

Выпускная квалификационная работа по теме:

**«Электронное строение молекулы N¹,N⁵-ди-*F*-бензилиденнафтолин
-1,5-диамин»**

Направление: 03.03.02 – Физика

Выполнил:

студент **4** курса,

гр. Фб-161

Манацков Александр Андреевич

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., профессор,

Лебедев Николай Геннадьевич

Цель работы

- Исследование электронной структуры и спектра молекулы N¹,N⁵-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамин.

Для достижения данной цели необходимо решить следующие задачи:

- Построить геометрическую модель молекулы N¹,N⁵-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамина.
- Рассчитать электронное строение и спектральные характеристики молекулы N¹,N⁵-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамина, неэмпирическими методами квантовой химии.

Актуальность темы

Исследуемая молекула относится к азометинам нафталинового ряда. Азометины применяются в электронике для создания жидкокристаллических мониторов, датчиков и индикаторов, используются в качестве красителей, люминофоров, стабилизаторов полимеров. Также азометины обладают широким диапазоном биологической активности, на их основе разработаны эффективные антидепрессанты, антиконвульсанты, антимикробные, снотворные, психотропные, нематоцидные, противоопухолевые и другие медицинские препараты. Высокая биологическая активность и близость их строения к некоторым природным соединениям делает чрезвычайно перспективным их применение в качестве средств защиты растений. Поэтому изучение такой молекулы является актуальной темой.

Методы решения задач

Для выполнения задач, были использованы неэмпирические методы квантовой химии. Расчёты проводились в квантово-химическом пакете GAMESS. Построение геометрических структур проводилось в пакете HyperChem(демоверсия).

Расчёт равновесной геометрии и электронного строения молекул проводился методом B3LYP в базисе 6-31G++.

Расчёт спектральных характеристик молекул проводился методом TD-DFT в базисе 6-31G++.

(B3LYP)-метод теории функционала плотности с обменно-корреляционным функционалом.

(TD-DFT)-метод нестационарной теории функционала плотности.

(6-31G++)- валентно расщепленный базис с поляризационными орбиталями.

Исследования электронного строения и спектральных характеристик молекулы N¹,N⁵-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамин в рамках теории функционала плотности

