям.

О. А. Дроздова говорит об эффективности использования на начальной ступени обучения говорению предметно-образной наглядности, в качестве которой можно рассматривать, например, макет дома. Учащиеся распределяют между собой роли членов семьи и разыгрывают ситуации в соответствии с изучаемой в данный момент темой. Ситуации в данном случае могут быть разнообразны: «День рождения», «Помогаем маме накрыть на стол», «Моя комната», «Мои игрушки» и др. В качестве еще одного примера предметнообразной наглядности можно привести пальчиковый театр. Учащиеся самостоятельно или с помощью учителя мастерят куклы-марионетки, после чего под руководством учителя вступают в речевое общение в рамках заданной ситуации [4].

Помимо изобразительных опор, при обучении диалогической речи необходимо также использование вербальных опор. В качестве них на начальном этапе могут

использоваться сам текст диалога-образца, планы текстов, логико-смысловые схемы и пр. Вербальные опоры должны быть доступны и понятны учащимся [5].

Таким образом, на начальном этапе обучения диалогической речи на английском языке опоры должны применятся часто, их использование на уроке должно носить интенсивный характер.

В процессе написания статьи нами проанализированы различные электронные методические пособия для обучения студентов английскому языку. Анализ показал, что упражнения на развитие умений диалогической речи имеются практически в каждом из. Для развития данных умений авторами был выбран дедуктивный путь обучения. В каждом упражнении широко используются опоры. Так, нами были обнаружены вербальные содержательные опоры и изобразительные опоры. Зачастую изобразительные содержательные и вербальные содержательные опоры используется вместе, лишь в нескольких случаях упражнения предполагают использование только вербальных содержательных опор. Процентное отношение представленных в модулях 1 – 5 изобразительных содержательных опор и вербальных содержательных опор составляет 38% и 62% соответственно.

В связи с выявленными особенностями нами были разработаны несколько комплексов упражнений по обучению диалогической речи, в которых мы задействовали различные виды опор. Наши рекомендации мы отразили в фрагментах лекций. Предлагаем ознакомиться с одним из них.

В связи с тем, что диалог является наиболее коммуникативно направленным, его можно использовать и при обучении диалогической речи. Так как имеется диалог-образец, обучение мы будем осуществлять по дедуктивному пути.

На этапе предъявления преподаватель просит учащихся изучить визуальный материал и рассказать о нем. После этого включается аудиозапись, учащиеся внимательно слушают и следят по визуальному материалу. Для проверки понимания используется вопросно-ответное упражнение.

На аналитическом этапе учащимся предлагаются фразы и слова на русском, их задача – с помощью языковой догадки найти эквиваленты данных фраз в тексте, прочитать предложения полностью и соотнести с визуальным материалом.

На этапе присвоения преподаватель еще раз включает аудиозапись, учащиеся, слушая диктора, читают текст, после чего отчитывают диалог в парах. Преподаватель проверяет правильность произношения и интонации, исправляет ошибки. Затем он предлагает учащимся, опираясь только на визуальный материал, воспроизвести диалог в парах.

На этапе варьирования, преподаватель дает учащимся задание по пройденной теме, например, придумать рецепт какого либо блюда и подготовить презентацию о его приготовлении.

На заключительном этапе, этапе составления собственных диалогов преподаватель просит учащихся придумать, что и как бы они приготовили дома сегодня на ужин и обсудить это в парах.

Таким образом, в рамках данного фрагмента нами было реализовано обучение диалогической речи на визуальных материалах. Мы считаем, что использование визуального материала обладает большим потенциалом и в обучении диалогической речи. Помимо этого, сочетание изображение и текста позволяют рассматривать материал одновременно, как изобразительную, так и вербальную содержательные опоры.

Подводя итог всему вышесказанному, еще раз подчеркнем, что опоры являются эффективным средством обучения диалогической речи. Они помогают обучить стратегии ведения диалога на иностранном языке, поэтому их использование в рамках процесса обучения диалогической речи является обязательным.

Список литературы

1. Брунер, Дж. Онтогенез речевых актов / Дж. Брунер // Психолингвистика : сб. ст. [Переводы]. – М. : Прогресс, 1984. – С. 21–49.
2. Величкова, Л.В. Психолингвистические и педагогические основы раннего обучения иностранному языку в условиях искусственного билингвизма / Л.В. Величкова, О.В. Абакумова // Глобальный научный потенциал. – Вып. № 3(12). – СПб., 2012. – С. 5–7.
3. Винарская, Е.Н. Выразительные средства текста (на материале русской поэзии) / Е.Н. Винарская. – М. : Высш. шк., 1989. – 136 с.
4. Жинкин, Н.И. Речь как проводник информации / Н.И. Жинкин. – М. : Наука. 1982. – 159 с.
5. Ludmila Veličkova. Phonologische und psycholinguistische Probleme des Ausspracheunterrichts Zeitschrift für Interkulturellen Fremdsprachenunterricht 12: 2, 2007, 17 S.

СПОСОБЫ РАЗВИТИЯ ПИСЬМЕННОЙ РЕЧИ У СТУДЕНТОВ В ПРОЦЕССЕ РАБОТЫ В ФОРУМЕ ЭОС

Лисина Л.М.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Статья посвящена проблеме развития письменной речи студентов в процессе работы в форуме ЭОС. Приведены теоретические аспекты понятия письменной речи, а также подходы к ее совершенствованию в процессе получения высшего образования. Предпринята попытка проанализировать упражнения для обучения написанию письменного аргументированного высказывания в учебно-методических комплексах по английскому языку и разработать комплекс дополнительных упражнений для работы над письменным высказыванием.

Ключевые слова: иноязычная письменная речь, творческая письменная речь, креативное письмо, аргументированное письмо, самовыражение, мотивация.

Annotation

The article is devoted to the problem of development of students' written language in the process of work in the EOS forum. The theoretical aspects of the concept of writing are given, as well as approaches to its improvement in the process of obtaining higher education. An attempt was made to analyze exercises for teaching writing a written reasoned statement in educational-methodical complexes in English and to develop a set of additional exercises for working on a written statement.

Key words: foreign language written speech, creative written speech, creative writing, reasoned writing, self-expression, motivation.

