

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра оптики и биофотоники

Исследование моделей молекулярных систем порфирина

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

Студентки 2 курса 2223 группы

Направления 03.04.02 «Физика»

Института физики

Матюшкиной Светланы Владимировны

Научный руководитель

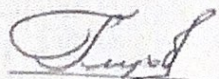
Зав. лабораторией, к.ф.-м.н.

должность, уч. степень, уч. звание

Заведующий кафедрой оптики и биофотоники

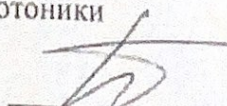
профессор, д. ф.-м. н.

должность, уч. степень, уч. звание


дата, подпись

Е.Г. Глуховской

инициалы, фамилия


дата, подпись

В. В. Тучин

инициалы, фамилия

Саратов 2024 год

Введение. Модели играют важную роль в химических исследованиях, помогая нам понять и объяснить различные химические явления и процессы. Они представляют собой упрощенные идеализированные представления реальных систем, которые позволяют нам анализировать и предсказывать их поведение.

Одной из основных ролей моделей в химических исследованиях является объяснение и понимание структуры и свойств веществ. Модели помогают нам представить, как атомы и молекулы устроены и как они взаимодействуют друг с другом. Например, шаростержневая модель позволяет нам визуализировать молекулярную структуру вещества и понять, какие связи существуют между атомами.

Кроме того, модели помогают нам предсказывать и объяснять химические реакции. Они позволяют нам увидеть, какие атомы и молекулы участвуют в реакции, какие связи образуются и разрушаются, и какие продукты образуются в результате. Модели также позволяют нам определить энергетические изменения, происходящие во время реакции, и предсказать ее скорость и направление.

Модели также используются для прогнозирования и предсказания новых химических соединений и материалов. Они позволяют нам исследовать различные комбинации атомов и молекул и предсказывать их свойства и реакционную способность. Это особенно полезно в разработке новых лекарственных препаратов, катализаторов и материалов с определенными свойствами.

Кроме того, модели используются для оптимизации процессов синтеза и производства. Они позволяют нам предсказывать оптимальные условия реакции, оптимизировать катализаторы и реакционные смеси, и улучшать эффективность и результаты производственных процессов.

Однако, необходимо отметить, что модели имеют свои ограничения и осложнения. Они являются упрощенными представлениями реальных систем и могут не учитывать все факторы и взаимодействия, которые могут влиять на

химические явления. Поэтому, модели всегда нужно проверять и подтверждать экспериментальными данными, чтобы убедиться в их точности и применимости [1].

Современные методы изучения молекулярных объектов позволяют получить достаточно четкие представления о структуре и физических свойствах молекул, особенности которых, однако, невозможно детализировать на основании результатов только экспериментального исследования. Особенно это касается оптических свойств молекулярных систем в различных фазовых состояниях. Методы молекулярного моделирования уже на протяжении последних двух десятилетий входят в арсенал современных теоретических методов исследования строения вещества [2].

Таким образом, **целью** моей работы является построить модели молекул и изучить их физические данные.

Из цели следуют **задачи**, поставленные в рамках магистерской работы:

1. Произвести поиск и анализ информации по вопросам ВКР.
2. Изучить методы квантово-химического моделирования.
3. Освоить программы по моделированию HyperChem, ChemCraft и Orca.
4. Исследовать молекулы порфирина, тетрафенилпорфирина, (TPP), TPP²⁻.
5. Провести расчёты взаимодействия TPP с квантовыми точками CdSe и ZnS.

Данная выпускная квалификационная работа включает в себя введение, две главы основного содержания, заключение и список используемой литературы.

Работа состоит из 45 страниц, 46 рисунков, 2 таблиц, 17 позиций списка литературы

Основное содержание работы. Главной целью моей работы является изучение взаимодействия молекулы тетрафенилпорфирина (TPP) с другими молекулами и с квантовыми точками CdSe и ZnS. Для того чтобы успешно

провести данное исследование необходимо было изучить работу в программных пакетах HyperChem, ChemCraft и Orca.