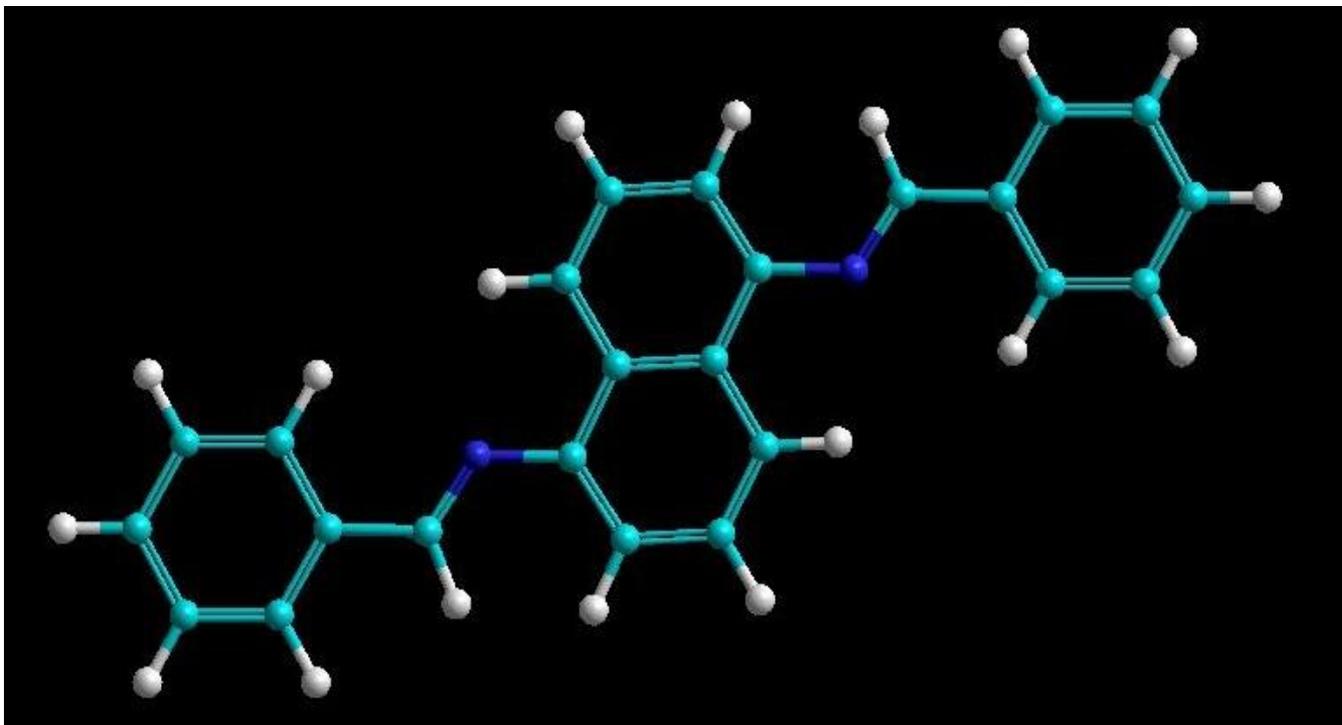


Рисунок 1. Равновесная геометрическая структура молекулы N¹,N⁵-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамин.

Получены значения энергии верхней занятой молекулярной орбитали ($E_{\text{ВЗМО}}$) и нижней вакантной молекулярной орбитали ($E_{\text{НВМО}}$):

$$E_{\text{ВЗМО}} = -1,837 \text{ (эВ)},$$

$$E_{\text{НВМО}} = -2,035 \text{ (эВ)}.$$

Построена диаграмма распределения Малликеновских зарядов для атомов.

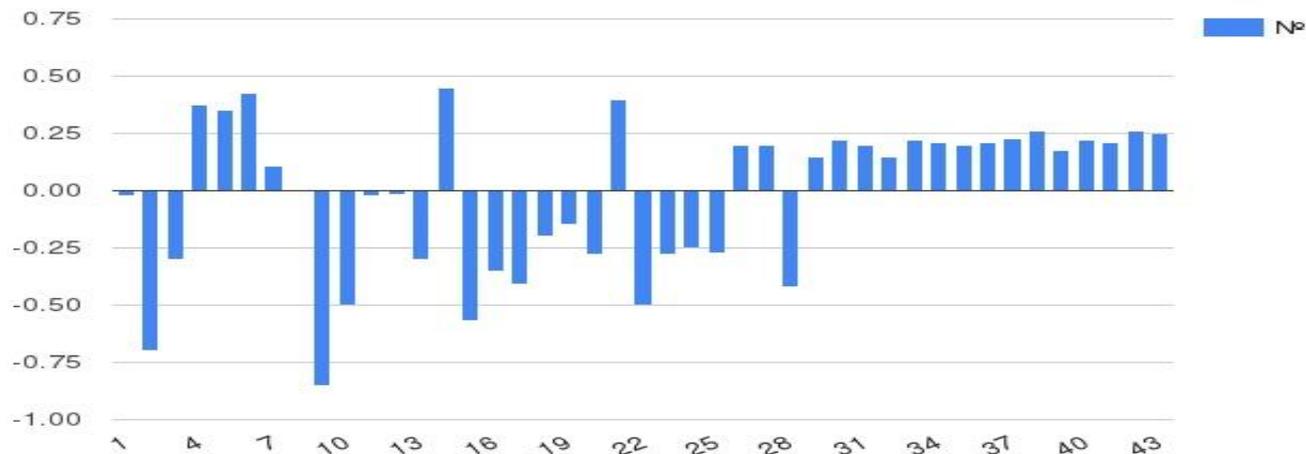


Рисунок 2. Диаграмма распределения Малликеновских зарядов (эВ) для атомов молекулы N¹,N⁵-ди-*F*-бензилиденнафтолин-1,5-диамин.

