

Рисунок. Электронно-микроскопическое изображение поверхности стали Ст.3 после осаждения черного покрытия.

По-видимому, образование черного покрытия происходит за счет катодного восстановления никеля и цинка из раствора. При этом одной из катодных реакций является восстановление серы из роданида аммония до элементарной серы, либо до сульфид ионов S^{2-} . В результате взаимодействия данных компонентов образуются сульфиды металлов, которые и формируют черное покрытие. Подтверждением данному предположению служит то, что в растворе для нанесения покрытий без роданида аммония черное покрытие не образуется.

При изучении поверхности стали Ст.3 после нанесения данного покрытия видно, что поверхность покрыта кристаллическими образованиями размерами от 0,5 до 1 мкм. Химический состав данных образований включает в себя (масс. %): никель – 51,7; цинк – 21,2; серу – 16,2; железо – 6,3 и кислород – 4,64.

ДИПОЛЬНАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ КОНФОРМЕРОВ

***n*-БИС-[4-(ГЕКС-2-ИЛОКСИКАРБОНИЛ)ФЕНИЛ]БЕНЗОЛА**

Хныкина К.А., Баргашевич Е.В., Подгорнов Ф.В.

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск

E-mail: khnykina.kseniya@mail.ru

Величина и направление электрического дипольного момента хиральных молекул играет ключевую роль в формировании хироптического отклика (спектра циркулярного дихроизма) как данных молекул, так и многокомпонентных систем, в которые они входят [1]. Как модуль, так и направление дипольного момента должны быть связаны с конформационным состоянием исследуемых хиральных молекул.

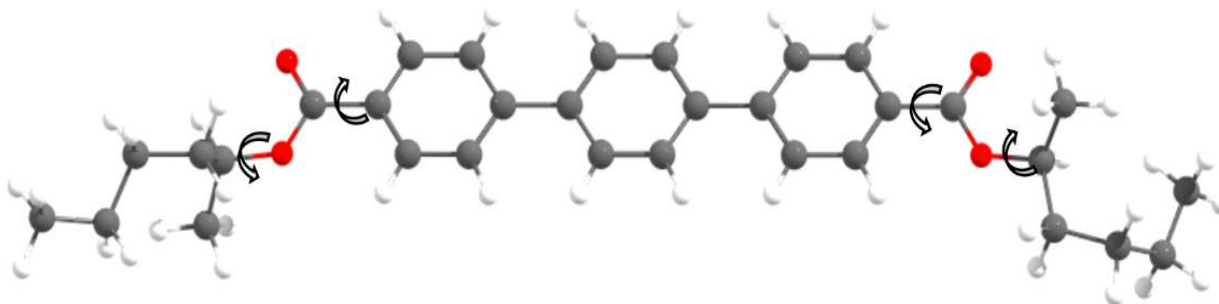


Рисунок. Молекула *n*-бис-[4-(гекс-2-илоксикарбонил)фенил]бензола.

Объектом исследований выступила молекулярная структура *n*-бис-[4-(гекс-2-илоксикарбонил)фенил]бензола, имеющая два асимметрических центра *S,S*-конфигурации. В нашем исследовании мы проанализировали, каким образом перестраивается дипольная поляризация при изменении конформационного состояния этой молекулы. Для этого систематическим вращением относительно выбранных связей генерировались структуры с последующей оптимизацией геометрии методом B3LYP/6-31G(d,p) [2] и вычислением дипольных моментов. Кроме того, разные конформеры генерировались методом молекулярной механики с использованием силовых полей UFF и MMFF94s.

Полученные таким образом конформеры отличались торсионными углами в углеводородных радикалах, присоединенных к карбоксильной группе, а трифенильный фрагмент мог иметь как винтовую, так и плоскую структуру. Обнаружено, что при варьировании углов в углеводородных радикалах молекулярный дипольный момент менялся незначительно: в диапазоне от 3.2 до 3.8 Д. Резкое изменение дипольного момента происходит при выходе из плоскости карбонильных групп и изменении их взаимной ориентации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и образования РФ, проект 4.1157.2017/ПЧ.

Список литературы

1. R. Naaman, D. N. Beratan, D. H. Waldeck, Properties of Chiral Molecules and Supramolecular Architectures // Verlag, Berlin, Heidelberg: Springer, 2011. 323 p.
2. A. A. Granovsky. Firefly version 8.0.1 <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>