

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

**КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ
И ИК-СПЕКТРА САЛОЛА**

АВТОРЕФЕРАТ ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ
БАКАЛАВРА

студента 4 курса 431 группы физического факультета
Сапрыкина Дениса Валентиновича

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

Установление связи «спектр – структура – свойства» в биоорганических соединениях, перспективных с точек зрения фундаментальной науки и их практического использования, является одной из актуальных проблем.

Определение особенностей строения и физико-химических свойств молекулярных систем с использованием методов колебательной спектроскопии предполагает их описание как квантовых объектов. В колебательных спектрах содержится первичная информация об их строении и физико-химических свойствах. Подавляющее большинство молекулярных систем состоит из большого числа атомов и имеет сложное строение, и это находит своё отражение в их экспериментальных колебательных спектрах. Извлечь из них в полном объёме необходимую информацию о структуре и свойствах молекулярных систем и дать их интерпретацию, не опираясь на результаты молекулярного моделирования, использующего современные квантово-механические методы расчёта энергии, структуры, механических и электрооптических параметров, самих колебательных спектров, практически невозможно. Это определяет актуальность применения молекулярного моделирования в исследованиях биоорганических соединений с целью установления в них связи «спектр – структура – свойства».

Объектом исследования в данной работе стал салол. Он представляет собой органический материал с формулой $C_{13}H_{10}O_3$, подвергающийся стеклованию и по этой причине он был предметом нескольких экспериментальных исследований и теоретических соображений. Во всех этих экспериментах колебаний на границе раздела твёрдое тело-жидкость наблюдались с помощью рассеяния света от растущих монокристаллов. Салол был отличным материалом для таких целей, так как его температура плавления близка к комнатной температуре, монокристаллы могут быть легко выращены в подходящей форме.

Цель выпускной квалификационной работы

Целью выпускной квалификационной работы является изучение современных методов молекулярного моделирования используемых, в приложениях к конкретным молекулярным системам (каждая своя) : метод теории функционала плотности (ТФП), функционалы, базисные наборы. Использование методов ТФП для моделирования структуры и колебательных

спектров (салола)

Задачи выпускной квалификационной работы

1. Овладением теории и молекулярным моделированием
2. Использование ТФП
3. Методом ТФП рассчитать внутримолекулярные параметры (соединений): минимальная энергия, оптимальная геометрия, механические параметры(силовые константы), электрооптический (дипольный момент , тензор поляризуемости). Расчет колебательного спектра (салола) (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. Общий объём работы составляет 38 страницы, 6 рисунков. Библиография включает 20 наименований.

Краткое содержание выпускной квалификационной работы

Во введении сформулирована основная цель и задачи выпускной квалификационной работы

В первой главе указаны основные физико-химические свойства исследуемого соединения, которые в значительной степени определяются водородной связью. Эти свойства могут быть описаны на основании анализа измеренных колебательных спектров соединения и результата моделирования ее структуры и спектра. Кратко обсуждены теоретические методы исследования структуры и свойств соединения. Подробно описаны базисные наборы и метод теории функционала плотности (ТФП)

Результатом рассмотрения стал выбор метода ТФП(приближение DFT/HF с использованием атомного базиса 6-31G(d,p) [11-15] и обменно-корреляционного потенциала B3LYP)

Во второй главе обсуждены особенности структуры , колебательные спектры салола по данным эксперимента и молекулярного моделирования

В рамках модели изолированной молекулы (рис.1) получена структура салола и рассчитан его ИК спектр(рис.2), который удовлетворительно воспроизводит измеренный

В области $800 - 1800 \text{ см}^{-1}$ значения вычисленных частот нормальных колебаний оказались завышенными по сравнению с экспериментальными на $2,5 - 3\%$, а в области валентных колебаний связей C-H ($\sim 3200 \text{ см}^{-1}$) – на 5% . Различие между рассчитанным и измеренным спектрами частично устранено масштабированием частот (0,95).

