

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

ИННОВАТИКА – 2011

Сборник материалов

**VII Всероссийской научно-практической конференции
студентов, аспирантов и молодых ученых
с элементами научной школы**

26–28 апреля 2011 г.

г. Томск, Россия

Т. 1

Под ред. проф. А.Н. Солдатов, доц. С.Л. Минькова

Организаторы:

- Национальный исследовательский Томский государственный университет
- Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
- Российский государственный университет инновационных технологий и предпринимательства
- Сургутский государственный университет
- ООО «ЛИТТ»

При поддержке Российского фонда
фундаментальных исследований

**Томск
2011**

дательных органов власти РФ. Так как государство так же непосредственно заинтересованно в развитии подобных инвестиционных процессов в стране. Это связано с тем, что с помощью инструментов доверительного управления временно свободные денежные средства населения напрямую задействуются в финансовом обороте страны, увеличивая экономический рост и потенциал страны.

Более широкое привлечение средств розничных инвесторов на рынок капитала через доверительное управление и ОФБУ в частности, возможно с помощью налоговой политики государства, которая предусматривала бы систему льгот при получении дохода от инвестирования в ОФБУ. Например, сократить размер или освободить от налога на доходы физических лиц при инвестировании в ОФБУ либо на определенную сумму, либо при получении определенной суммы дохода от инвестирования в ОФБУ.

Со стороны государства целесообразно внести поправки в законодательство, регулирующее деятельность ОФБУ и тем самым организовать вторичное обращение паев ОФБУ. Данная поправка значительно расширит возможности инвесторов. Благодаря этому рынок приобретет новое качество. У потенциальных инвесторов появится возможность приобретать доли ОФБУ через любого брокера в любом населенном пункте.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Макарычева И.В.* Рынок доверительного управления: мировой опыт и российская специфика. М., 2005. 169 с.

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО КРАСИТЕЛЯ ПРОДАНА (6-ПРОПИОНИЛ 2-ДИМЕТИЛНАФТАЛИН) В БЛИЗКОЙ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ ОБЛАСТИ

Т.Ю. Балакина, Ю.П. Морозова, О.М. Жаркова

Томский государственный университет

balakina_2@mail.ru

Флуоресцирующие молекулы с одновременным присутствием электронодонорных и электроноакцепторных групп широко используются в биохимических исследованиях в качестве зондов для изучения физико-хи-

мических свойств растворителей, поверхностей различной физической природы, больших биологических молекул, клеток и т.д. [1]. Кроме того, такие молекулы являются эффективными лазерными красителями [2].

В качестве объекта исследования нами была выбрана молекула продана (6-пропионил 2-диметилнафталин), которая является производной нафталина с одновременным присутствием пропионильной и диметиламино групп (рис. 1), а также молекула прона (6-пропионил нафталин) (рис. 2), являющаяся замещенной нафталина и содержащей только пропионильную группу – для выяснения роли донорной диметиламино группы в формировании полос поглощения.

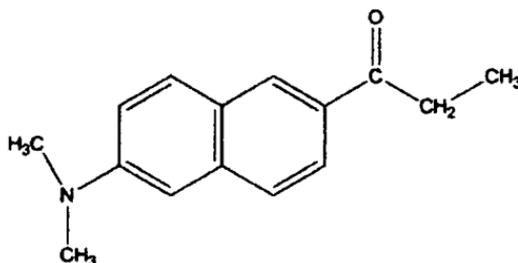


Рис. 1. Молекула продана

При изучении использовался комплексный подход, т.е. проводилось экспериментальное и теоретическое исследование.

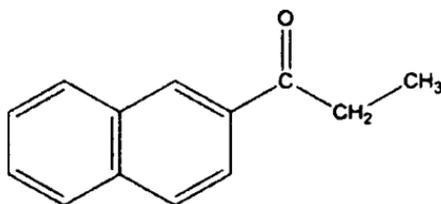


Рис. 2. Молекула прона

В качестве теоретических методов исследования использовались: метод молекулярной механики (ММ2) для оптимизации геометрии молекулы, имитация молекулярных движений молекулы исследовалась методом молекулярной динамики (пакет программ Chem. office 10.0), квантово-химические расчёты выполнялись, используя пакет программ, воспроизведённый на основе метода ЧПДП/С (частичное пренебрежение дифференциальным переключением) со спектроскопической параметризацией.

