

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

**Интерпретация ИК спектра трифенилфосфита на основе
молекулярного моделирования**

АВТОРЕФЕРАТ ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ
БАКАЛАВРА

Студента 4 курса 431 группы физического факультета

Направление 03.03.02 - Физика

Профиль - Фундаментальная и экспериментальная физика

Тоома Игоря Владимировича

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор

Л.М. Бабков

Заведующий кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

Л.М. Бабков

Саратов 2017 год

Введение

Огромное значение в физических экспериментах играет теоретическая его часть, которую составляет квантово-химический расчет вещества, благодаря которому можно в ходе симуляции эксперимента многие аспекты, такие как: энергия, геометрические характеристики и строение молекулы, термодинамические характеристики и многое другое.

Большую ценность играют подобные физико-химические исследование, ибо они позволяют в ходе теоретического эксперимента сохранить дорогостоящие в большинстве случаев ресурсы и сокращая время, которое, в случае проведения реального эксперимента, могло превышать теоретические в разы.

Перспективность данного направления позволяет развиваться в очень короткие сроки, открывая с каждым днем все большие возможности для исследования молекул и их связей. Технический потенциал позволяет создавать высокоточные и высокоскоростные модели, благодаря которым можно проделывать новые открытия в области теоретической физики. Появляются новые функции, с помощью которых можно осуществить расчет химических свойств различных соединений, не уступая по качеству и надежности реальному эксперименту.

Одной из действующих программ, успешно применяемая рядом специалистов, магистров и студентов является программное обеспечение Gaussian, которая как раз и позволяет имитировать межмолекулярные взаимодействия и связи, выводя удобные для обработки данные.

Под цель использования данной программы в ходе данной выпускной работы попало такое вещество, как кислота трифенилфосфит. Трифенилфосфит не является хорошо изученным веществом, так что все еще имеет перспективы изучения и исследования свойств со стороны фундаментальной физики и приложений. Обладает такими свойствами, как

полиморфизм, образует стеклофазу и особое состояние «глассиал» - особое состояние между стеклофазой и кристаллом. Из имеющихся исследовательских данных можно отметить применение в органометаллической химии в виде лигандов.

Цель дипломной работы

Целью данной выпускной квалификационной работы является ознакомление и изучение методов молекулярного моделирования, используемых в создании и исследовании конкретных молекулярных систем методом теории функционала плотности – ТФП. Использование метода ТФП для моделирования структуры колебательных спектров и геометрических характеристик.

Задачи дипломной работы

В основные задачи данной выпускной квалификационной работы входят несколько целей:

- Ознакомление с методом расчета электронной структуры методом Хартри и методом Хартри-Фока.
- Проведение квантовомеханического расчета при помощи программного обеспечения Gaussian 0.5 и Gaus View 0.8
- Смоделировать заданную молекулу при помощи полученных данных.
- Проанализировать и интерпретировать полученные данные и сравнить теоретический эксперимент с настоящим.
- Получение параметров структуры молекулы, таких как ИК спектр, длины и углы связи.

Структура и объём работы

Дипломная работа состоит из введения, двух глав, заключения и списка используемой литературы. Общий объём работы составляет 47 страницы, 9 рисунков. Библиография включает 21 наименование.

Краткое содержание работы

Во введении описывается значимость и перспективность проделанной работы. Представляются задачи и цели, которые были выполнены в ходе проделанной работы.

В первой главе представляются и описываются методы расчета структуры системы частиц. **Метод Хартри-Фока** - Основываясь, на методическом пособии [1] и описании программного комплекса [2], можно сделать вывод, что один из широко используемых методов последовательных приближений является метод Хартри-Фока. Он базируется на довольно естественном приближении, что каждый электрон перемещается в потенциале, созданном ядром и средним потенциалом всех других электронов атома. Это приводит к модели независимой частицы, которая позволяет перейти от многоэлектронной проблемы к проблеме решения множества взаимосвязанных одноэлектронных уравнений. Представляются **квантово-механические расчеты при помощи программы Gaussian**, которая является, вероятно, самым популярным средством выполнения квантово-химических расчетов среди основной массы химиков. Основные причины этого - широта охвата реализованных квантово-химических методик, высокая эффективность и удобный интерфейс пользователя. Этот пакет моделирования электронных структур используется для разработок в области химии и биохимии, физике и других известных и развивающихся областях, связанных с химическими процессами. Методология моделирования, используемая в пакетах Gaussian, была отмечена Нобелевской Премией в области химии 1998 года. Первая глава посвящена основному методу, используемому в данной выпускной квалификационной