Согласно языковым нормам, учащийся может выстраивать свои мысли как в письменной, так и в устной форме по мере развития компетенции. И, по мнению ученых, использования корпуса образцовых аутентичных текстов, которые представляют собой коммуникационные модели (образцы) речевого поведения, наиболее эффективный способ обучения построению речевого высказывания [1].

Поэтому, на сегодняшний день корпусная лингвистика является информационным ресурсом, применение которого на занятии, может способствовать развитию лексических умений учащихся в изучаемом языке.

Письмо является исторически сложившейся категорией, которая, как и язык, возникла из потребности людей в общении и его расширении. В настоящее время письмо является неотъемлемой частью современного общества, необходимой составляющей коммуникативной компетенции, как на родном, так и на иностранном языке. Как известно, письмо и письменная речь были основаны на базе устной речи и появились гораздо позже.

За курс обучения в школе, обучающиеся должны научиться заполнять анкеты и писать поздравления, личные письма с опорой на образец с употреблением формул речевого принятых в стране или странах изучаемого языка [1]. На этапе обучения на первых курсах высших учебных заведений существуют иные формы письма.

Одной из таких форм является аргументированное письмо. Таким образом, возникла потребность между необходимостью уметь писать письменное аргументированное высказывание и отсутствием большого количества упражнений в учебно-методических комплексах по английскому языку для работы над письменным высказыванием.

Для начала, необходимо понять, что такое письмо и письменная речь. Так, в новом словаре методических терминов и понятий письмо определяется как «продуктивный вид речевой деятельности, обеспечивающий выражение мысли в графической форме» [2]. Данное определение является универсальным и общим.

Также можно дать следующие определения понятию «письмо».

1. Письмо – это «графическая система как одна из форм плана выражения».
2. Письмо – это «овладение учащимися графической и орфографической системами иностранного языка для фиксации речевого и языкового материала в целях его лучшего запоминания и в качестве помощника в овладением устной речью и чтением [3].

Другие ученые, в свою очередь, дают следующее определение понятия письма. Письмо – это «один из основных самостоятельных видов речевой деятельности, который может осуществляться на двух уровнях: репродуктивном и продуктивном» [4].

Н.Д. Гальскова считает, что письмо – это «продуктивная, аналитико-синтетическая деятельность» [5].

Часто в методологии термины «письмо» и «письменная речь» не противопоставляются. Понятие «письмо» является более широким понятием, чем письменная речь; оно может включать как письменность, так и письменную речь [6].

Письменная речь – умение сочетать слова в письменной форме для выражения своих мыслей в соответствии с потребностями общения.

В нашем исследовании мы понимаем «аргументированное письменное высказывание» как письменная речь, коммуникативной целью которой является «убедить собеседника в правильности какого-либо положения, заставить его принять те или иные взгляды, мнения.

В процессе работы над статьей были проанализированы несколько пособий по английскому языку для студентов первых курсов высших учебных заведений. Следует отметить, что в данных пособиях есть большое количество упражнений для развития всех видов речевой деятельности. Однако в каждом разделе есть не более двух-трех упражнений на обучение аргументированному письменному высказыванию. Поэтому нами была предпринята попытка разработки комплекса дополнительных упражнений для обучения написанию письменного аргументированного высказывания. По нашему мнению, разработанный комплекс дополнительных упражнений для обучения написанию

аргументированного письменного высказывания позволит компенсировать небольшое количество упражнений в представленных учебниках.

Основные принципы, которых мы придерживались при создании комплекса упражнений:

- ✓ Наглядность. Некоторые упражнения выполнены с использованием графических и изобразительных средств наглядности, что облегчает усвоение материала обучающимися.
- ✓ Поэтапность. Упражнения следуют от простого к сложному, от рецептивного к репродуктивному.
- ✓ Системность. Упражнения из двух блоков связаны между собой и дополняют друг друга.
- ✓ Исчерпывающее наполнение. Созданные упражнения включают в себя достаточное количество лексических единиц, а именно вводных конструкций и слов-связок, достаточных для написания аргументированного эссе.
- ✓ Ориентированность на возраст и возможности обучающихся. Упражнения созданы на основе учебника для 9 класса «Spotlight» и «Forward» и включают только тот лексический и грамматический материал, который представлен в данном курсе обучения. Более того, упражнения построены на интересных для девятиклассников темах.

Первый блок упражнений – отработка и систематизация слов-связок. Цель данного блока упражнений – познакомить обучающихся со словами связками и показать возможности их использования.

Первая группа упражнений включает следующие этапы работы над словами связками:

1. Семантизация лексического материала. На данном этапе в трёх упражнениях обучающимся предлагается ознакомиться со значением слов - связок. Первое упражнение: Match linking words with the definitions. Второе упражнение: Match linking words with its function. Третье упражнение: Find the synonyms of the linking words.
2. Тренировка. Данный этап позволяет отработать слова – связки в условно речевых упражнениях. Этап тренировки также состоит из 3 упражнений: 1. Match the beginning of the sentence with the ending using the correct linking word from the box below. 2. Choose the correct word or phrase and complete the sentences. 3. Find the mistakes and correct them.
3. Последний этап – использование слов-связок. На данном этапе обучающимся предлагается выполнить уже четыре упражнения, которые постепенно идут от условно-речевых до непосредственно речевых. Первое упражнение: Finish the following sentences. В данном упражнении обучающиеся дополняют предложения, первая часть которых уже написана с использованием слов-связок. Второе упражнение: Read the sentences and write your opinion using different linking words. Упражнение 3: Look at the pictures and write sentences using the linking words in every sentence. В последних двух предложениях обучающиеся ограничены ситуацией. Последнее задание на данном этапе и в данном блоке – упражнение 4: Read the rubric and write your opinion, give arguments and explain reasons. Use as many linking words and phrases as possible. В данном задании обучающиеся могут проявить фантазию и использовать любые слова-связки.

Таким образом, в первом блоке комплекса упражнений обучающиеся, при работе над словами – связками, проходят все необходимые этапы для успешного усвоения лексического материала.

Второй блок упражнений помогает обучающимся лучше усвоить саму структуру аргументированного эссе. Данный блок был создан в связи с низкими результатами

обучающихся при диагностике. Блок включает в себя пять упражнений, которые также следуют от более простого к более сложному.

Первое упражнение: Match the paragraph with the contents. Данное упражнение необходимо для ознакомления с наполнением каждого из параграфов.

