

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

Кафедра материаловедения, технологии  
и управления качеством

**МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМ МОЛЕКУЛ  
ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ**

**АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ**

студентки 4 курса 4091 группы  
направления 22.03.01 «Материаловедения и технологии материалов»,  
профиль «Нанотехнологии, диагностика и синтез современных материалов»  
института физики

Баюновой Софьи Алексеевны

Научный руководитель,  
доцент, к.ф.-м.н., доцент  
\_\_\_\_\_

должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_

подпись, дата

Е.Г. Глуховской  
\_\_\_\_\_

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой,  
д.ф.-м.н., профессор  
\_\_\_\_\_

должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_

подпись, дата

С.Б. Вениг  
\_\_\_\_\_

инициалы, фамилия

**Введение.** Актуальность работы состоит в том, что в настоящий момент технологии синтеза полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) и в частности структур нанографена привлекают всё больше внимания, благодаря их широкому применению в органической электронике. Так как электронные структуры ПАУ могут регулироваться, то от этого могут изменяться как свойства самих молекул, так и их конфигурация и способы сборки в крупные структуры. В ходе практической работы была выдвинута гипотеза о том, что молекулы коронена имеющие радикал ( $\text{NO}_2$  или  $\text{NH}_2$ ) приобретают свойства, отличные от свойств коронена (coronene), а также что молекулы коронена с краевыми функциональными группами способны образовывать колончатые структуры на поверхности воды.

Целью выпускной квалификационной работы является изучение моделей молекул полициклических ароматических углеводородов методами компьютерного моделирования и программная оценка их параметров в зависимости от наличия радикалов, а именно изучение моделей систем коронена без замещения и с замещениями на поверхности воды и их анализ.

На основе поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- освоение программ для компьютерного моделирования;
- построение молекул ПАУ;
- расчёт параметров молекул;
- составление систем молекул ПАУ с молекулами воды;
- анализ полученных результатов.

Перед нами стояла необходимость моделирования системы из нескольких молекул коронена (coronene) с различными радикалами на поверхности водной подложки и изучению полученного результата. Для построения и геометрической оптимизации моделей были использованы пакеты программного обеспечения HyperChem80 и Spartan14.

Выпускная квалификационная работа занимает 39 страницы, имеет 24 рисунка и 4 таблицы.

Обзор составлен по 35 информационным источникам.

Во введение рассматривается актуальность работы, устанавливается цель и выдвигаются задачи для достижения поставленной цели.

Первый раздел представляет собой литературный обзор полиароматических углеводородных соединений: их структуры, свойств, а также обзор возможностей исследования методами молекулярного моделирования.

Во втором разделе работы показаны построение молекул коронена без замещения и с краевыми функциональными замещениями, приведен их сравнительный анализ, а также сконструированы модели систем, включающей молекулы воды, и приведены результаты исследования.

Работа состоит из введения, двух глав, заключения и списка литературы. Содержание глав включает в себя:

1 Полиароматические углеводородные соединения: структура, свойства, исследование методами молекулярного моделирования (литературный обзор)

1.1 Структура и свойства углеводородных соединений

1.2 Компьютерное исследование моделей нанографенов и ПАУ.

Основные методы имитационного моделирования

2 Экспериментальная часть

2.1 Материалы и методы

2.2 Формирование и исследование элементов наноструктур

2.3 Исследование систем

### **Основное содержание работы**

Перед нами стояла задача по моделированию системы из нескольких молекул коронена (coronene) с различными радикалами на поверхности водной подложки и изучению полученного результата. Для построения и геометрической оптимизации моделей была использована программа HyperChem80 [1]. В этой программе были сформированы молекулы ПАУ. Изначально исследовались свойства самого коронена, на котором базировались

все остальные соединения. Методами компьютерного моделирования были рассчитаны дипольный момент, положение HOMO-LUMO и другие параметры.

Для расчетов также использовано программное обеспечение Spartan14 и встроенный в него метод Equilibrium Geometry с Density Functional [2]. Было проведено компьютерное исследование влияния функционализации краевых радикалов на физические свойства нанографенов. Были построены модели молекулы коронена (coronene) с радикалами  $\text{NH}_2$  и  $\text{NO}_2$ .

Сравнительный анализ результатов показал, что встроенные заместители изменяют энергетический зазор HOMO-LUMO и меняют величину дипольного момента, что наиболее выражено при радикале  $\text{NO}_2$ .

Создана усложненная модель, состоящая из молекулы ПАУ и группы молекул воды, на которой изучали влияние конденсированной фазы на упорядочение молекул ПАУ. Для геометрической оптимизации использовались программное обеспечение Spartan14 и встроенный в него метод Equilibrium Geometry с инструментом SYBYL. Результатом оптимизации явился разворот молекулы коронена над группой молекул воды. Сделан вывод о возможности изменения ориентации молекулы ПАУ за счет краевой функционализации и при одновременном наличии поверхности какой-либо конденсированной фазы, в частности поверхности воды.