Спектры поглощения регистрировались с помощью двухлучевого спектрофотометра Cary 5000.

Приведём спектральные характеристики молекул прона и продана. В таблице приведены расчётные данные, полученные методом ЧПДП/С для энергий E_i , сил осцилляторов переходов f_i и дипольных моментов μ_i молекул в различных электронных состояниях.

S_i	Прон ($\mu_{gr} = 4,05$)			Продан ($\mu_{gr} = 6,00$)		
	$E, \text{см}^{-1}$	f	μ	$E, \text{см}^{-1}$	f	μ
S_1	28 640- $\pi\pi^*$	0,0000	1,34	27 810- $\pi\pi^*$	0,0007	5,12
S_2	32 660- $\pi\pi^*$	0,02517	4,77	29 410- $\pi\pi^*$	0,0209	8,23
S_3	36 360- $\pi\pi^*$	0,17043	5,60	30 650- $\pi\pi^*$	0,0082	8,18
S_4	40 350- $\pi\sigma^*$	0,00004	3,29	32 180- $\pi\sigma^*$	0,4222	11,70
S_5	42 590- $\pi\pi^*$	1,1537	5,19	35 230- $\pi\sigma^*$	0,0003	11,74
S_6	42 790- $\pi\sigma^*$	0,0034	7,59	37 300- $\pi\pi^*$	0,0001	6,33
S_7	44 480- $\pi\pi^*$	0,2259	6,88	39 070- $\pi\pi^*$	0,4049	11,75
S_8	44 540- $\pi\sigma^*$	0,0067	3,64	39 140- $\pi\sigma^*$	0,0238	7,73
S_9	44 640- $\pi\sigma^*$	0,0061	3,52	40 040- $\pi\pi^*$	1,1450	6,88
S_{10}	45 220- $\pi\pi^*$	0,0477	3,76	41 210- $\pi\sigma^*$	0,2270	9,74

Геометрия основного состояния определялась теоретическими методами, в параметризации которых учтен вклад универсальных взаимодействий. Для подтверждения правильности выбранной геометрии, необходимо сравнение теоретических и экспериментальных данных. Спектр поглощения продана (рис. 3) был снят в неполярном растворителе (гексан), с концентрацией молекулы $1,3 \times 10^{-4}$ М при комнатной температуре.

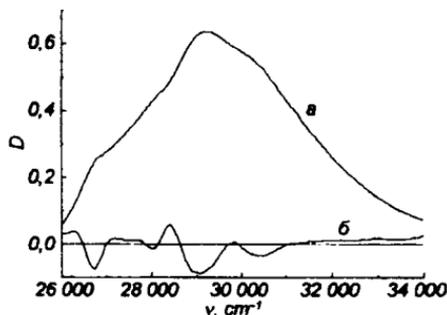


Рис. 3. Спектр поглощения продана в гексане (а) и метод второй производной (б)

Представленный спектр соответствует нескольким электронным переходам. Для разделения спектра нами был использован метод второй производной. Результаты этого метода показали наличие четырех минимумов (26 600, 27 700, 28 980, 30 300), в области 35 000–25 000 см^{-1} .

Для молекулы продан существует ряд экспериментальных и теоретических данных по положениям энергетических уровней, силам осциллятора и дипольным моментам [2–5].

Авторами [5] была сделана попытка интерпретации экспериментального спектра поглощения продана в циклогексане. Ими были определены энергии, силы осциллятора, дипольные моменты и природа для десяти синглетных состояний, используя методы DFT/SCI, ZINDO, AM1/CISD [5]. При расчёте рассматривалась геометрическая структура основного состояния продана, оптимизированная методом AM1/CISD. Наилучшее согласие экспериментальных и теоретических данных для плоской геометрической структуры продана авторы получили методом DFT/SCI, для которого два нижних синглетных состояния имеют природу $\pi\pi^*$ типа, а третье – $n\pi^*$. Такая же природа состояний получена и методом AM1/CISD. ZINDO/S метод показывает, что нижнее состояние – $n\pi^*$ -типа, второе и третье – $\pi\pi^*$ типа. Изменение дипольного момента согласно [5] при переходе из основного в нижнее $\pi\pi^*$ для DFT/SCI метода – 10,3 D , для ZINDO метода – 1,8 D и для метода AM1/CISD – 3,8 D .

