

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра общей, теоретической и компьютерной физики

Влияние водородной связи на структуру и ИК спектр 2- бензилфенола.

Образование цепочечного ассоциата

АВТОРЕФЕРАТ
БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса, 4022 группы,

направления 03.03.02 «Физика» Института физики

Ларионова Алексея Владимировича

Научный руководитель
д.ф.- м.н., профессор

Л.М. Бабков

Зав. кафедрой
д.ф.- м.н., профессор

В. М. Аникин

Саратов 2022

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность. Тема выпускной квалифицированной работы посвящена комплексному исследованию биоорганического соединения из карбоновых кислот - 2-бензилфенола, построению фрагмента цепочечного ассоциата (тримера) вещества на основе метода теории функционала плотности (ТФП) и расчету их колебательного ИК-спектра.

Тема является актуальной, так как данное соединение на протяжении ряда лет является объектом различных теоретических и экспериментальных исследований. Интерес, к этому соединению в настоящее время достаточно высок со стороны молекулярной биофизики, ядерной физики и оптики.

Новизна темы заключается в том, что в данной работе решена задача построения структурно-динамических моделей молекулы 2-бензилфенола в гармоническом приближении и предложена интерпретация измеренного ИК спектра этого соединения, предложена интерпретация измеренного ИК спектра фрагмента его цепочечного ассоциата и проведен сравнительный анализ влияния гидроксильной группы на характеристики вещества.

Работа состоит из введения, 2 разделов, заключения, списка использованных источников (24 наименования).

В 1 разделе рассмотрены различные методы расчета электронной структуры: метод Хартри, метод Хартри-Фока, полуэмпирический метод, метод функционала плотности, а также описаны учет межмолекулярного взаимодействия и базисный набор.

Во 2 разделе кратко рассмотрены возможности применения САПР Gaussian'09 для получения моделей, характеристик и ИК-спектров 2-бензилфенола. Приведена структурно-динамическая модель фрагмента цепочечного ассоциата соединения.

В заключении приведены основные выводы по проведенным исследованиям.

Выпускная квалификационная работа представлена на 43 страницах.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность выбранной темы выпускной квалификационной работы, определена цель работы.

В разделе 1 рассмотрены различные методы расчёта структур и колебательных спектров молекул.

Развитие средств вычислительной техники существенно расширило возможности практического применения квантово-механических расчетов различных молекулярных параметров и колебательных спектров. На основе моделирования методами квантовой теории в настоящее время рассчитываются основные параметры адиабатических потенциалов: энергии основного и ближайших возбужденных электронных состояний, геометрия молекулы, её силовые постоянные, дипольный момент, элементы тензора поляризуемости. Перечисленные

параметры используются при расчётах частот и интенсивностей в спектрах ИК и КР-активностей: появилась, т.о., возможность использовать результаты, полученные методами квантовой химии в задачах спектроскопии.

Методы колебательной спектроскопии широко применяются для анализа динамики тяжёлой подсистемы молекулярных систем. Их преимуществом перед другими методами спектроскопии (электронная, ядерного магнитного резонанса и т.д.) является доступность и возможность регистрации спектров веществ в любом агрегатном состоянии.

Одним из самых распространённых методов квантовой химии, позволяющих рассчитывать энергию, геометрию, электрооптические и механические параметры молекулярных систем в последние годы стал метод теории функционала плотности (ТФП) [1-3], базирующийся на статистическом методе Томаса-Ферми, созданном в рамках квантовой теории многоэлектронных атомов.

В ТФП вместо волновой функции вводится электронная плотность. Она является функцией только пространственных координат для систем в основном электронном состоянии.

Электронная плотность определяется выражением:

$$\rho(\mathbf{r}) = N \int \dots \int |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 dx_1 dx_2 \dots dx_N, \quad (1)$$

и определяет вероятность нахождения любого из N электронов системы с неопределённым значением спина в элементарном объёме, в то время как другие $N-1$ электронов имеют определённое положение и спин в состоянии, описываемом функцией. Условие нормировки имеет вид:

$$\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N, \quad (2)$$

где интегрирование ведётся по всему пространству (\mathbf{r} – радиус-вектор точки пространства).

Так как в расчётах многоэлектронных систем аналитическое выражение волновой функции невозможно, для её представления применяются различные приближённые методы. Чаще других используется полиномиальная аппроксимация. В этом случае точная волновая функция, нормированная на единицу и на бесконечности обращающаяся в ноль, аппроксимируется линейной комбинацией хорошо известных аналитических функций. Подходящими аналитическими функциями оказались функции Слейтера и Гаусса.

Квантово-химическое моделирование подразумевает не только минимизацию энергии и оптимизацию структуры молекул и комплексов, но и расчёт электрооптических, механических и термодинамических параметров, а также частот и интенсивностей нормальных колебаний.

В разделе 2 производилось моделирование структур и колебательных спектров двух молекул – изолированной и тримера.