На следующем этапе была создана модель колончатой молекулярной структуры, состоящая из 16 молекул коронена с краевой функциональной группой  $\text{NO}_2$ . Проверена выдвинута нами гипотеза, об ориентирующем влиянии слоя молекул воды на группу функционализированных молекул ПАУ. То есть развернутся функциональными группами к воде, тем самым формируя упорядоченный монослой без использования стенок, как в технологии Ленгмюра-Блоджетт [3-4]. Так же была проведена оптимизация геометрии. Первые результаты не показали явного упорядочивания молекул в системе. В следующей генерации модели ряд молекул ПАУ, помещенный на слой произвольно ориентированных молекул воды, подвергся последовательному нагреву и геометрической оптимизации (Geometry Optimization) методами

молекулярной механики по алгоритму Polak-Ribiere (Conjugate gradient). Обнаружен разворот большей части молекул ПАУ функциональными полярными группами к водной подложке, однако те из них, что изначально были обращены нитро-группами в противоположную сторону, изменили свое положение минимально.

По проделанному исследованию сделаны следующие общие выводы:

— одиночная молекула «ложиться» на поверхность воды благодаря проявлению диссипативных сил.

— группа молекул имеет тенденцию к образованию колончатой структуры на поверхности воды, одновременно с этим наблюдается «anchoring» (взаимное притяжение и «привязывание» функциональными группами молекул ПАУ к слою молекул воды) и ориентирование бензойной основы перпендикулярно к поверхности воды.

Это дает возможность для построения колончатых структур на поверхности воды при функционализации краев молекул ПАУ.

**Заключение.** В ходе работы были изучены модели молекул полициклических ароматических углеводородов методами компьютерного моделирования и выполнена программная оценка их параметров в зависимости от наличия радикалов, а именно изучение моделей систем коронена без замещения и с замещениями на поверхности воды и их анализ. Составлены сравнительные таблицы результатов программного расчета параметров молекул.

Были решены все поставленные задачи, а именно освоены программы для компьютерного моделирования; проведена их сравнительная характеристика; построены молекулы ПАУ; произведен расчёт параметров молекул; произведено сравнение полученных результатов. Так же были построены модели систем молекул коронена с замещениями  $\text{NO}_2$  и  $\text{NH}_2$  и без замещений с блоками молекул воды и выполнен анализ их свойств методами молекулярной механики.

В ходе практической работы была выдвинута гипотеза о том, что молекулы коронена имеющие радикал ( $\text{NO}_2$  или  $\text{NH}_2$ ) приобретают свойства, отличные от свойств коронена (coronene). Было получено, что значение дипольного момента изменилось, что позволяет сделать предположение о том, что при взаимодействии с полярной средой такие молекулы приобретут определенное положение в пространстве, относительно этой среды.

Было выдвинуто предположение о том, что молекулы коронена с краевыми функциональными группами способны образовывать колончатые структуры на поверхности воды. В ходе компьютерного исследования данное предположение было частично подтверждено. Некоторые молекулы в «колонне» действительно поворачиваются краевыми функциональными группами к воде, однако некоторые из них изменили свое положение незначительно.

В ходе выполнения практики были получены следующие результаты:

- были построены модели молекул с краевым функциональным замещением. Составлена сравнительная таблица результатов программного расчета параметров молекул;

- получено, что значение дипольного момента изменилось, что позволяет сделать предположение о том, что при взаимодействии с полярной средой такие молекулы приобретут определенное положение в пространстве, относительно этой среды;

- были построены модели систем молекул коронена с замещениями  $\text{NO}_2$  и  $\text{NH}_2$  и без замещений с блоками молекул воды и выполнен анализ их свойств методами молекулярной механики;

- в ходе эмпирического исследования при помощи программ компьютерного моделирования предположение было частично подтверждено. Некоторые молекулы в «колонне» действительно повернулись краевыми функциональными группами к воде, однако некоторые из них изменили свое положение лишь частично.

#### **Список использованных источников**

1 Hyper – официальный сайт программного пакета HyperChem [Электронный ресурс] // hyper [Электронный ресурс] : [сайт]. – URL: <https://hyper.com/> (дата обращения: 2.05.23). – Загл. с экрана. – Яз. англ.

2 Барыбин, А. А. Физико-технологические основы макро-, микро- и наноэлектроники / А. А. Барыбин, В. И. Томилин, В. И. Шаповалов. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 424 с.

3 Totton, T. S. A first principles development of a general anisotropic potential for polycyclic aromatic hydrocarbons / T. S. Totton, A. J. Misquitta, M. Kraft // Journal of Chemical Theory and Computation. – 2010. – V. 6, Is. 3. – P. 683-695.

4 Юдин, С. Г. Распределение и усиление электрического поля в гетероструктурах сегнетоэлектрик-краситель / С. Г. Юдин, Л. М. Блинов, В. В. Лазарев, С. П. Палто. – М. : Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, 2012. – Т. 54, Вып. 5. – С. 885-888.