

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН ПО АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М.В. ЛОМОНОСОВА
ИНСТИТУТ СПЕКТРОСКОПИИ РАН
КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

**III ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО АНАЛИТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
с международным участием**

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ



**Краснодар
29 сентября – 05 октября 2019 г.**

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН по АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М.В. ЛОМОНОСОВА
ИНСТИТУТ СПЕКТРОСКОПИИ РАН
КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

**III ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО АНАЛИТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
с международным участием**

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ

**г. Краснодар
29 сентября – 05 октября 2019 г.**

УДК 543

**III Всероссийская конференция по аналитической спектроскопии
с международным участием,
Краснодар, 29 сентября – 05 октября 2019 г.**

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Золотов Ю.А., академик – Почетный Председатель
Большов М.А., д.ф.-м.н. – председатель
Пупышев А.А., д.х.н. – зам. председателя
Темердашев З.А., д.х.н. – зам. председателя
Киселева Н.В., к.х.н. – ученый секретарь
Карандашев В.К., к.х.н.
Карпов Ю.А., академик РАН
Колотов В.П., чл.-корр. РАН
Лабусов В.А., д.т.н.
Лебедев А.Т., д.х.н.
Ревенко А.Г., д.т.н.
Сапрыкин А.И., д.х.н.
Спиваков Б.Я., чл.-корр. РАН
Филиппов М.Н., д.ф.-м.н.
Шпигун О.А., чл.-корр. РАН
Штыков С.Н., д.х.н.

Конференция проводится при финансовой поддержке
Министерства науки и высшего образования РФ, компаниями:
ООО «Аналит-Продактс», ООО «НКЦ “ЛАБТЕСТ”»,
ООО «ПрофЛаб», ООО «Троицкий инженерный центр»,
«ИНТЕРТЕК ТРЕЙДИНГ КОРПОРЕЙШН», ООО «НПО “СПЕКТРОН”»,
ООО «ВМК-Оптоэлектроника», ООО «ЦТС “Наука”»,
группа компаний «Интераналит», ООО «Термо Техно Инжиниринг»,
ООО «НПО “Спектроприбор”», АО «МС-АНАЛИТИКА»

ISBN 978-5-9905792-6-2

Переход от жесткой к нежесткой конфигурации молекулы триоксида водорода. Анализ данных полученных в результате расчета торсионного спектра молекулы

Желток В.А., Малевич А.Э., Пищевич Г.А.

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Zheltokvika@gmail.com

Молекула триоксида водорода (ТВ) HO_2OH является эталонным объектом во многих отношениях (in many ways is benchmark object). Во-первых, эта молекула является вторым после пероксида водорода представителем в ряду полиоксидов, соединений задаваемых формулой HO_nH ($n=2,3,4,5\dots$), интерес к которым у исследователей в последнее время несомненно усиливается. Во-вторых, молекула ТВ является простейшим представителем целого ряда молекул, обладающих двумя эквивалентными некооксиальными внутренними волчками. В третьих, молекула способна образовывать кластерные структуры за счет формирования водородных связей. Кроме того, молекула ТВ имеет две равновесные конфигурации, различающиеся взаимной ориентацией гидроксильных групп. Наконец, молекула ТВ потенциально является нежесткой поскольку, каждый из двух конформеров может существовать в двух конфигурационно-эквивалентных версиях, хотя вопрос о реальной жесткости или не жесткости этой молекулы до сих пор не анализировался. Многие исследователи указывают также на важную роль молекулы ТВ в окислительных процессах имеющих место в атмосферных явлениях и биологических системах и других важных химических реакциях.

На рисунке представлены квадраты волновых функций для первых четырех торсионных состояний молекулы ТВ, рассчитанные на CCSD(T)/cc-pVQZ уровне теории.