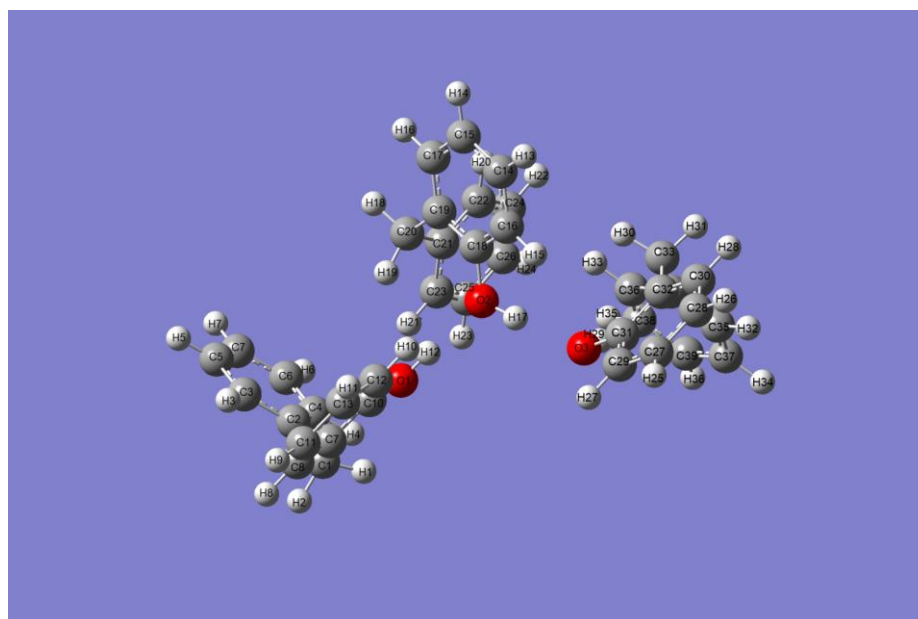
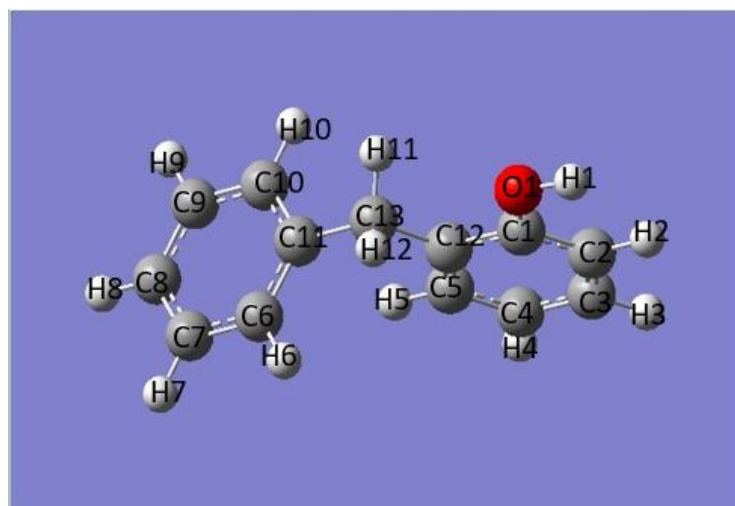


Рис.1. Строение изолированной молекулы и тримера 2-бензилфенола

После моделирования структур и колебательных спектров молекул было проведено сравнение их спектров. По результатам этого сравнения было сделано заключение, что спектры различимы. Различия особенно существенны для колебаний структурных элементов молекул, в которые входит гидроксильная группа. Из анализа частот этих колебаний следует, что спектры тримера и эксперимента ближе друг другу. Спектр изолированной молекулы сильнее отличается от них. Разница в частотах может достигать до 100 см^{-1} (валентное колебание связи карбонильной группы $\text{C}=\text{O}$). Для кольцевых колебаний разница достигает 50 см^{-1} . Для валентных колебаний связей $\text{O}-\text{H}$ разница в частотах находится в пределах $30 - 50 \text{ см}^{-1}$.

ВЫВОДЫ

В заключении выпускной квалификационной работы сформулированы основные результаты и выводы работы.

Методом ТФП ВЗЛР 6-31G (d) с использованием пакета программ Gaussian построены структурно-динамические модели изолированной молекулы и тримера 2-бензилфенола. Вычислены минимизированные энергии, оптимизированные геометрии, механические и электрооптические параметры, в гармоническом приближении рассчитаны частоты, интенсивности ИК спектров.

Выявлены различия спектров изолированной молекулы и тримера, обусловленные положением гидроксильных групп. Наибольшее различие в частотах обнаруживается для валентных колебаний связи C=O (1000 см^{-1}), для кольцевых колебаний разница достигает 50 см^{-1} , разница для частот валентных колебаний связей O-H находится в пределах $30 - 50\text{ см}^{-1}$.

Список использованных источников

1. Кларк Т. Компьютерная химия. М., «Мир», 1990. 383 с.
2. Frisch M. J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al., Gaussian03, Revision B.03; Gaussian, Inc., Pittsburgh PA. 2003. 302 p.
3. Foresman J.B., Frisch A. Exploring chemistry with electronic structure methods. Second edition. Gaussian, Inc. Pittsburgh, PA. 1996. 358 p.
4. Сатанин А.М. Введение в теорию функционала плотности URL : http://www.unn.ru/books/met_files/Intro_DFT.pdf
5. 2-Benzylphenol (compound). URL : <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2-Benzylphenol>
6. Москвитин М.Д., Бабков Л.М., Давыдова Н.А. ИК СПЕКТРЫ И СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ 2-БЕНЗИЛФЕНОЛА // ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕРХВЫСОКОЧАСТОТНОГО, ТЕРАГЕРЦОВОГО И ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ МИКРО- И НАНОСТРУКТУРАМИ, МЕТАМАТЕРИАЛАМИ И БИООБЪЕКТАМИ: Сборник статей восьмой Всероссийской научной школы-семинара / под ред. Ал. В. Скрипаля. Саратов : Саратовский источник, 2021. С. 72 – 76.