Первая глава включает в себя изучение методов квантово-химического моделирования, программных пакетов, которые позволяют его выполнить, а также краткий теоретический обзор объектов исследования (порфирина и квантовых точек)

А именно, три большие группы: неэмпирические методы, также называемые методами *ab initio*; методы теории функционала плотности (DFT); и полуэмпирические методы. Более подробно были рассмотрены конкретно два метода AM1 – полуэмпирический метод и MM+ – метод молекулярной механики.

Вторая глава включает в себя исследование взаимодействия двух молекул TPP, а также возможность образования связи молекулярного комплекса TPP и квантовых точек CdSe и ZnS.

В программе HyperChem были построены молекулы и проведена геометрическая оптимизация, после чего в программном пакете Orca были вычислены такие параметры как: расстояние и валентные углы между атомами в молекуле, энергия оптимизации молекул, электрический дипольный момент и другие интересующие нас данные.

По итогам сравнения методов оптимизации AM1 и MM+ на примере молекул TPP и TPP²⁻ был сделан следующий вывод: расстояние между атомами в молекуле TPP²⁻ меньше чем у TPP. Это свидетельствует об увеличении межмолекулярного взаимодействия силы притяжения между атомами и увеличению энергии взаимодействия с другими молекулами. Валентный угол также уменьшился. Это приводит к увеличению энергии взаимодействия с другими молекулами (рисунки 1 и 2).

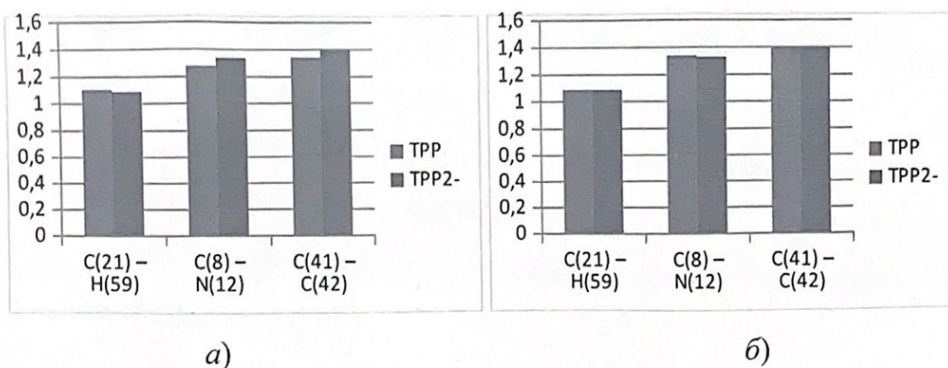


Рисунок 1

1 – Сравнение расстояния между атомами в молекулах TPP и TPP²⁻

а) AM1; б) MM+

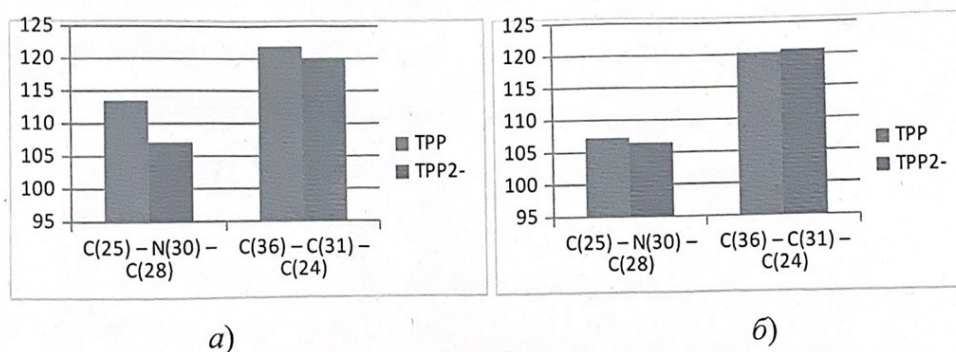


Рисунок 2

2 – Сравнение валентных углов в молекулах TPP и TPP²⁻

а) AM1; б) MM+

Кроме того, были рассмотрены несколько случаев взаимодействия молекул TPP: когда они неперекрывают друг друга в пространстве, частично перекрывают, перекрывают наполовину и полностью перекрывают друг друга.

