

Звіт
за третій рік навчання в аспірантурі

Квантово-хімічне моделювання процесів електронного переносу за
участю гідрованих нітрогенвмісних гетероциклів

НАУКОВИЙ КЕРІВНИК: д.х.н., проф. ДЕСЕНКО Сергій Михайлович

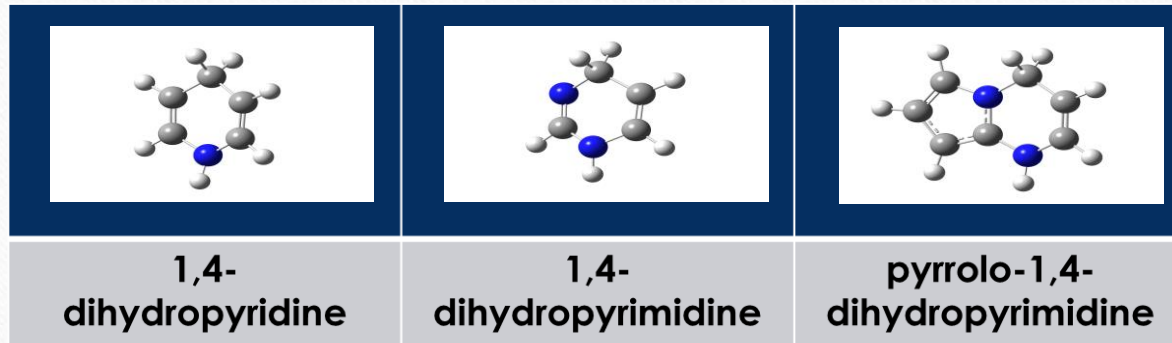
АСПІРАНТ 3-ГО РОКУ НАВЧАННЯ: ШИШКІНА Марія Олегівна

Освітня складова третього року аспірантури



- Освітню складову навчання за третій рік аспірантури було виконано в повному обсязі. Було проведено аудиторну та позааудиторну роботу в рамках асистентської педагогічної практики.

Наукова складова



M.O. Shyshkina, S.M. Desenko Heteroaromatization of 1,4-dihydropyridin, 1,4-dihydropyrimidine and pyrrolo-1,4-dihydropyrimidine: quantum chemical study, Structural Chemistry.

Методи:

- HF
- MP2
- B3LYP

Базіси:

- 6-311G(d,p)
- 6-311+G(d,p)
- 6-311++G(d,p)
- cc-pVDZ
- cc-pVTZ
- cc-pVQZ
- aug-cc-pVDZ

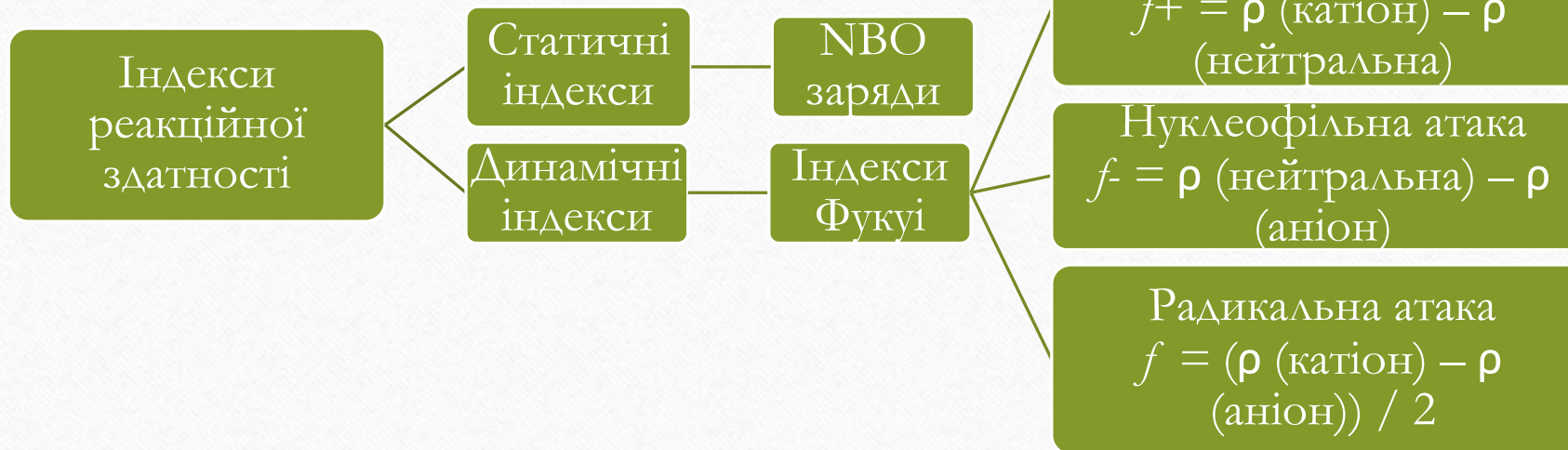
Моделі:

- Вакуум
- РСМ модель (вода як розчинник)
- РСМ модель з H₂O у явному вигляді (вода як розчинник)

Розподіл електронної густини в модельних молекулах

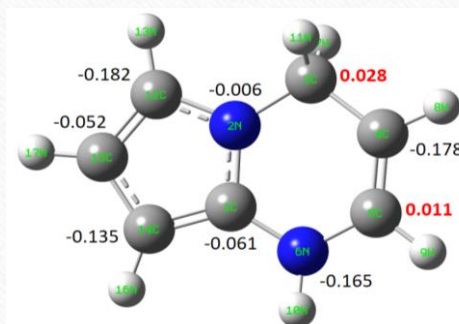
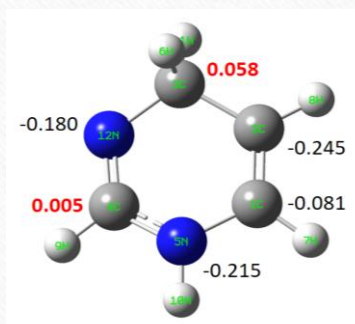
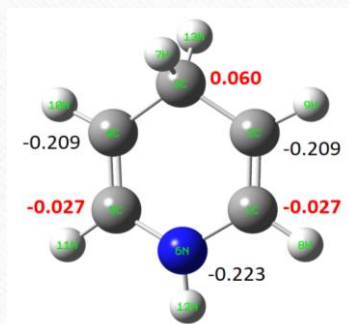
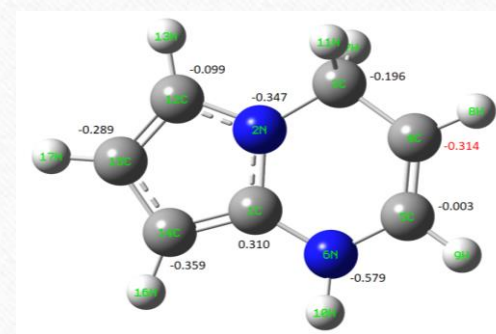
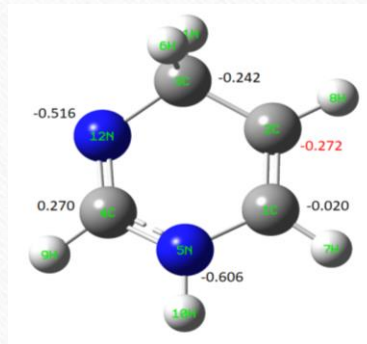
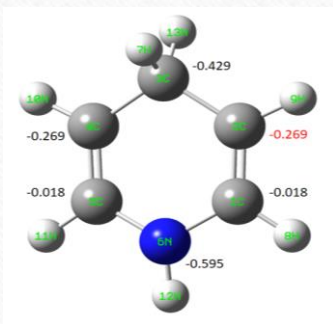


- Метод квантово-хімічних розрахунків:
- ❖ **V3LYP/сс-pVTZ з PCM моделлю поляризуючого оточення (вода як розчинник)**
- Вивчення розподілу електронної густини:
- ❖ **Natural Bonding Orbitals (NBO) метод**