Второе упражнение: Match the paragraph with the sentence. Данное упражнение необходимо для первичной отработкой понимания структуры аргументированного эссе. Обучающимся предлагается подумать над содержанием каждого параграфа и подобрать подходящее предложение. Более того, подсказкой на данном этапе могут стать – слова-связки, используемые в предложениях.

В третьем упражнении обучающимся предлагается объединять знания и написать слова - подсказки, которые могут быть использованы в каждом параграфе. Далее, обучающимся необходимо затронуть еще один важный аспект написания аргументированного эссе и письменного высказывания.

Четвертое упражнение: Tick what should we use when we write an essay. В данном упражнении обучающиеся вспоминают, как нужно писать эссе, что можно, а что нельзя использовать в письменном высказывании.

Заключительное упражнение: Read the rubric again and fill in the table. Оно является наиболее сложным и напрямую связано с предыдущим блоком упражнений. После выполнения комплекса упражнений можно переходить к написанию полноценного аргументированного эссе.

Таким образом, процесс развития письменной речи, в частности, обучения аргументированному письменному высказыванию, несомненно, важный и при этом достаточно сложный. По нашему мнению, разработанный комплекс дополнительных упражнений для студентов первых курсов поможет облегчить образовательный процесс и стимулирует интерес студентов в изучению английского языка.

Список литературы

1. Каплич, Л. В. Начало обучения продуктивной письменной речи в лингвистическом вузе : автореф. дис. … канд. пед. наук / Л.В. Каплич. – М., 1996 – 25 с.

2. Кизрина, Н.Г. Обучение студентов третьего курса языкового вуза креативному письму : автореф. дис. … канд. пед. наук. – Нижний Новгород, 2009. – URL: http://www. dissercat.com /content/obuchenie-studentov-tretegokursa-yazykovogo-vuza-kreativnomu-pismu/ (дата обращения – 09.02.19)

3. Примерная программа дисциплины «Иностранный язык» для неязыковых вузов и факультетов / под общей ред. С.Г. Тер-Минасовой. – М., 2009.

4. Татаринова, М. А. Теоретические основы создания и использования дистанционного курса обучения иноязычной письменной речи для студентов 2–3 курсов лингвистического вуза (на материале английского языка) : автореф. дис. … канд. пед. наук / М.А. Татаринова. – М., 2005. – 27 с.

5. Lüthi, Max: Märchen / M. Lüthi. Bearb. von Heinz Röllecke. 8., durchges. u. erg. Aufl . – Stuttgart : Metzler, 1990 – 135 S.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ОБУЧАЮЩИХ ПРОГРАММ ДЛЯ РАЗВИТИЯ КОММУНИКАТИВНОЙ КОМПЕТЕНЦИИ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ АНГЛИЙСКОМУ ЯЗЫКУ В ТЕХНИЧЕСКОМ ВУЗЕ

Лисина Л.М.

Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

Развитие и внедрение современных технологий в процесс обучения на сегодняшний день играет важнейшую роль в сфере образования. Одним из наиболее эффективных и перспективных вариантов развития процесса обучения представляется использование электронных образовательных ресурсов, в частности, компьютерных обучающих программ. В статье приводится теоретическое обоснование необходимости внедрения компьютерных технологи в процесс обучения иностранным языкам в технических ВУЗах России.

Ключевые слова: обучение студентов технических ВУЗов, инновации в образовательном процессе, инновационные технологии, ЭОР, компьютерные технологии.

Annotation

The development and implementation of modern technologies in the learning process today plays a major role in the field of education. One of the most effective and promising options for the development of the learning process is the use of electronic educational resources, in particular, computer training programs. The article provides a theoretical justification for the need to introduce computer technology in the process of teaching foreign languages in technical universities in Russia.

Key words: teaching students of technical universities, innovations in the educational process, innovative technologies, ESM, computer technologies.

Необходимым условием при изучении лексики является также правильное написание изученных слов [4].

Таким образом, показателями владения лексикой можно считать усвоение формы и значения слова, а также умение использовать лексические единицы в различных коммуникативных ситуациях. Студенты непрофильных ВУЗов за курс овладения английским языком учащиеся должны усвоить значение и формы лексических единиц и уметь их использовать в разнообразных речевых ситуациях, т.е. овладеть навыками лексического оформления устной и письменной речи.

Многие ученые отмечают, что отсутствие реальной языковой практики и языковой барьер порождают у обучаемых неуверенность в себе, что26 в свою очередь приводит к снижению26 интереса к изучению ИЯ. Обилие новой лексики пугает и отталкивает учащихся. При этом наблюдается снижение показателей успеваемости по предмету [2].

На наш взгляд, успешному овладению иностранным языком способствует большой словарный запас, поэтому его пополнение и обогащение является одним из основных видов деятельности на лекциях.

На сегодняшний день образовательный процесс в стране стремительно развивается и не обходится без информационных технологий.

Одним из шагов на пути к информатизации современного образования стал приказ Министерства образования и науки Российской Федерации от 2015 года о том, что все учебники, имеющие государственную аккредитацию, должны быть представлены как в печатной, так и в электронной формах [5].

Тем не менее, сложно с уверенностью сказать, что электронные учебные пособия могут вызывать у современных учащихся глубокий интерес и повысить мотивацию. Скорее они никак не способствуют качественному и продуктивному расширению способов взаимодействия преподавателей и студентов с учебным продуктом.

Одним из действенных способов добиться эффективных результатов в сфере образования от процесса информатизации можно путём создания инновационных учебных продуктов, опирающихся на принципы активно-деятельностного и личностно-ориентированного обучения и включающих в себя инновационные параметры. В свою очередь реализация активного обучения достигается, если в учебный продукт заложены различные способы интерактивной деятельности. По нашему мнению, для достижения этих целей как нельзя лучше подходят электронные образовательные ресурсы, контент которых обладает высокой степенью интерактивности, которая позволяет учащимся совершать различные манипуляции с элементами ЭОР, вмешиваться в их процессы.

Значительную часть современных информационных образовательных ресурсов сегодня составляют ресурсы на электронных носителях, для обозначения которых специалисты используют два термина: электронный образовательный ресурс (ЭОР) и цифровой образовательный ресурс (ЦОР) [2].

