

Министерство образования и науки Российской Федерации  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра теоретической физики

**Исследование межмолекулярного взаимодействия в бегеновой  
кислоте и его проявление в ИК-спектре методом  
молекулярного моделирования**

АВТОРЕФЕРАТ ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ  
БАКАЛАВРА

Студента 4 курса 431 группы физического факультета  
Фирсунина Сергея Николаевича

Направление 03.03.02 «Физика»  
Профиль "Фундаментальная и экспериментальная физика"

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор

Л.М. Бабков

Заведующий кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

Л.М. Бабков

Саратов 2017 год

## Введение

Использование кванто-механических расчетов для предсказания геометрического строения, энергии, термодинамических характеристик для известных и предполагаемых молекул является, в настоящее время, одним из востребованных и быстроразвивающихся методов физическо-химических исследований. Особую ценность этот метод приобретает в случае предсказания свойств неизвестных соединений, синтез которых может являться достаточно сложной процедурой, требующей больших затрат времени и материальных ресурсов исследователей. К тому же, на современном этапе развития компьютерной техники и создания высокопроизводительных и универсальных программ для квантовой химии, существует возможность расчета химических свойств соединений с очень высокой точностью и надежностью.

Одна из таких программ по расчету структуры и свойств молекул использована в работе. Со времени своего появления GAUSSIAN в 1970 г. вышло несколько версий этой программ, в каждую из которых были включены все достижения развития квантовой химии и программирования на определенном этапе. Последняя существующая версия в настоящий момент есть GAUSSIAN-09 D.01 выпущенная в 2013 году.

Основной целью выпускной квалификационной работы является исследование с помощью программы GAUSSIAN межмолекулярного взаимодействия, и интерпретация полученных данных в рамках изучаемого вещества.

Объектом исследований, результаты которых представлены в выпускной квалификационной работе, стали биоорганические соединения из карбоновых кислот - бегеновая кислота, интерес к которым в настоящее время возрос со стороны молекулярной биофизики, физики твёрдого тела и оптики.

## **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

### **Цель выпускной квалификационной работы**

Целью выпускной квалификационной работы является изучение современных методов молекулярного моделирования используемых, в приложениях к конкретным молекулярным системам (бегеновая кислота):

- метод теории функционала плотности (ТФП),
- функционалы,
- базисные наборы.

Использование методов ТФП для моделирования структуры колебательных спектров (соединений)

### **Задачи выпускной квалификационной работы**

Методом ТФП рассчитать внутримолекулярные параметры бегеновой кислоты: минимальная энергия, оптимальная геометрия, механические параметры (силовые константы), электрооптический (дипольный момент, тензор поляризуемости). Расчет колебательного спектра бегеновой кислоты (частоты, формы, интенсивности или сечение рассеяния, нормальных колебаний). Интерпретация измеренных спектров.

### **Структура и объём работы**

Выпускная квалификационная работа состоит из введения, двух глав, списка используемой литературы и приложения. Общий объём работы составляет 36 страницы, 16 рисунков. Библиография включает 20 наименований.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

Во **введении** сформулированы основная цель и задачи выпускной квалификационной работы.

В **первой главе** указаны основные физико-химические свойства (конформационная мобильность, полиморфизм) исследуемых биосоединений, которые в значительной степени определяются водородной

связью. Эти свойства могут быть описаны на основании анализа измеренных колебательных спектров биосоединений и результатов моделирования их структуры и спектров. Кратко обсуждены теоретические методы исследования структуры и свойств биосоединений. Более подробно описаны базисные наборы и методы теории функционала плотности (ТФП). Результатом рассмотрения стал выбор метода ТФП, функционала B3LYP и базисов 6-31G (d), 6-31G (d,p) [1,2] для молекулярного моделирования

Во **второй главе** обсуждены особенности структуры, полиморфизм и колебательные спектры бегеновой кислоты по данным эксперимента и молекулярного моделирования.