Індекси реакційної здатності

NBO
заряди



Індекси
Фукуї

π -orbital
Lp(N)

π -orbital
Lp(N)

π -system
 π -orbital
Lp(N)

Розподіл електронної густини

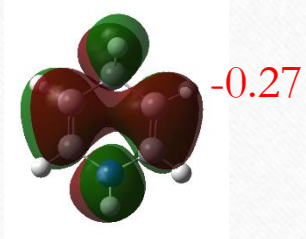
Нейтральна
молекула

$-e$

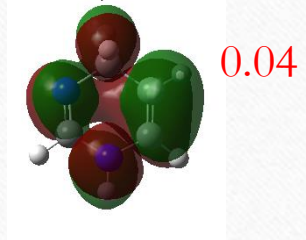
Катіон-радикал

$-H^+$

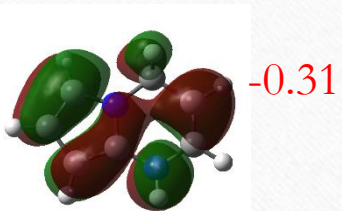
Радикал



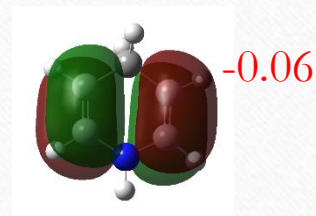
E(HOMO) -5.12 eV



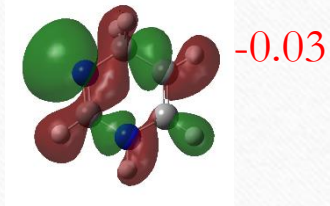
E(HOMO) -5.79 eV



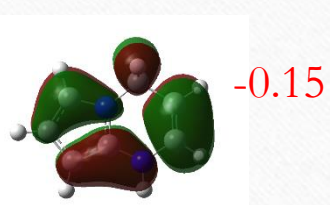
E(HOMO) -4.95 eV



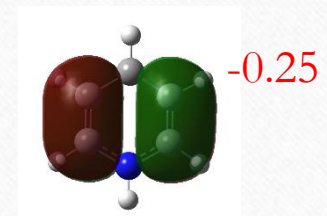
E(HOMO) -7.02 eV



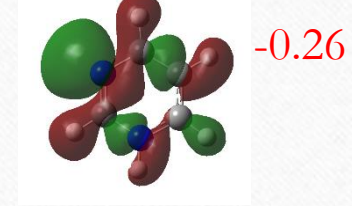
E(HOMO) -7.72 eV



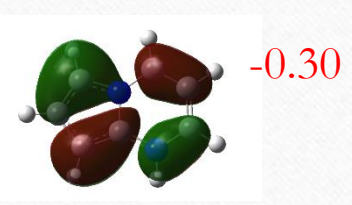
E(HOMO) -6.46 eV



E(HOMO) -3.22 eV

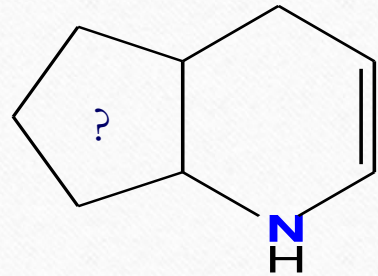


E(HOMO) -3.63 eV



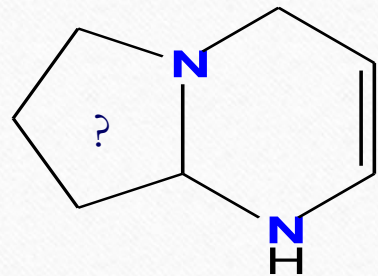
E(HOMO) -3.65 eV

Вплив анельованого циклу на розподіл електронної густини в 1,4-дигідрогетероциклах



Варіації:

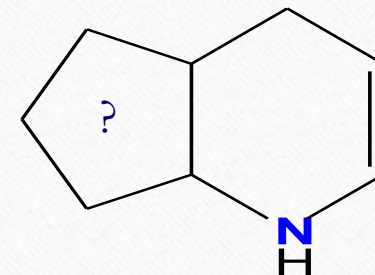
- Кількість та положення атомів Нітрогену в анельованому циклі



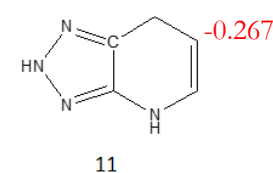
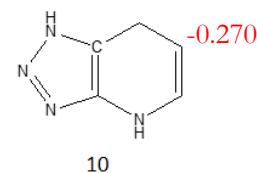
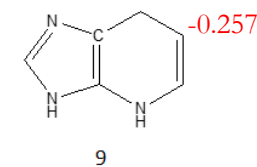
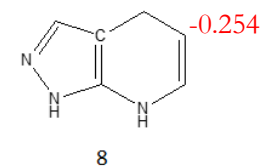
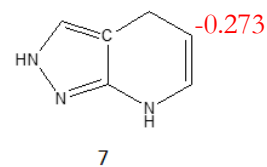
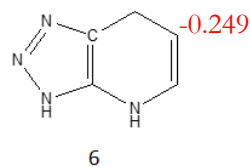
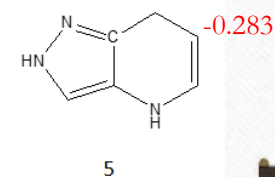
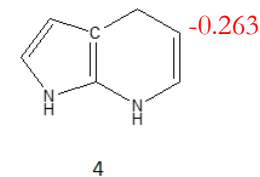
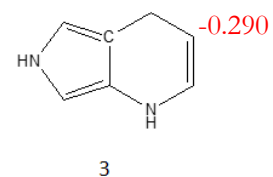
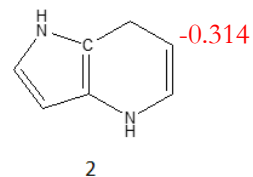
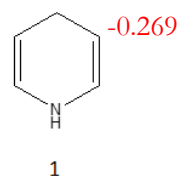
Що вивчалось:

- Потенціал першого одноелектронного переносу (I_1)
- Потенціал другого одноелектронного переносу (I_2)
- Різниця $I_1 - I_2$

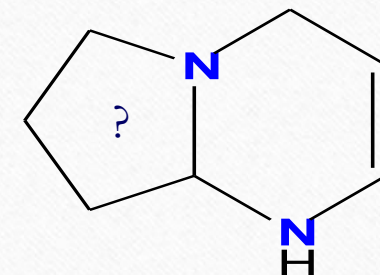
Співвідношення I_1 та I_2 при окисненні аннелюваних 1,4-дигідропіридинів