Сравнивая результаты [5] и наши, полученные методом ЧПДП, можно отметить, что с методом ZINDO/S мы наиболее согласны, несмотря на то, что авторы [5] считают его наименее точным, а результаты маловероятными. В методе DFT/SCI дипольный момент в состояниях S_1 и S_2 имеет значение 16 D . Такой дипольный момент не может соответствовать ни состоянию $n\pi^*$ -типа, ни состоянию $\pi\pi^*$ -типа. Результаты метода AM1/CISD не согласуются с полученными нами данными по силам осцилляторов переходов.

Перейдем к обсуждению результатов распределения зарядов в молекуле продан и прон.

Поскольку в молекуле продана присутствуют электронно-донорная и электронно-акцепторная группы, укажем состояния, которые являются зарядопереносными. В основном состоянии отрицательный заряд на атоме кислорода в 2 раза превышает заряд на атоме азота. В возбужденном $\pi\pi^*$ -состоянии S_2 заряд увеличивается на атоме кислорода, и значительно уменьшается на атоме азота. Состояния S_4 и S_5 также являются зарядопереносными.

Наличие диметиламино группы при сравнении молекулы прона и продана показывает примерно одинаковое положение $\pi\pi^*$ -состояния, а для состояний $\pi\pi^*$ -типа наблюдается сдвиг в сторону меньших частот.

Для молекулы прон в основном состоянии сильный отрицательный заряд локализован на атоме кислорода. В состоянии S_1 ($\pi\pi^*$ -типа) заряд на атоме кислорода значительно уменьшается и отрицательный заряд с атома кислорода распределяется между атомами углерода C_1-C_{10} ароматического кольца. В состояниях S_2 и S_3 ($\pi\pi^*$ -типа) отрицательный заряд на атоме кислорода по сравнению с основным состоянием, практически не изменяется.

Состояния S_2 и S_4 для молекулы прон являются зарядопереносными. Перенос заряда наблюдается с атомов углерода нафталинового ядра на атом кислорода карбонильной группы для состояния S_2 , а для состояния S_4 перенос заряда происходит с атома кислорода на атомы углерода нафталинового кольца.

Полученные данные необходимы для выяснения взаимодействий флуоресцентных зондов с биологическими объектами (мембраны).

Работа выполнена при поддержке Фонда Дмитрия Зимина «Династия» по Стипендиальной программе.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Добрецов Г.Е.* Флуоресцентные зонды в исследовании клеток, мембран и липопротеинов. М.: Мир, 1989. 500 с.
2. *Parusel A.B.J., Schamschule R., Köhler G.* Nonlinear optics. A semiempirical study of organic chromophores // J. Mol. Structure (Theoch). 2001. № 3. P. 253–261.
3. *Лакович Дж.* Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986. 496 с.
4. *Lakowich J.R.* Principles of fluorescence spectroscopy / 2nd ed. New York: Kluwer Academic Plenum Publishers, 1999. 698 p.
5. *Parusel A.B.J., Nowak W., Grimme S. et al.* Comparative theoretical study on charge-transfer fluorescence probes: 6-propanonyl-2-(N, N-dimethylamino)naphthalene and derivatives // J. Phys. Chem. 1998. № 102. P. 7149–7156.

ОЦЕНКА ИННОВАЦИОННОГО ПРОЕКТА КАК ОБЪЕКТА ИНВЕСТИЦИЙ

О.В. Нургулиева

Дальневосточный федеральный университет
Olka_89_89@mail.ru

Россия активно становится на инновационный путь развития. Формируется сложная инфраструктура инновационного сегмента. Как следствие,