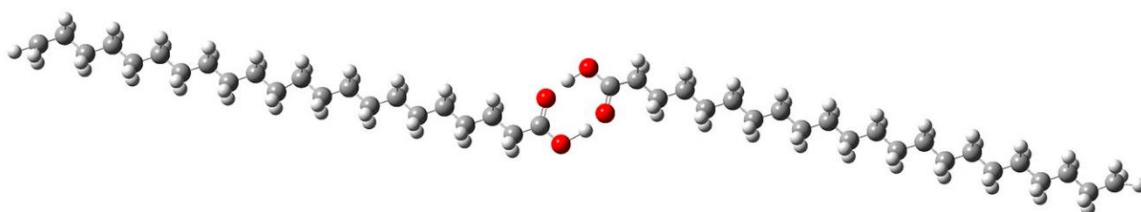


Рис. 1. Строение димера бегеновой кислоты

Таблица 1. Геометрические параметры димеров бегеновой кислоты

	Длина связи, °А			Углы между связями, °	
	Мономер	Димер		Мономер	Димер
C = O	1,214	1,221	O = C – O	123,1	124,2
C – O	1,359	1,342	C – O – H	107,1	110,4
O – H	0,974	1,010	O – C – C	112,4	111,8
C – C	1,513	1,517	O = C – C	124,2	123,2
C – H	1,099	1,089	C – C – H	106,6	105,6
H ... O		1,686	H – C – H	104,3	105,2
O – H ... O		2,691	C – C – C	115,3	114,2

Моделирование и расчет системы двух димеров бегеновой кислоты очень затратный по времени и ресурсам, поскольку объект чрезвычайно громоздкий (272 атома, 810 колебательных степеней свободы). Поэтому для оценки влияния межмолекулярного взаимодействия использована менее

громоздкая система, состоящая из двух димеров масляной кислоты ( $C_4H_8O_2$ ), димерные кольца в которой расположены друг под другом (рис. 2).

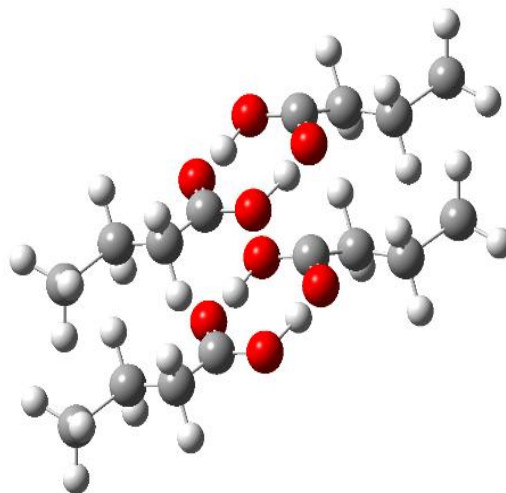


Рис.2. Система кольцо-над кольцом

Выход за рамки изолированной молекулы, учет водородных связей и межмолекулярного взаимодействия улучшил согласие рассчитанных и измеренных спектров. Установлено, что межмолекулярное взаимодействие заметно трансформирует ИК спектр.