В связи с многочисленностью электронных образовательных ресурсов в научном дискурсе наблюдается расхождение взглядов по вопросу о синонимичности этих терминов: ЭОР и ЦОР. В ходе анализа научной литературы мы обнаружили два подхода к данному вопросу. С позиции первого подхода, некоторые ученые (например, И. А. Воронкова [3]) утверждают, что ЭОР отличается от ЦОР.

В частности, Ю. Л. Снежко считает, что разница между ЭОР и ЦОР заключается в том, что к первым относятся «средства программного, информационного, технического и организационного обеспечения учебного процесса», которым присуще такое важное свойство как интерактивность, то есть наличие у учащихся возможности вмешиваться в текущий процесс [4]. Что касается ЦОР, Ю. Л. Снежко, ссылаясь на глоссарий электронных образовательных ресурсов, определяет как «совокупность данных в цифровом виде, применимая для использования в учебном процессе» [4]. С позиции второго подхода, ученые, соответственно, считают рассматриваемые термины синонимичными. Например, В. В. Вихрев в своей работе «Новая парадигма информатизации образования: эволюция терминов в контексте проблемы терминологической размытости» провёл семантический анализ терминов ЦОР и ЭОР, опираясь на синтез методик лингвистики, социологии и информатики [2].

Обобщая проанализированный материал, можно отметить, что в специальной и учебной литературе, как и в русском сегменте Интернета, эти термины имеют широкое распространение и используются примерно «на равных». Это позволило нам в рамках настоящего исследования пренебречь смысловыми нюансами, характерными для каждого из терминов «ЭОР» и «ЦОР», и рассматривать их как синонимичные. Имея ввиду тот факт, что ЦОР иногда выделяют в отдельную группу современных ресурсов, которые воспроизводятся при помощи электронных устройств (чаще всего – компьютера) в цифровом виде [5].

На сегодняшний день накоплено огромное количество электронных образовательных ресурсов для всех ступеней образовательного процесса, по различным учебным предметам, для решения различных педагогических задач как в рамках аудиторной работы на уроке, так и самостоятельной внеаудиторной работы. Тем не менее,

поскольку сами понятия «электронные образовательные ресурсы» и «цифровые образовательные ресурсы» являются еще достаточно «молодыми», их классификация носит дискуссионный характер.

Прежде всего нужно отметить, что согласно Межгосударственному стандарту ГОСТ 7.83-2001 выделяют 2 основных вида ЭОР:

а) электронные данные (контент): текстовые, числовые, звуковые, графические;

б) электронные программы: системные, прикладные и сервисные.

Для того, чтобы продемонстрировать преимущества описанных электронных образовательных ресурсов перед традиционными способами обучения, мы оформили табл. 1, в которой указали главные отличия текстографических, аудиовизуальных, мультимедийных и сетевых электронных образовательных ресурсов от традиционного учебника на печатной основе.

Таблица 1. Отличия электронных образовательных ресурсов от печатного учебника

Название ЭОР	**Отличие от печатного учебника**
Текстографические: а) электронный учебник б) гипертекст	а) представленные на экране монитора тексты доступны только для просмотра. С ними нельзя совершить никаких интерактивных действий. б) гиперссылки обеспечивают элементарую интерактивность при навигации по учебнику.
Элементарные аудиовизуальные ресурсы	Возможность воспроизведения анимации, звука, видео, изображения. Функция иллюстративного материала.
Мультимедийные	Размещение на оптических носителях. Интерактивный мультимедийный контент разной уровни сложности.
Сетевые ЭОР	Интерактивный аудиовизуальный контент с возможностью сетевого распространения.

Таким образом, анализ описанных классификаций позволяет нам сделать следующий вывод: применение электронных образовательных ресурсов в учебном процессе значительно расширяет возможности учителя и обучаемых. Самыми перспективными можно отметить сетевые электронные образовательные ресурсы, которые легко распространяются, встраиваются в учебный процесс и делают его более эффективным за счет активно-деятельностных форм обучения, которые обеспечиваются высокой степенью интерактивности сетевых электронных образовательных ресурсов.

Список литературы

1. Об образовании в Российской Федерации : федеральный закон РФ от 29 декабря 2012 г. № 273-ФЗ [Электронный ресурс] Официальный интернет-портал правовой информации «Государственная система правовой информации» / Режим доступа: URL: http://pravo.gov.ru/proxy/ ips/?docbody=&nd=102162745&rdk (Дата обращения – 06.02.2019).
2. Вихрев, В. В. Новая парадигма информатизации образования: эволюция терминов в контексте проблемы терминологической размытости / В. В. Вихрев // Системы и средства информатики. – Москва, 2010. – С. 209–239.
3. Воронкова, И. А. Организация образовательного процесса на базе ЭОР в Центре психолого-медико-социального сопровождения / И.А.Воронкова // Информатика и образование. – 2015. – № 3. – С. 31-33.
4. Снежко, Ю. Л. Использование электронных образовательных ресурсов при обучении английскому языку [Электронный ресурс] // Актуальные проблемы германистики, романистики и русистики. – 2016. – №2. – Режим доступа: https://elibrary.ru/item.asp?id=26470490 (25.10.2020).
5. Щербакова, М.В. Электронное обучение как инструмент развития содержания профессиональной подготовки в вузе / М.В. Щербакова, Е.Ю. Чайка // Вестник Воронежского государственного университета. Сер. Проблемы высшего образования. – Воронеж, 2016. – № 4. – С. 89–93.

КОРПУСНЫЙ ЛЕКСИКОГРАФИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КАК СПОСОБ РАСКРЫТИЯ КОНТЕКСТНОГО УПОТРЕБЛЕНИЯ ЛЕКСИКИ АНГЛИЙСКОГО ЯЗЫКА

Лисина Л.М.
Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В статье рассматриваются проблемы раскрытия контектстного употребления лексики английского языка в процессе обучения студентов. Выдвигается и обосновывается положение о том, что под влиянием таких дисциплин как коммуникативная лингвистика, прагмалингвистика, когнитивная лингвистика и лингвокультурология вузовские программы по теории языка должны быть существенно обновлены и дополнены.

Ключевые слова: коммуникативный; когнитивный; прагматический; культура; иностранный язык; лекционные курсы, лексикографический анализ.

Annotation

The article deals with the problems of disclosing the contextual use of English vocabulary in the process of teaching students. The author puts forward and substantiates the position that under the influence of such disciplines as communicative linguistics, pragmalinguistics, cognitive linguistics and cultural linguistics, university programs in language theory should be substantially updated and supplemented.