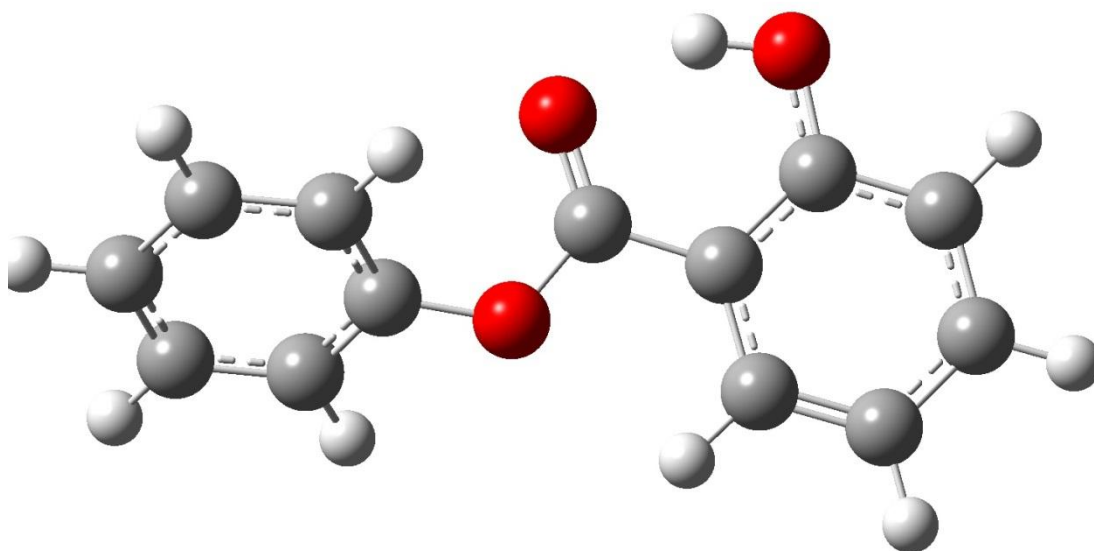


Рис.1 Структура молекулы салола

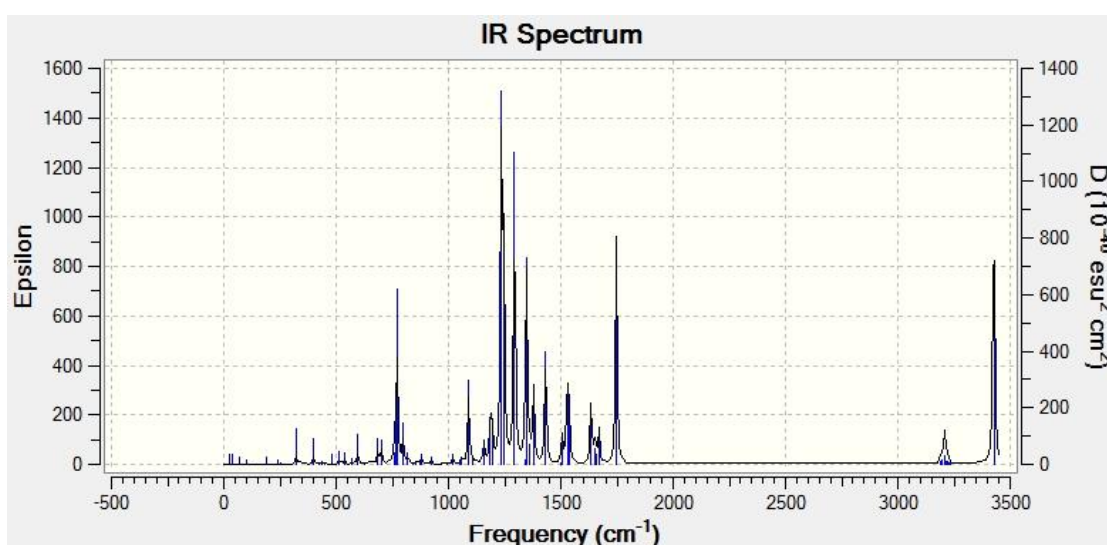


Рис.2 Рассчитанный спектр салола

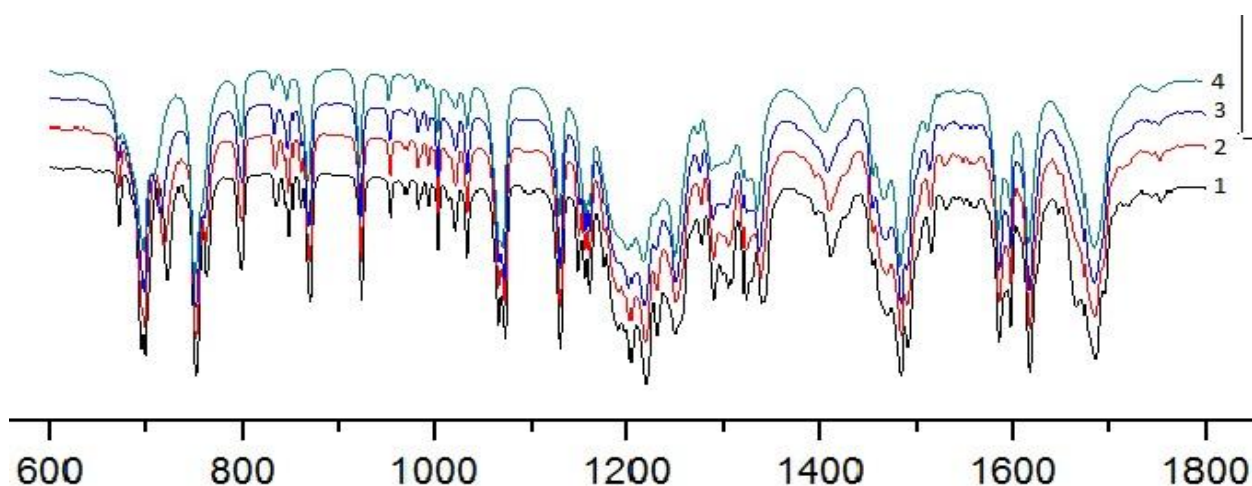


Рис.3. ИК спектры салола в области $600-1800\text{ см}^{-1}$ измеренные - стабильная фазы при 11 К(1), 110 К (2), 290 К (3), рассчитанный спектр салола (4)

Заключение

На основе анализа ИК спектров стабильной модификации салола, измеренной при температуре 0 К, и результатов построения его структурно-динамической модели ТФП ВЗЛР/6–31G (d) дана интерпретация её спектра.

Список цитируемых источников

1. Игнатов С.К. Квантово - химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. – Нижний Новгород: изд. Нижегородский гос. Университет им. Н.И. Лобачевского, 2006. – 82с
2. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView.– М: Салон-Пресс, 2011. – 224с. 51.