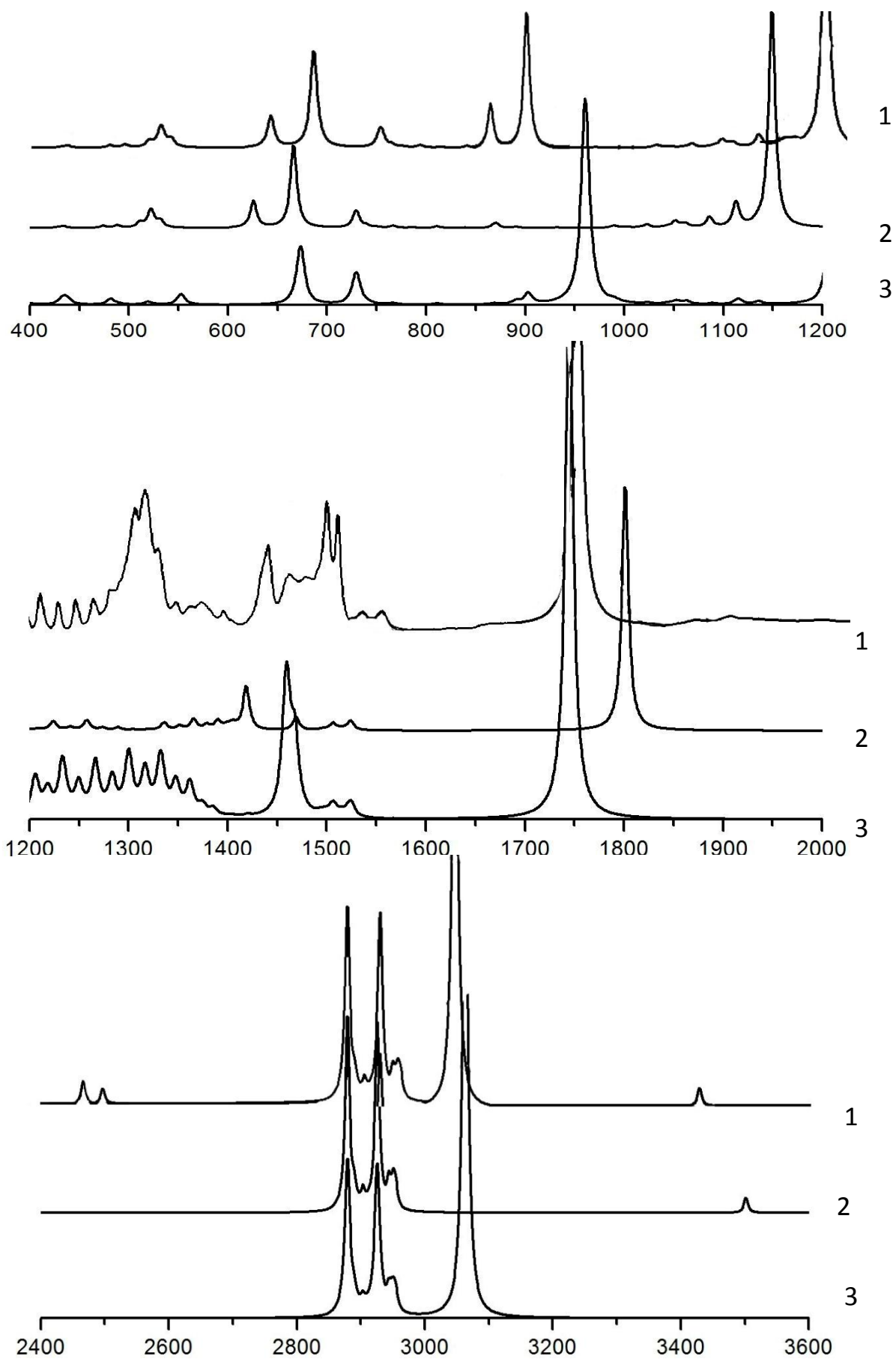


Рис. 3. Рассчитанные спектры системы из двух димеров масляной кислоты, 1, мономера, 2, и димера, 3, бегеновой кислоты

В **заключении** сформулированы основные результаты и выводы проделанной работы, оценены перспективы, эффективность метода ТФП.

#### **Список цитируемых источников**

1. Власенко Е.В. Методическое пособие: «Квантовомеханические расчеты молекул с использованием программного комплекса GAUSSIAN» для студентов, бакалавров, магистров и аспирантов физического и химического факультетов/Е.В, Власенко. «Южный Федеральный Университет» 2007г. 10с.
2. Frisch J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian03, Revision B.03; Gaussian, Inc., Pittsburgh PA. 2003. 302 p.