работе - методу теории функционала плотности. Рассматриваются различные существующие полуэмпирические методы и неэмпирические (abinitio).

Во второй главе приводятся результаты моделирования структуры и ИК спектра трифенилфосфита (ТФФ) – объекта, представляющий интерес с точки зрения фундаментальной науки и приложений. Структура ТФФ исследована в работах [3, 4]. Методами рентгеноструктурного анализа (РСА) и нейтронографии [3] установлено строение двух полиморфных модификаций ТФФ - гексагональной и моноклинной: определены параметры элементарных ячеек, в том числе, геометрия молекул.

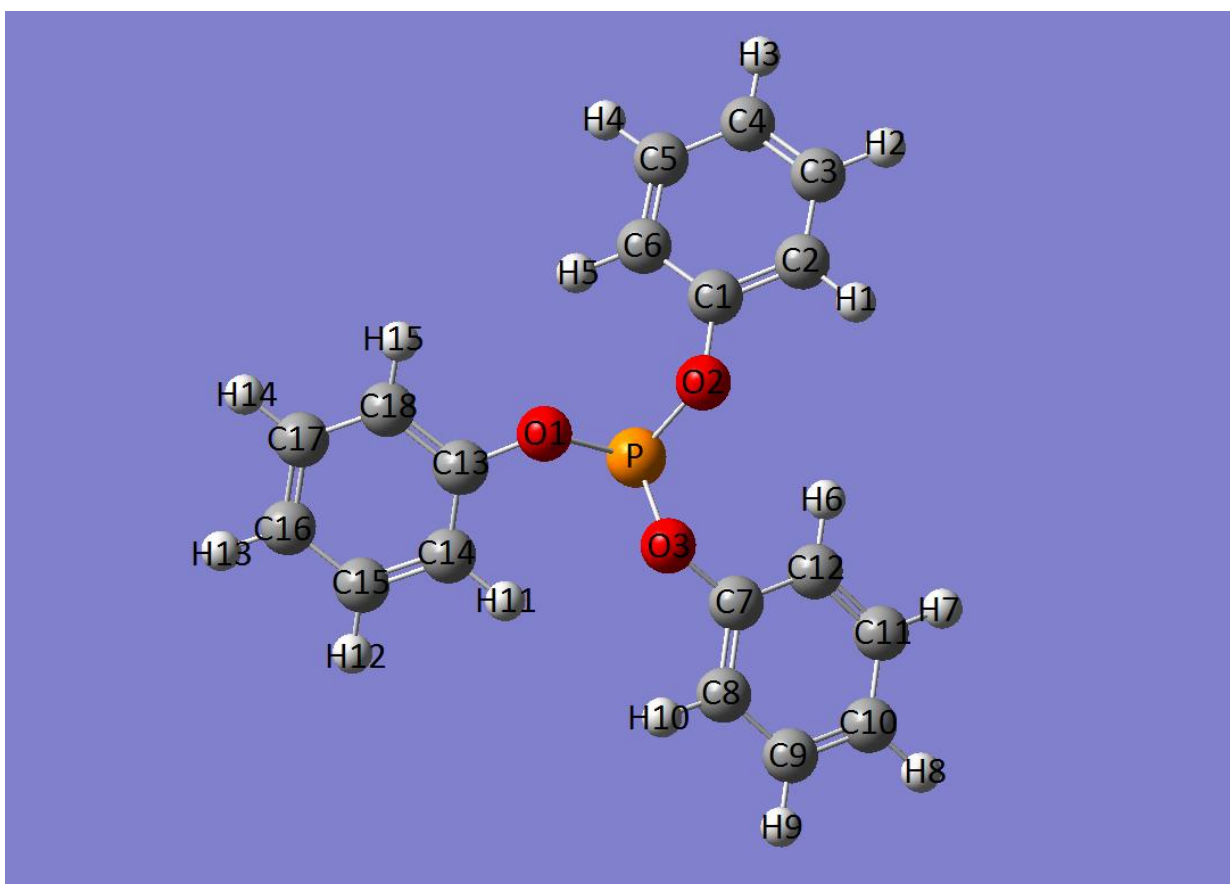


Рис. 2. Структура молекулы трифенилфосфита

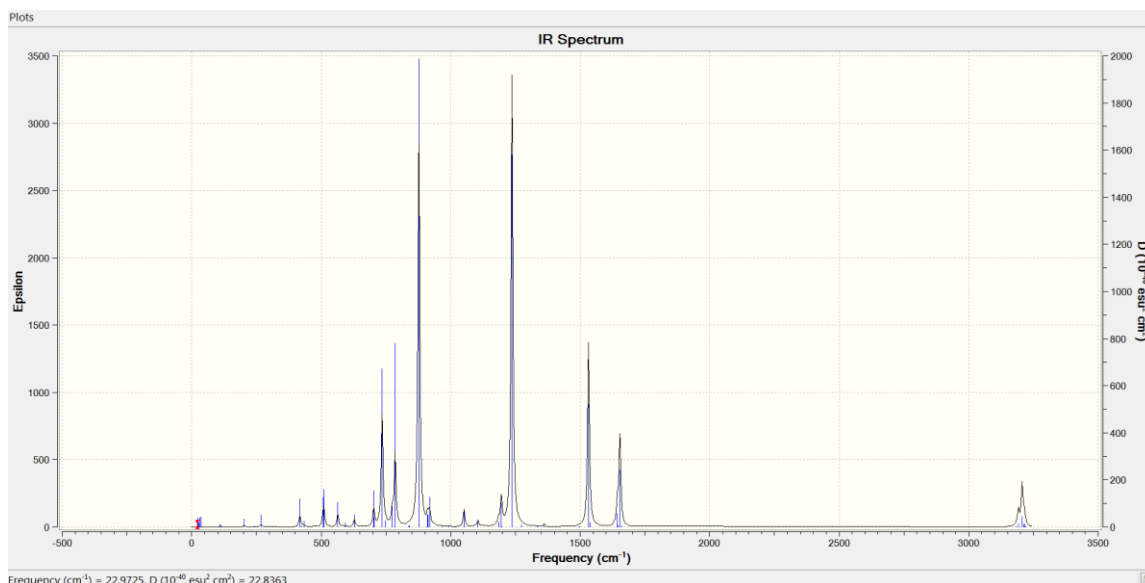


Рис. 2. ИК спектр изолированной молекулы

Моделирование структуры и ИК спектра молекулы ТФФ проведено методом B3LYP/6-31d, реализованном в программном комплексе Gaussian-3. Приведены рассчитанные геометрические параметры молекулы (углы связей и длины связей) и рассчитанный ИК спектр изолированной молекулы.

Проведено сравнение рассчитанного и измеренного спектров молекулы ТФФ и обсуждение полученных результатов.

В разделе «Заключение» сформулированы выводы на основе полученных результатов и дана оценка метода ТФП и эффективность программного обеспечения комплекса Gaussian-3.

Список цитируемой литературы

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.

3. Golovanov, D. G.; Lyssenko, K. A.; Antipin, M.Yu ; Vygodskii, Y. S.; Lozinskaya, E. I.; Shaplov, A. S. Long-awaited polymorphic modification of triphenylphosphite// CrystEngComm . 2005. V. 7. P. 465- 468.

4. Hernandez, O.J., Boucekkine, A, Hedoux, A Density Functional Theory Study of TriphenylPhosphite: Molecular Flexibility and Weak Intermolecular Hydrogen Bonding// J. Phys. Chem. A. 2007. V.111. P.