

Выпускная квалификационная работа по теме:

**«Электронное строение молекулы N<sup>1</sup>,N<sup>5</sup>-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 N<sup>1</sup>,N<sup>5</sup>-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамин.

**Для достижения данной цели необходимо решить следующие задачи:**

- Построить геометрическую модель молекулы N<sup>1</sup>,N<sup>5</sup>-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамина.
- Рассчитать электронное строение и спектральные характеристики молекулы N<sup>1</sup>,N<sup>5</sup>-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++.

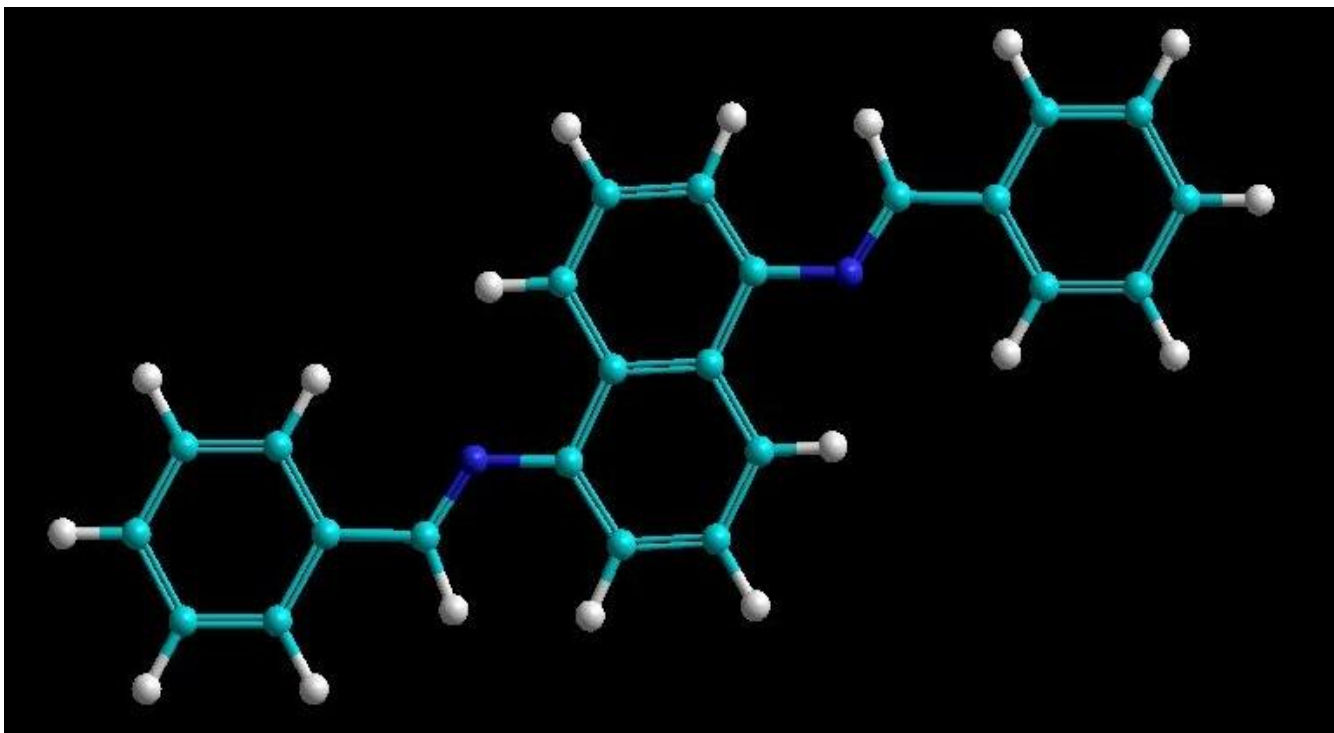
Расчёт спектральных характеристик молекул проводился методом TD-DFT в базисе 6-31G++.

(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 N<sup>1</sup>,N<sup>5</sup>-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамин в рамках теории функционала плотности**



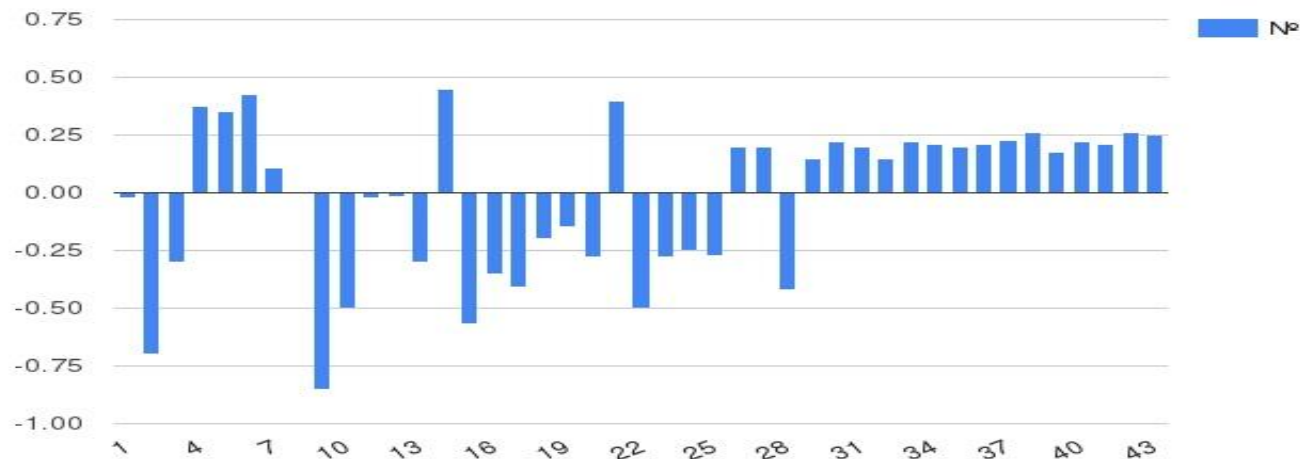
**Рисунок 1.** Равновесная геометрическая структура молекулы N<sup>1</sup>,N<sup>5</sup>-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамин.