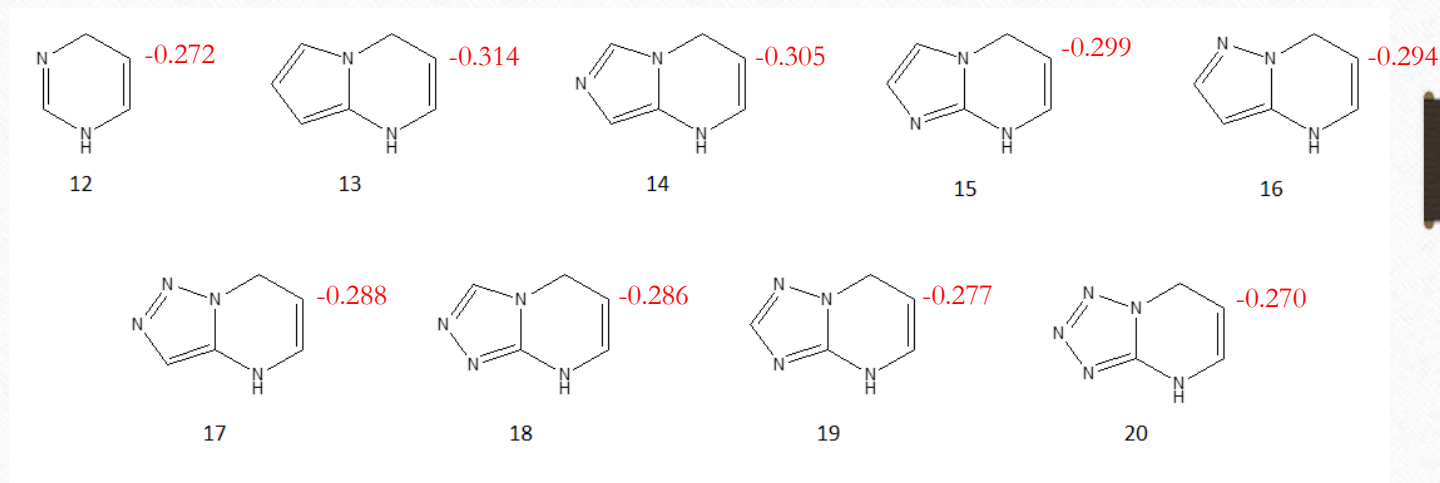
Molecules No	I_1	I_2	$I_1 - I_2$
1	4.83	3.00	1.83
2	4.44	2.84	1.60
3	4.73	3.05	1.68
4	5.00	3.28	1.72
5	5.27	3.61	1.66
6	4.48	2.86	1.62
7	5.17	3.70	1.47
8	4.57	3.12	1.45
9	4.86	3.44	1.42
10	4.99	3.41	1.58
11	5.26	3.80	1.46



Співвідношення I_1 та I_2 при окисненні аннелюваних 1,4-дигідропіримідинів



Molecules No	I_1	I_2	$I_1 - I_2$
12	5.42	3.42	2.00
13	4.66	3.36	1.30
14	5.01	3.70	1.31
15	5.10	3.62	1.48
16	5.26	3.62	1.64
17	5.55	3.98	1.57
18	5.60	4.03	1.57
19	5.65	3.88	1.77
20	5.99	4.30	1.69

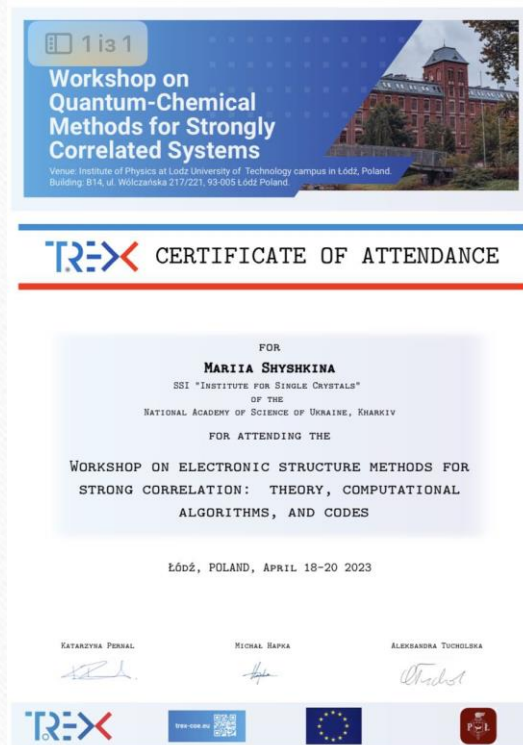


CYS-2023

- Прийняла участь у Всеукраїнській конференції молодих вчених, студентів та аспірантів з актуальних питань хімії (CYS-2023) з доповіддю на тему «Квантово-хімічне моделювання процесу електронного переносу в частково гідрованих нітрогенвмісних гетероциклах».



TREX Workshop on Quantum-Chemical Methods for Strongly Correlated Systems



Прийняла участь у міжнародній школі, що проходила у місті Лодзь, Польща.

Тема школи: квантово-хімічні розрахунки електронних структур з корельованими системами.



Дякую за увагу!