Построена диаграмма зависимости дипольного момента перехода от длины волны исследуемой молекулы

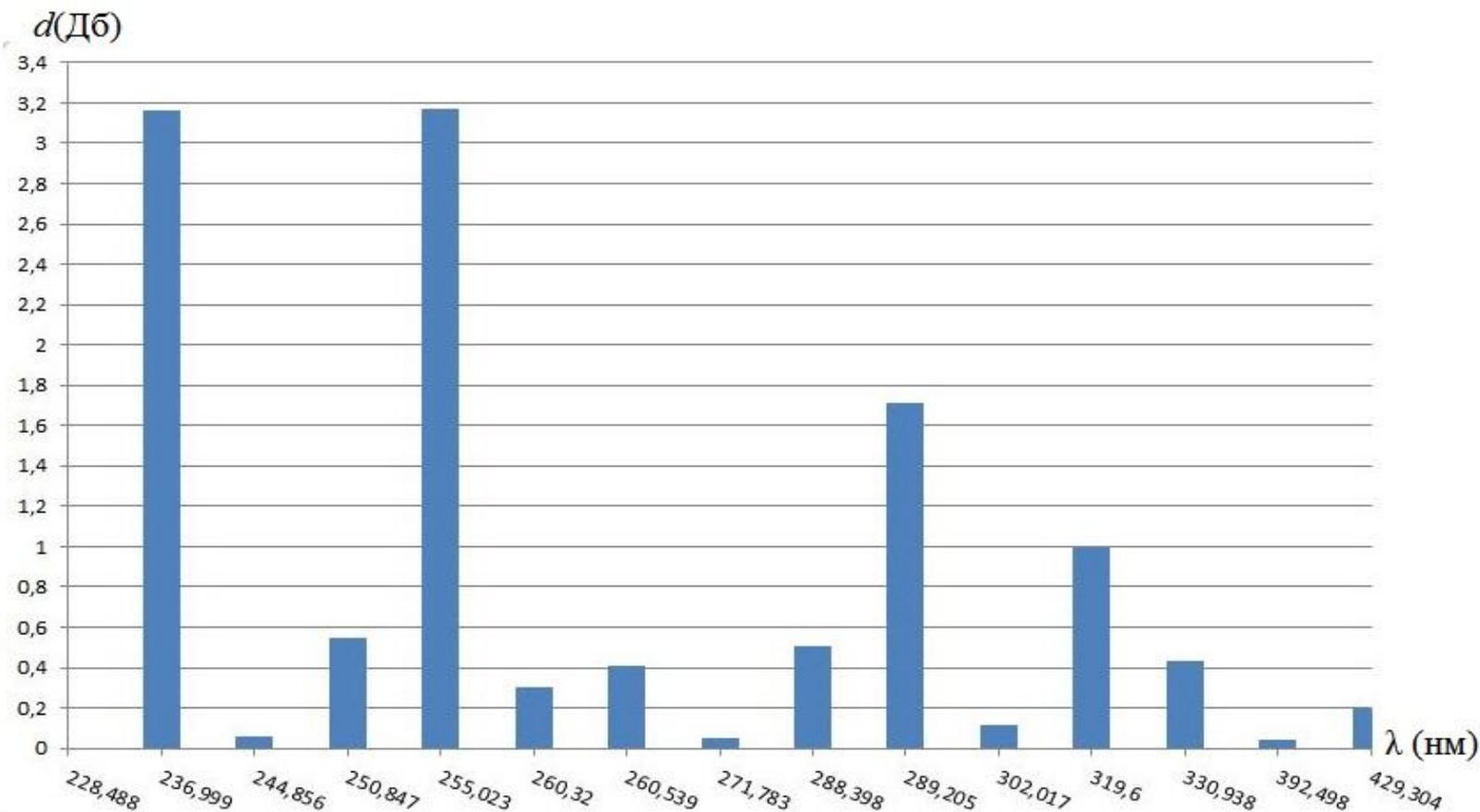


Рисунок 4. Диаграмма зависимости дипольного момента перехода от длины волны молекулы N^1,N^5 -ди- F -бензилиденнафтолин-1,5-диамин.