Key words: communicative; cognitive; pragmatic; culture; foreign language; lecture courses, lexicographic analysis.

Профессиональное изучение любого иностранного языка подразумевает под собой глубокое изучение лексических особенностей. Важность понимания контекстного употребления лексики английского языка обусловлена тем, что без широкой вовлеченности в контекст могут возникнуть сложности в переводе, особенно если речь идет о специфическом дискурсе.

Поскольку текст является продуктом речевой деятельности отдельного лица, то он кроме собственно информации имеет свои целевые, прагматические установки. Изучают, с одной стороны, несколько самостоятельных дисциплин, призванных регулировать текстовое изложение информации, а именно: общая теория текста, грамматика текста и стилистика текста. С другой стороны, – названные дисциплины смыкаются с прагматикой, изучающей способы и средства, с помощью которых коммуникатор влияет на информационно-мировоззренческую систему реципиента. При условии, конечно, что говорящий и слушатель имеют общую семантическую базу.

С такими понятиями семантической базы, как «интродукт», «рема», «логический предикат», непосредственно связано понятие «фокуса». Ван Дейк обозначает прагматический и семантический фокусы. Семантический фокус определяется в терминах отношений, которые не связаны с фактами и объектами, то есть на чисто онтологическом уровне семантики. Под прагматическим фокусом понимается акт выбора средств влияния на читателя, критерием которого является успешность и эффективность коммуникации. В прагматическом фокусе находится то, что является релевантным для контекста осуществляемой коммуникации [1].

Важную прагматическую функцию, говоря словами Ван Дейка, выполняет структура связного текста в целом. Систематизация и выделение прагматических элементов в тексте определяет его понимание и позволяет «избежать фрагментарности в его прочтении», так как прагматические элементы могут проявляться на всех уровнях текста: морфологическом, синтаксическом и лексическом» [2].

Перевод, по сути, является деятельностью, которая заключается в трансформации содержания языковой единицы (предложения, абзаца, текста) одного языка в другой. Основополагающей характеристикой перевода является его адекватность, что означает точное воспроизведение формы и содержания первоисточника равнозначными средствами.

Осуществляя перевод помимо денотативного и конотативного аспектов текста важно также учитывать прагматический аспект. Его учет оказывает влияние на передачу денотативного и конотативного аспектов текста и, как следствие, создает определенное влияние текста перевода на получателей.

Переводчиком изымаются не только языковые семантические функции, но и функции коммуникативной цели, то есть прагматическая функция, ради которой и создается весь текст. Таким образом, в процессе перевода имеет место и прагматический анализ. Семасиологический и прагматический виды анализа обеспечивают так называемое «извлечение информации» в том числе и коммуникативной, а ономасиологический анализ имеет целью удовлетворить переводческие интенции в поисках соответствия, чтобы как можно ближе передать содержание, а также цель коммуникации по отношению к рецептору перевода. Поскольку абсолютная эквивалентность практически недостижима, переводчик прибегает к одной или целому ряду из существующих лексико-семантических, лексико-грамматических или грамматических трансформаций.

Здесь следует помнить о том, что рецептор оригинального текста и рецептор перевода имеют, как правило, отличный языковой опыт, разную этническую ментальность и различные фоновые знания. Поэтому, достижения коммуникативной цели в переводе требует так называемой «прагматической адаптации» с учетом особенностей языка,

ментальности и фоновых знаний рецептора перевода. Некоторые лингвисты несколько ниже оценивают возможности сохранения прагматического потенциала при переводе художественных текстов потому, что они ориентированы на определенного рецептора, хотя несут в себе и общечеловеческие ценности [4]. В таком случае прагматическая адаптация перевода является необходимым условием для воспроизведения коммуникативной цели и достижения ожидаемого воздействия на читателя. Если этого не сделать, то текст будет восприниматься, как чужеродный и коммуникативная цель не будет достигнута.

В первую очередь следует отметить то, что все переводческие трансформации, вызванные различиями языковых систем несут в себе и прагматический компонент потому, что благодаря им, переведенное произведение не воспринимается как совершенно чужеродное. Чем лучше перевод, тем ближе чувствуется произведение и авторские чувства.

Рассмотрим лексические трансформации. Суть лексических трансформаций обуславливается заменой отдельных лексических единиц иностранного языка лексическими единицами принимающего языка, которые не являются их словарными эквивалентами, т. е., которые имеют другое значение, по сравнению с передаваемыми в переводе единицами иностранного языка [3]. Например, при переводе кинематографических материалов обычно применяется традиционный арсенал переводческих приемов, присущих художественному переводу. Следует отметить, что при переводе кинотекста переводчик сталкивается с ситуациями, когда возникает необходимость применять трансформации различных типов, сочетая лексические, грамматические и стилистические трансформации. В то же время мы можем утверждать, что при передаче исходного текста на языке перевода переводчик использует трансформации одного типа. Рассмотрим фактический материал нашей работы ввиду переводческих приемов одного типа. В общем, лексические трансформации используются при переводе чаще.

В прагматическом аспекте рассмотрения культурно – маркированных ситуаций можно говорить о следующих результатах коммуникации:1) успешная коммуникация – возникает при владении обеими сторонами коммуникации культурными особенностями чужого языка и культурно–речевыми традициями,2) деформация смысла сообщения – возникает вследствие непонимания участниками культурной специфики чужого языка, проявляющаяся в незапланированной реакции участников (непонимание, возмущение) – неверная интерпретация смысла исходного сообщения,3) блокирование коммуникации – неспособность интерпретации специфических единиц чужой культуры. Данные трудности в рамках культурно– маркированной коммуникации могут возникать по ряду причин: незнание языка и особенности языковых единиц, различиями в фоновых знаниях, системе ценностей, культурных коннотаций, смыслового восприятия мира и т.д.

Исходя из выделенных ситуаций культурно–маркированного общения, можно сделать вывод, что успешность зависит от выбора лингвистических средств выражения. При переносе языковой ситуации в иноязычную среду может возникнуть непонимание на двух уровнях: культурном (или же экстралингвистическом) и языковом (или лингвистическом). Выбор лексических единиц происходит в зависимости от цели коммуникации, ситуативного контекста, а также с учетом конвенциональных особенностей двух взаимодействующих культур. Ввиду того, что перевод культурно–маркированных ситуаций представляет собой процесс интеграции культур, то перевод данных ситуаций предполагает межъязыковую и межкультурную адаптацию, которая рассматривается в рамках прагматического значения языковых единиц. Прагматическое значение лексических единиц в условиях культурно–маркированных ситуаций

связывается с разными вариантами интерпретации и понимания одних и тех же единиц представителями разных культур.