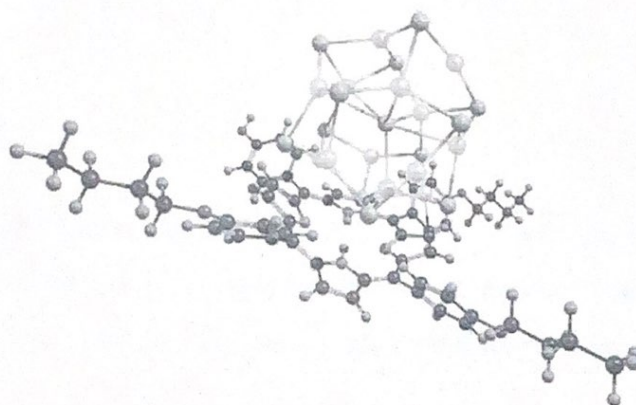
Согласно оптимизации методами AM1 и MM+ двух молекул TPP и TPP²⁻ был сделан вывод, что данным молекулам не свойственно образование квантово-химической связи.

Также было проведено исследование взаимосвязи молекулы TPP и квантовой точки CdSe. Вычислен параметр энергии. Расчёты были выполнены

в программе Orca, а визуализация – в программе Chemcraft.

Рассмотрены два случая расположения квантовой точки. Первый – когда квантовая точка располагается около макроцикла молекулы ТТР. Второй – квантовая точка располагается в ортоположении заместителя.

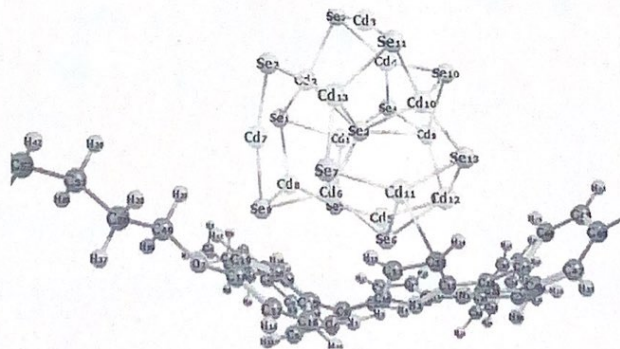
Квантовая точка CdSe около макроцикла TPP (рисунок 3).



Рисунок

3 – Связь квантовой точки CdSe с молекулой ТТР

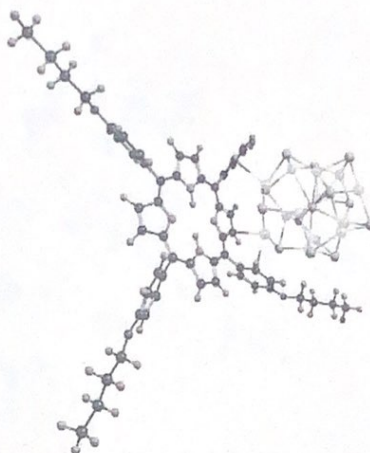
По результатам расчётов квантовая точка образовала связь между атомами Cd11 и C12, энергия взаимодействия равна -36088.382 (рисунок).



Рисунок

4 – Образованные связи квантовой точки CdSe и TTP

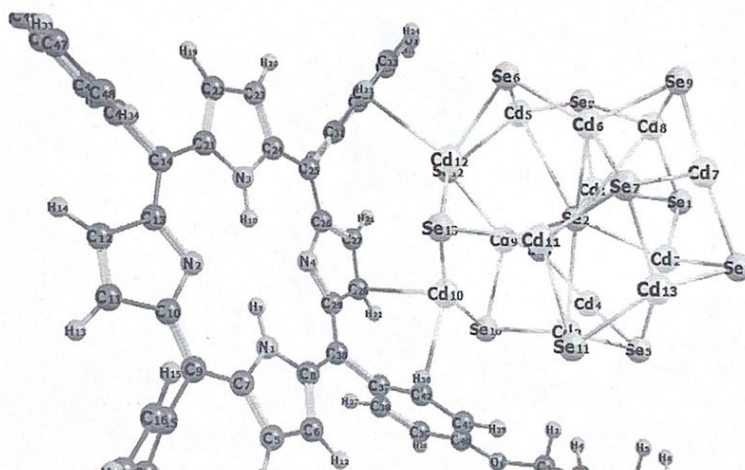
Квантовая точка CdSe в ортоположении заместителя TPP (рисунок 5).