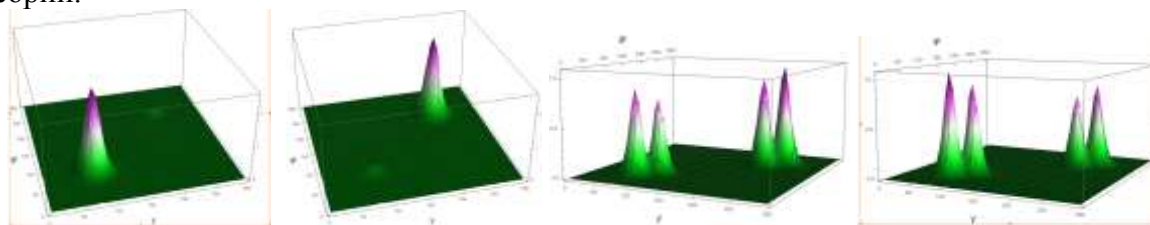


Рисунок – Квадраты волновых функций первых четырех (по порядку слева на право) торсионных состояний, рассчитанные на CCSD(T)/cc-pVQZ уровне теории

Как хорошо видно из рисунка, молекула ТВ в основном торсионном состоянии локализована в одном из двух глобальных минимумов на ППЭ. Когда энергия торсионных состояний увеличивается на $363,5 \text{ см}^{-1}$ взаимодействие между двумя конфигурациями глобального конформера становится существенным, хотя вероятность найти молекулу в одном из двух глобальных минимумов все еще не одинакова. Лишь после того, как энергия торсионных состояний увеличивается еще на 30 см^{-1} или более, вероятности нахождения молекулы НТ в двух глобальных минимумах сравниваются.

Выполнена классификация торсионных и спиновых состояний молекулы ТВ по неприводимым представлениям точечной группы C_{2v} , которая изоморфна группе молекулярной симметрии молекулы. Установлено, что анализ типов симметрии торсионных состояний должен выполняться отдельно для транс- и цис- конформеров молекулы.

Внутреннее вращение в молекуле метандиола

Кисурин Д., Малевич А.Э., Пицевич Г.А.

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

kisurinadasha@gmail.com

Молекула метандиола (МД) является простейшим представителем диолов и с достаточно давних времен используется в косметической и пищевой промышленности. Долгое время считалось, что молекуле МД присуща единственная равновесная конфигурация. Однако позднее было установлено, что молекула характеризуется двумя равновесными конфигурациями. Транс- конфигурация, в которой гидроксильные группы направлены противоположно, энергетически существенно предпочтительнее цис- конфигурации, в которой О-Н группы почти параллельны. Всплеск интереса к молекуле был недавно инициирован установлением того факта, что МД играет важную роль в формировании атмосферных аэрозолей, а также может присутствовать в межзвездном пространстве и в кометах. Поиск этой молекулы в космическом пространстве осложнен отсутствием на сегодняшний день зарегистрированных микроволновых и ИК спектров МД в газовой фазе, что обусловлено низкой стабильностью молекулы.

В приближении MP2/сс-рVQZ была рассчитана 2D поверхность потенциальной энергии молекулы метандиола, которая приведена на рисунке.

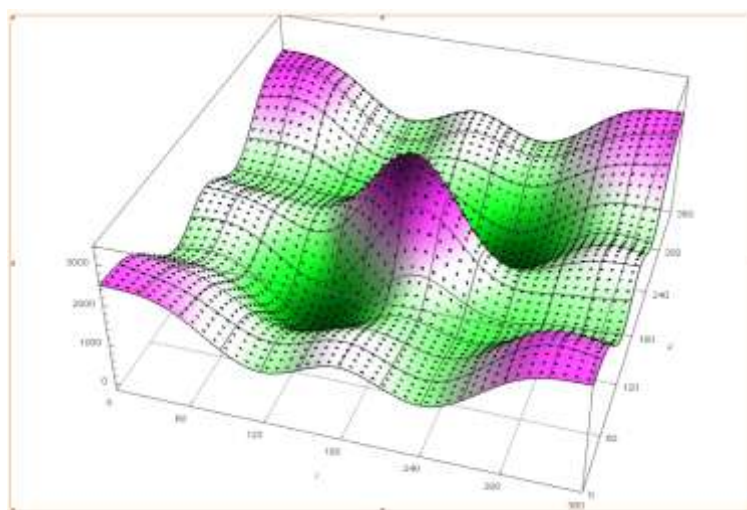


Рисунок – Рассчитанная в приближении MP2/сс-рVQZ 2D ППЭ молекулы МД. Точками на 2D ППЭ указаны узлы 2D равномерной сетки, в которых рассчитывалась потенциальная энергия

Также были рассчитаны торсионные ИК спектры МД и получены значения частот туннелирования для обоих конформеров молекулы.