В такой ситуации можно говорить об использовании коммуникантами культурно–маркированной лексики. Одной из центральных проблем в рассмотрении культурно–маркированной лексики является отсутствие единой классификации и метода переноса данных единиц в другую культуру. Существующая проблема обусловлена неоднозначностью трактовки самого понятия «культурно–маркированная лексика».

Исходя из вариативных определений разных авторов, можно сделать вывод, что, прежде всего, к культурно–маркированной лексике следует относить реалии. Реалии можно отнести к наиболее значимым культурным маркерам, передающим национальный, исторический колорит. Важную роль в передаче культурного колорита играет коннотативная лексика, которая находит свое выражение во фразеологических оборотах, а также лексические единицы, которые приобретают определенное значение в рамках одной культуры. К основным признакам культурно–маркированной лексики можно отнести: непонятность, чуждость лексических единиц, реализацию лексического значения в рамках определенной культуры. Наиболее прагматически маркированы те единицы языка, которые обладают специфической стилистической окраской, эмоциональным наполнением, характерным в данной культурной среде значением.

В прагматическом плане можно выделить наиболее трудные для перевода лексические группы: реалии определенной культуры, коннотативная лексика, понятная лишь для одной из взаимодействующих культур и перевод сленга [4]. Кроме того, следует выделить следующие группы: наименования предметов/явлений традиционного быта, историзмы, лексику фразеологических единиц, слова нерусского происхождения и слова из фольклора, так как авторы брали за основу материал русского языка [3]. С. И. Влахов, рассматривая непереводимое в переводе, выделял следующие группы: реалии (в особенности передача культурного колорита), перевод фразеологических единиц, перевод терминов, перевод имен, перевод каламбура [5]. Сопоставляя различные классификации, можно выделить группы лексики, наиболее трудные для передачи на язык другой культуры: 1) реалии, 2) фразеологические единицы (коннотативная лексика), 3) сленг.

Ко второй группе культурно–маркированной лексики можно отнести коннотативную. Данная лексика является отражением культурно–исторических особенностей языка, а также ассоциаций, которые возникают у реципиентов – носителей культуры. В эту группу входят идиомы, фразеологизмы и фразовые глаголы.

Таким образом, можно заключить, что лексикографический анализ важен для полноценного понимания контекстной лексики при переводе. Особенности обучения переводу составляют целый ряд переводческих проблем. Переводчику необходимо правильно декодировать контекст и адекватно воспроизводить лексические маркеры переводимого источника. При обучении переводу следует прибегать к упражнениям лексических и стилистических трансформаций, которые станут основой для дальнейшей работы будущих специалистов. Несоблюдение тех или иных правил перевода неизбежно упрощает экспрессивную окраску вербальной составляющей текста и приводит к неполной реализации прагматического замысла его автора.

Список литературы

1. Болдырев, Н. Н. Концептуальное пространство когнитивной лингвистики / Н. Н. Болдырев. – Вопросы когнитивной лингвистики. – Тамбов, 2004. – N. 1. –С. 18–37.

2. Грайс, Г.П. Логика и речевое общение / Г.П. Грайс // Новое в зарубежной лингвистике. – Вып. 16. – М. : Прогресс, 1985. – С. 217–257.

3. Колшанский Г.В. Коммуникативная функция и структура языка / Г.В. Колшанский .– М. : Наука, 1984. –173 с.

4. Махкамова, Г.Т. Межкультурные измерения ценностных ориентаций языка, дискурса и поведения / Г.Т. Махкамова. – Ташкент, 2012.
5. Моррис, Ч. Основания теория знаков / Ч. Моррис // Семиотика ; под ред. Ю.С. Степанова. – М. : Радуга, 1983. – С. 37–89
6. Кубрякова, Е.С. Эволюция лингвистических идей во второй половине XX века / Е.С. Кубрякова // Язык и наука XX века. – М., 1995. – С. 239–320.

ВИДЕОКОНФЕРЕНЦИЯ КАК ОДНА ИЗ НОВЕЙШИХ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ АНГЛИЙСКОМУ ЯЗЫКУ

Лисина Л.М.
Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета

Аннотация

В статье представлен анализ одной из наиболее популярных инновационных образовательных технологий, применяемых в современном образовательном процессе в России и за рубежом - видеоконференции. Автор приводит результаты сравнительного анализа использования видеоконференций с классическими образовательными формами.

Ключевые слова: инновационные образовательные технологии; мультимедийные программы, видеоконференции, интернет-технологии, инновации, образовательный процесс.

Abstract

The article presents an analysis of one of the most popular innovative educational technologies used in the modern educational process in Russia and abroad - video conferencing. The author provides the results of a comparative analysis of the use of video conferencing with classical educational forms.

Key words: innovative educational technologies; multimedia programs, video conferencing, Internet technologies, innovations, educational process.

Владение иностранным языком в современном мире является одним из важнейших условий построения успешной карьеры. Иностранный язык необходим для научной деятельности, в общении с зарубежными партнерами, для самообразования, подготовки к сдаче экзаменов на международные сертификаты и т.д. В связи с этим, для студентов неязыковых специальностей вопрос мотивации на занятиях по иностранному языку, по нашему мнению, является ключевым фактором в успешном освоении учебной программы. Как показывает опыт, дисциплина «Иностранный язык» все чаще игнорируется студентами, которые ошибочно считают, что знание иностранного языка не является важным, и навыки, приобретаемые в ходе изучения предмета, не пригодятся для их дальнейшего профессионального развития.

Необходимо упомянуть и тот факт, что большое количество студентов в одной группе и разница в их уровне владения иностранным языком часто не дает возможности преподавателю уделить внимание каждому обучающемуся. Как следствие, часть учеников теряет мотивацию к изучению дисциплины, из-за чего происходит снижение уровня знаний, навыков и умений.