Рисунок

5 – Связь квантовой точки CdSe с молекулой TPP

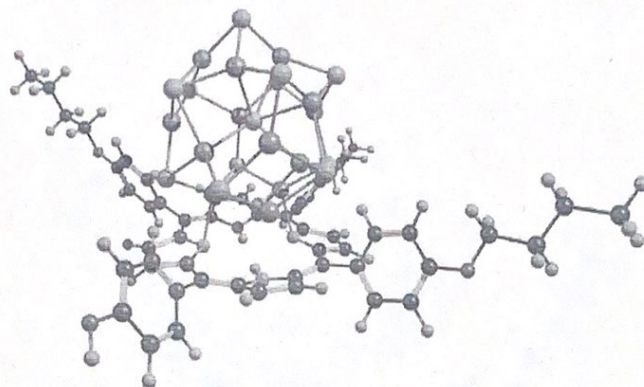
По результатам расчётов квантовая точка образовала связи с атомами C32 Cd12 и C28 и C42 с атомом Cd 10, а энергия взаимодействия равна -36088.379 (рисунок 6).



Рисунок

6 – Образованные связи квантовой точки CdSe и TPP.

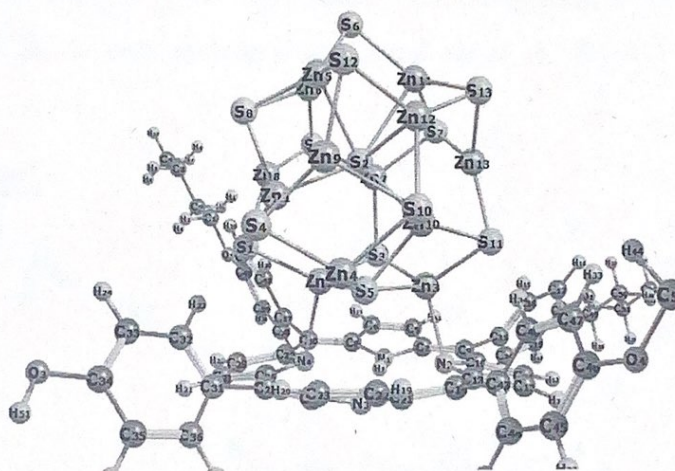
Квантовая точка ZnS около макроцикла TPP (рисунок 7).



Рисунок

7 – Связь квантовой точки ZnS с молекулой TPP

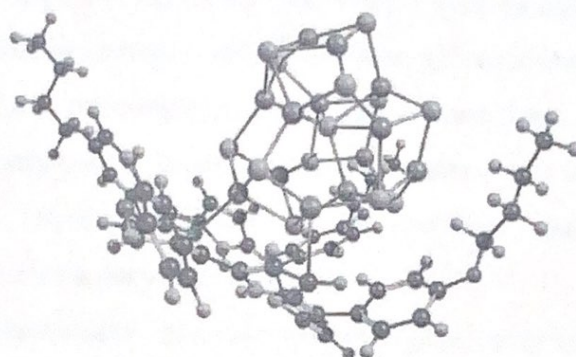
По результатам расчётов квантовая точка образовала связи с атомами Zn2 с N4 и Zn3 и N2 с атомом Cd 10, а энергия взаимодействия равна -30994.085 (рисунок8).