Построена диаграмма зависимости лямбда-параметра от длины волны исследуемой молекулы.

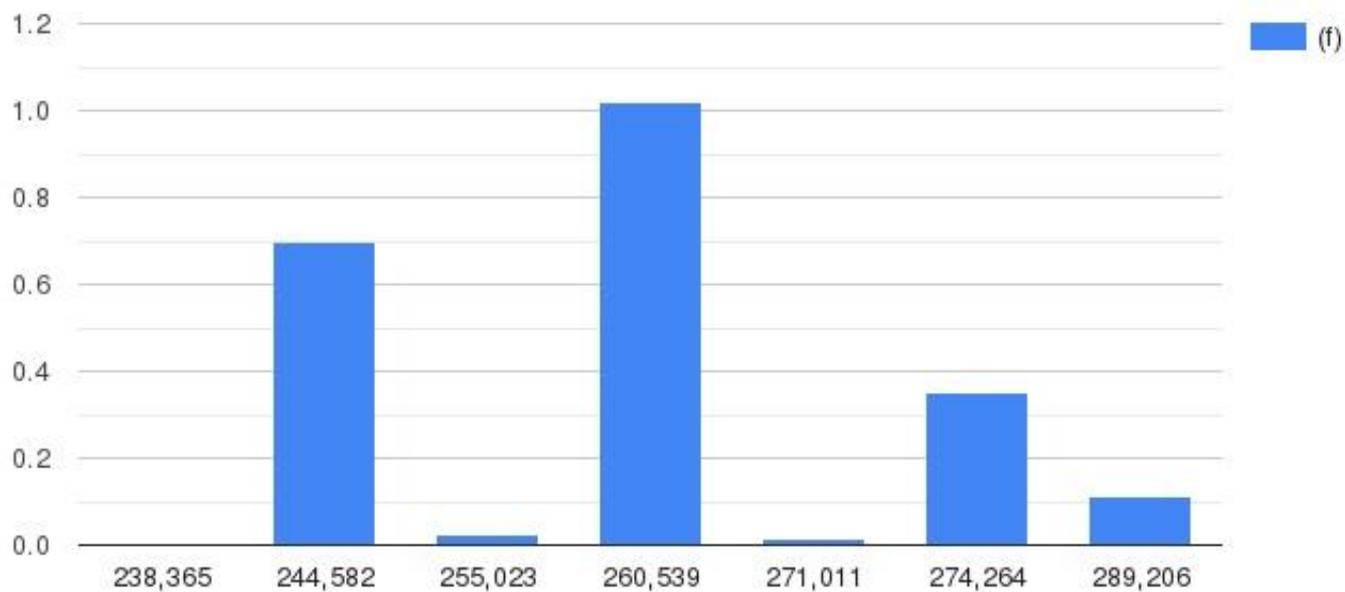


Рисунок 5. Диаграмма зависимости лямбда-параметра от длины волны молекулы N1,N5-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамин.

Заключение

1. Проведен квантово-химический расчет оптимальной геометрии и электронного строения молекулы N1,N5-ди-*F*-бензилиденнафтолин-1,5-диамина методом B3LYP в базисе 6-31G++.
2. Построена геометрическая модель молекулы N1,N5-ди-*F*-бензилиденнафтолин-1,5-диамина.
3. Проведен квантово-химический расчет спектра возбуждения этой молекулы методом TD-DFT в том же базисе..