ИКТ на сегодняшний день играют одну из важнейших ролей в повышении мотивации студентов к изучению иностранного языка. Они могут поспособствовать

повышению заинтересованности студентов в предмете. Так, использование средств ИКТ делает возможной организацию самостоятельной работы каждого ученика с учетом его различных особенностей: от возрастных до психологических. Например, информационные технологии могут применяться в самых разных стилях обучения и быть доступными для восприятия каждым: можно одновременно задействовать тех, кто предпочитает учиться посредством чтения; а также тех, кто больше ориентирован к восприятию аудио- или видеоинформации [2].

ИКТ – это не только новые технические средства, но и новый подход к успешной организации учебного процесса. Действительно, средства ИКТ способствуют формированию и совершенствованию произносительных, лексических и грамматических навыков, а также развитию всех видов речевой деятельности.

Дистанционная форма обучения основана на ИКТ. В 2020 году в связи с пандемией COVID-19 дистанционное обучение стремительно ворвалось в образовательный процесс. Несмотря на то, что дистанционная форма обучения известна и используется уже несколько лет в нашей стране, многие студенты и преподаватели оказались не готовы к повсеместному ее использованию.

Видеоконференции стали неотъемлемой частью дистанционного образования. В данном формате проводились и проводятся в настоящее время уроки в школах и лекции в высших и средних учебных заведениях. В процессе написания статьи автором был проведен опрос среди студентов и преподавателей Кафедры английского языка с целью понимания, насколько обучение в виде видеоконференций действенно в плане качества образования.

Результаты исследования представлены на рисунках 1-2.

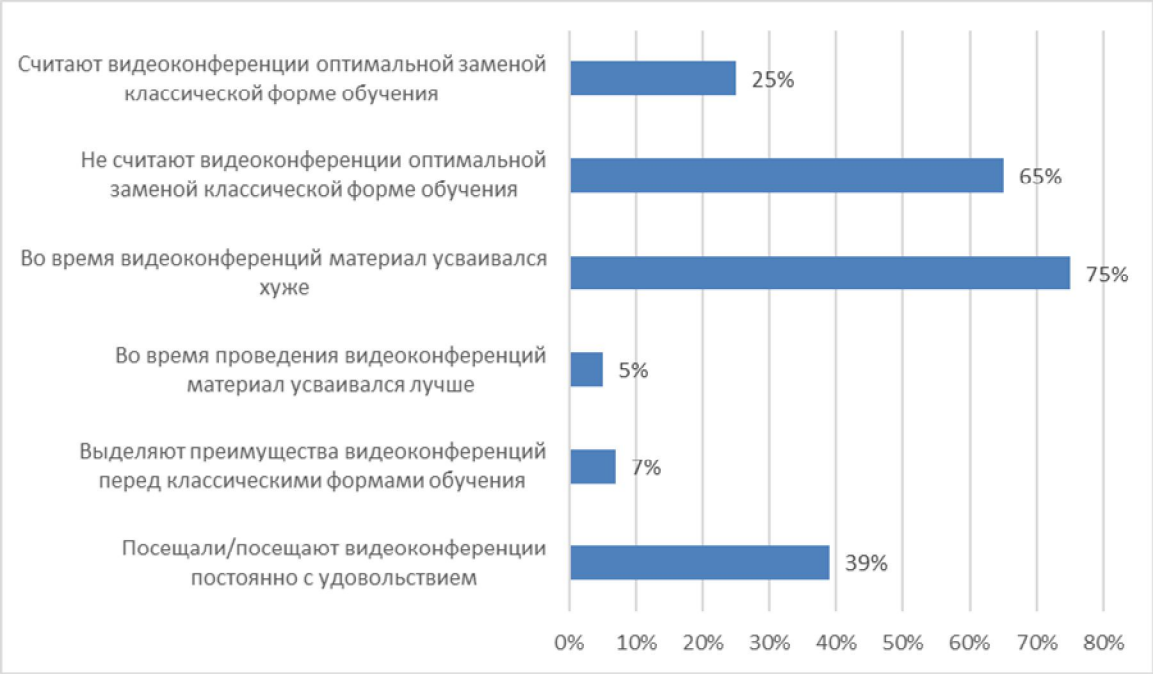

Рисунок 1. – Результаты опроса студентов

Анализ данных, представленных на рис. 1 позволяет заключить, что большинство опрошенных студентов не считают видеоконференции оптимальной заменой классической форме обучения. 75% опрошенных студентов сказали, что во время проведения видеоконференций материал усваивался хуже, чем во время посещения классических лекций. Между тем, 39% опрошенных посещали видеоконференции

постоянно и с удовольствием, однако только 5% заключили, что усвоили пройденный материал на дистанционном обучении лучше, чем когда посещали учебное заведение.

Результаты опроса преподавателей представлены на рис. 2.