Рисунок

8 – Образованные связи квантовой точки ZnS и TPP

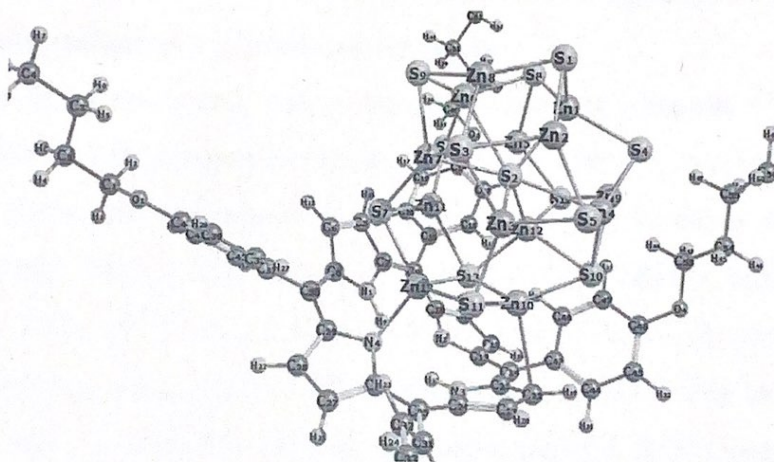
Квантовая точка CdSe в ортоположении заместителя TPP (рисунок9).



Рисунок

9 – Связь квантовой точки ZnS с молекулой ТТР

По результатам расчётов квантовая точка образовала связи с атомами Zn12 N4 и Zn10 C22, а энергия взаимодействия равна -30994.091 (рисунок 10)



Рисунок

10 – Образованные связи квантовой точки ZnS и ТТР.

Заключение. В ходе выполнения данной работы были изучены на практике методы квантовой химии MM+ и AM1. Квантовая химия использует эти методы для теоретического исследования химических частиц и их превращений.

Был изучен интерфейс программ ORCA, Chemcraft, HyperChem. На

основе методов AM1 и MM+ были исследованы молекулы TPP, TPP²⁻, а так же просчитаны взаимодействия молекулы TPP с квантовой точкой ZnS.

Метод AM1 хорошо передает структуру, термодинамику, дипольные моменты, потенциалы ионизации, колебательные частоты этих соединений. Не включает параметры большинства переходных элементов. Однако, данный метод очень энергозатратен и расчёты в нём занимают очень много времени.

Метод MM+ проводит расчёты на порядок быстрее, но после проведения, но уступает в расчётной точности.

Во время выполнения данной работы были получены теоретически рассчитанные данные по валентным углам, расстояние между атомами в молекулах, энергии оптимизации, ЭДМ для молекул TPP и TPP²⁻. Сравнив полученные результаты сделан следующий вывод: расстояние между атомами в молекуле TPP²⁻ меньше чем у TPP. Это приводит к увеличению силы притяжения между атомами и уменьшению энергии взаимодействия с другими молекулами. Валентный угол также уменьшился. Это приводит к увеличению энергии взаимодействия с другими молекулами.

Также было проведено исследование моделей порфирина с квантовыми точками CdSe и ZnS которое показало взаимодействие молекулы TPP и КТ. В случае КТ CdSe, расположенной около макроцикла TPP, связь образовалась между атомами Cd11 и C12. При расположении КТ CdSe в ортоположении заместителя TPP – C32 Cd12 и C28 и C42 с атомом Cd 10. В случае КТ ZnS, расположенной около макроцикла TPP, связь образовалась между атомами Zn2 с N4 и Zn3 и N2 с атомом Cd 10. При расположении КТ ZnS в ортоположении заместителя TPP – Zn12 N4 и Zn10 C22.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Моделирование в химии: понятие, типы и применение в научных и промышленных исследованиях [Electronic resource]. URL: <https://nauchniestati.ru/spravka/modeli-v-himii/> (accessed: 06.06.2024).
2. Grimme S. et al. Density functional theory with dispersion corrections for supramolecular structures, aggregates, and complexes of (bio)organic molecules // Org Biomol Chem. 2007. Vol. 5, № 5. P. 741–758.

 / Матвеев С.В.