

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт цветных металлов и материаловедения

Кафедра органической и аналитической химии

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
_____ Б.Н. Кузнецов

« ____ » _____ 2018г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ
РАСЧЕТ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ФЕРОМОНОВ
ЛЕСНЫХ НАСЕКОМЫХ

04.04.01 Химия

04.04.01.02 – Аналитическая химия

Научный руководитель _____ доцент, канд.хим.наук _____ Ф.Н. Томилин

Выпускник _____ П.В. Артюшенко

Рецензент _____ ст.науч.сотр., д-р физ.-мат.наук А.С. Федоров

Красноярск 2018

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа по теме «Расчет спектральных характеристик феромонов лесных насекомых» содержит 59 страниц текстового документа, ссылки на 49 использованных источников, 14 рисунков и 5 таблиц.

ФЕРОМОНЫ, ДЛИНА ВОЛНЫ ПОГЛОЩЕНИЯ, ЭЛЕКТРОННАЯ И АТОМНАЯ СТРУКТУРА, МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ОРБИТАЛИ, ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ.

Целью работы является расчет спектральных характеристик феромонных молекул насекомых-вредителей для оценки устойчивости феромонов к воздействию солнечного излучения.

Для достижения поставленной цели необходимо было смоделировать структуры феромонов насекомых-вредителей, провести оптимизацию геометрии молекул, рассчитать характеристики атомной и электронной структуры в основном состоянии. Для того, чтобы оценить, как поглощение излучения влияет на устойчивость феромонов следует рассчитать значения длин волн, соответствующих максимуму поглощения, и атомную структуру молекул после релаксации.

В ходе расчета спектральных характеристик феромонных молекул было установлено, что феромоны поглощают в ультрафиолетовой части спектра. Воздействие солнечной радиации приводит к изменению электронной и атомной структуры, изменению длин связей и межатомных углов, что в свою очередь приводит к активации молекул и может привести к дезактивации феромонов.

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт цветных металлов и материаловедения

Кафедра органической и аналитической химии

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

 Б.Н. Кузнецов

« 08 » 06 2018г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ
РАСЧЕТ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ФЕРОМОНОВ
ЛЕСНЫХ НАСЕКОМЫХ

04.04.01 Химия

04.04.01.02 – Аналитическая химия

Научный руководитель  доцент, канд. хим. наук Ф.Н. Томилин

Выпускник  8.06.2018 П.В. Артюшенко

Рецензент  ст. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук А.С. Федоров

11.06.2018г.

Красноярск 2018