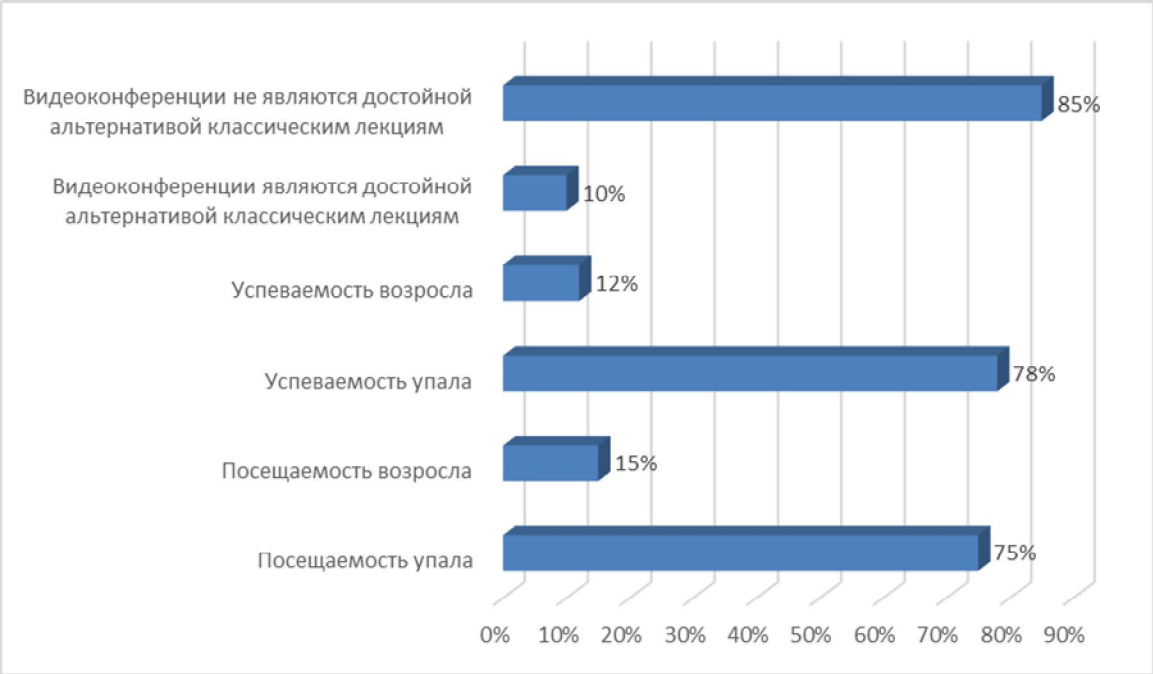

Рисунок 2 – Результаты опроса преподавателей

Таким образом, данные, представленные на рис. 2 показывают, что большинство преподавателей отмечают, что на сегодняшний день видеоконференции не могут составить достойную конкуренцию классическим лекциям. Преподаватели выделили недостатки видеоконференций, среди которых технические недостатки, такие как нестабильная связь, невозможность определить слушает студент или занимается своими делами при выключенной камере, психологические моменты – отсутствие прямого контакта преподавателя со студентом и др.

В свою очередь, 10% преподавателей отметили, что видеоконференции являются достойной альтернативой классических лекций. Они выделили преимущества видеоконференций, а именно: возможность ведения лекции у студентов, которые находятся дома по причине болезни, простота, возможность записать лекцию для просмотра студентами, которые отсутствовали на видеоконференции по тем или иным причинам.

78% преподавателей отметили, что у многих студентов в период дистанционного обучения и ведения лекций в формате видеоконференций упала успеваемость по английскому языку. 75% преподавателей также отметили, что упала и посещаемость. По нашему мнению, два этих показателя взаимосвязаны, поскольку студенты по тем или иным причинам не посещали видеоконференции – упала и успеваемость. Преподаватели отмечали, что такой образовательный формат расслабляет, есть возможность отложить учебу «на потом», что, в конечном итоге, приводит к снижению успеваемости и усвояемости материала.

Таким образом, можно заключить, что студенты и преподаватели, в большинстве своем, предпочитают классические лекции видеоконференциям, несмотря на удобство данного формата проведения занятий. Между тем, хотелось бы отметить, что большинство студентов и преподавателей отмечали значимость использования ИКТ в образовательном процессе в целом. Использование видео- и аудиоматериалов,

компьютерных программ, электронных обучающих ресурсов и т.д., определенно, помогает и повышению мотивации студентов к изучению английского языка и к хорошей усвояемости материала. Однако, исследование показало, что чрезмерное использование ИКТ на занятиях по иностранному языку имеет также ряд негативных последствий. В большей степени некоторые из них становятся заметными только сейчас, в связи с быстрым и стремительным переходом на дистанционную форму обучения. Одним из недостатков является недостаток живого диалогического общения между студентами и преподавателями, в результате чего происходит снижение речевой активности студентов. Также из-за большого количества информации в сети Интернет и практически мгновенного доступа к информационным ресурсам большинство обучающихся предпочитает находить информацию в поисковых системах, нежели в учебной литературе. По нашему мнению, назвать такой способ получения информации эффективным нельзя. Кроме того, это способствует потере навыков самостоятельного мышления. Не стоит также забывать о том, что информация в сети Интернет может быть, как достоверной, так и наоборот.

В заключении хотелось бы отметить, что использование ИКТ, в том числе, проведение видеоконференций в процессе обучения английскому языку в ВУЗах необходимо. Это обусловлено современными реалиями, в которых инновационные цифровые технологии являются неотъемлемой частью учебного процесса. Между тем, на данный период времени дистанционное образование не может стать достойной альтернативой классической форме обучения.

Список литературы

1. Капитонова, Т.И., Московкин, Л.В., Щукин, А.Н. Методы и технологии обучения русскому языку как иностранному / Т.И. Капитонова, Л.В. Московкин, А.Н. Щукин // под ред. А. Н. Щукина. М.: Русский язык ; Курсы, 2008. 312 с.
2. Пассов, Е.И. Основы коммуникативной теории и технологии иноязычного образования : метод. пособие для препод. рус. яз. как иностр. / Е.И. Пассов, Н.Е. Кузовлева. – М. : Русский язык ; Курсы, 2010. – 568 с.
3. Сысоев, П.И. Информационные и коммуникационные технологии в лингвистическом образовании : учеб. пособие / П.И. Сысоев, – М. : Либроком, 2013. – 264 с.
4. Ananyeva, M. (2014). “Blogfolios” and their role in the development of research projects in an advanced academic literacy class for ESL students. Boston : Springer US.
5. Brown, J.D. (2013). New ways of classroom assessment. Alexandria, VA : Teachers of English to Speakers of Other Languages.
6. Camilleri, M. A., & Camilleri, A. C. (2017). Digital learning resources and ubiquitous technologies in education. *Technology, Knowledge and Learning, 22*(1), 65–82.

Научное издание

ИННОВАЦИОННОЕ РАЗВИТИЕ СТРОИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА РЕГИОНА: ЗАДАЧИ, СОСТОЯНИЕ, ПЕРСПЕКТИВЫ

МАТЕРИАЛЫ
III Всероссийской научно-практической конференции
Себряковского филиала
ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет»

Михайловка – Волгоград, 15 октября 2020 г.

Главный редактор *Н.В. Горева*
Техническое редактирование *Е.С. Решетниковой*
Оформление обложки *Н.Н. Захаровой*

Печатается в авторской редакции.

Подписано в печать 25.12 2020 г. Формат 60x84/16.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Усл. печ. л. 19,6.
Уч.-изд. л. 21,0. Тираж 200 экз. (1-й завод 1–50 экз.). Заказ . «С» 169.

Волгоградский государственный университет.
400062 Волгоград, просп. Университетский, 100. www.volsu.ru

Отпечатано в издательстве
Волгоградского государственного университета.
400062 Волгоград, ул. Богданова, 32. E-mail: izvolgu@volsu.ru