УДК: 544.144

Курочкин Георгий Александрович

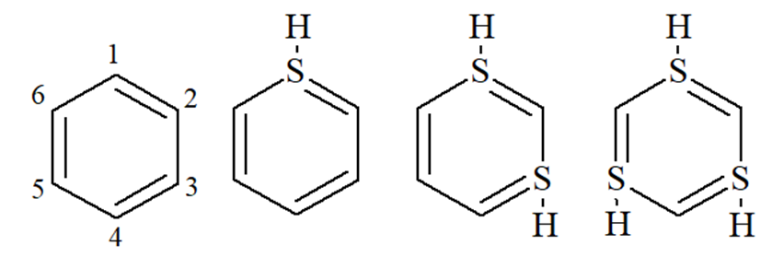
СРАВНЕНИЕ ГРУППОВЫХ ЗАРЯДОВ БЕНЗОЛА И ЕГО СЕРОСОДЕРЖАЩИХ АНАЛОГОВ

Руководители: Н. П. Русакова, Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии, кафедра общей физики

Геометрия молекул бензола (C6H6) и его моно- (C5SH6), ди- (C4S2H6) и трисеросодержащих (C3S3H6) (рис.) оптимизирована методом B3LYP программой Gaussian03. Заряды на атомах получены в рамках квантовой теории атомов в молекулах численным интегрированием с помощью пакета AIMALL, суммированы в заряды групп - *q*(*R*) и сведены в таблицу.



а) б) в) г)

Рисунок: Исследуемые молекулы: а) C6H6, б) C5SH6, в) C4S2H6, г) C3S3H6

Заряды групп СН в бензоле рваны нулю (табл.), хотя атомные параметры углерода и водорода различны (*q*(С) = 0,004а.е. и *q*(Н) = -0,004а.е.). Присутствие серы в цикле приводит к перераспределению электронной плотности (*ρ*(*r*)) и соответственно изменению *q*(СН) ароматических колец. В изучаемых структурах сера выступает донором *ρ*(*r*) для соседних атомов углерода и С, находящихся в *пара-*положении. Это сказывается на зарядах соответствующих групп СН (табл.). Наличие более одного атома S приводит к увеличению оттока *ρ*(*r*) с S в бассейны СН, что приводит к повышению *q*(SH) в C4S2H6 на 0,037а.е. по сравнению с *q*(SH) в C5SH6, а в C3S3H6 это изменение достигает 0,101а.е. по отношению к *q*(SH) в C5SH6.

Таблица: Сравнение зарядов групп *q*(*R*) бензола и его серосодержащих аналогов

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| группа | C6H6 | C5SH6 | C4S2H6 | C3S3H6 |
|  |  | **SH** | **SH** | **SH** |
| 1 СН | 0,000 | **0,355** | **0,392** | **0,456** |
| 2 СН | 0,000 | -0,187 | -0,364 | -0,444 |
| 3 СН | 0,000 | 0,032 | **0,392** | **0,401** |
| 4 СН | 0,000 | -0,044 | -0,234 | -0,369 |
| 5 СН | 0,000 | 0,032 | 0,047 | **0,401** |
| 6 СН | 0,000 | -0,187 | -0,234 | -0,445 |