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 N<sup>1</sup>,N<sup>5</sup>-ди-Ф-бензилиденнафтолин-1,5-диамин.

Построена диаграмма зависимости дипольного момента перехода от длины волны исследуемой молекулы

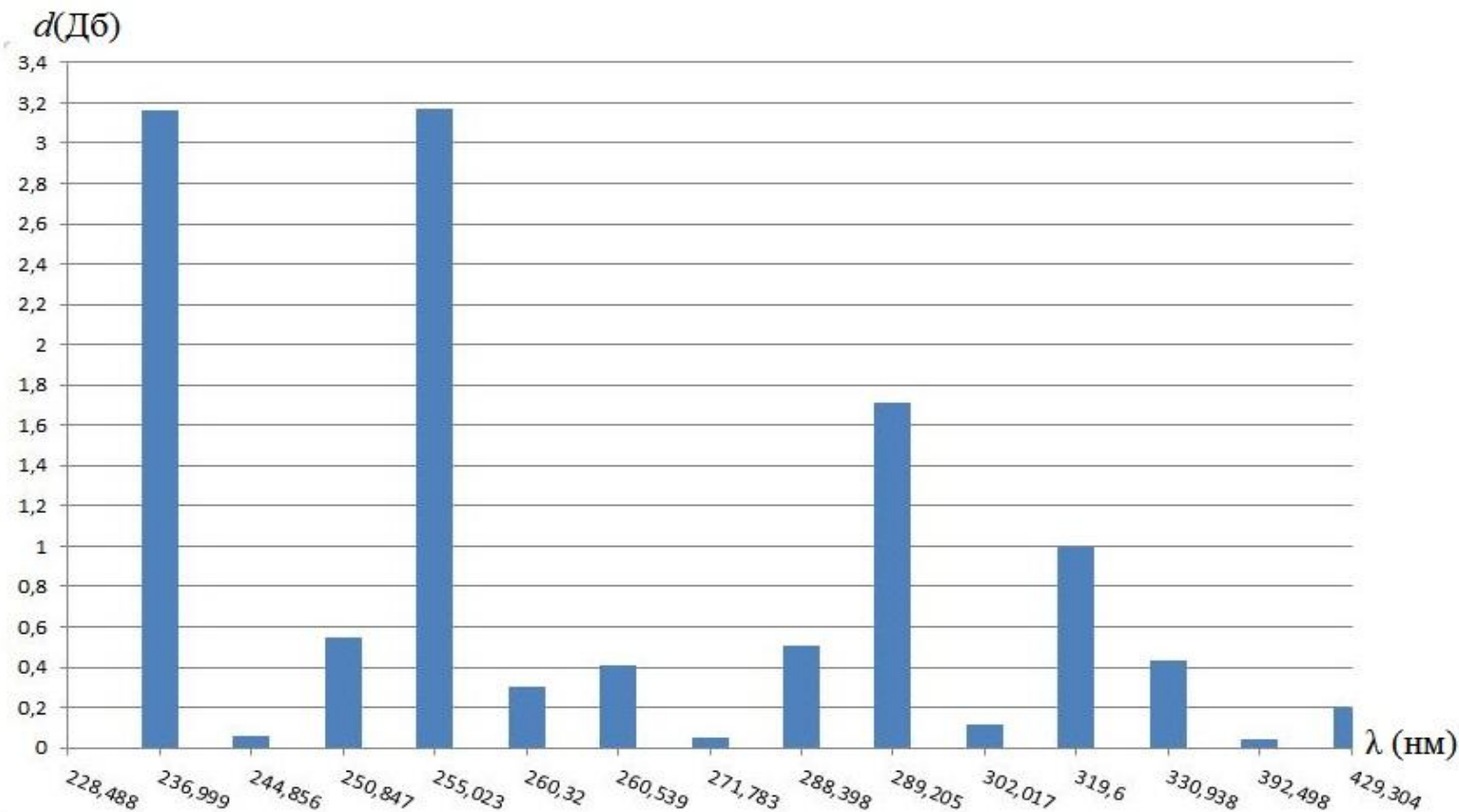
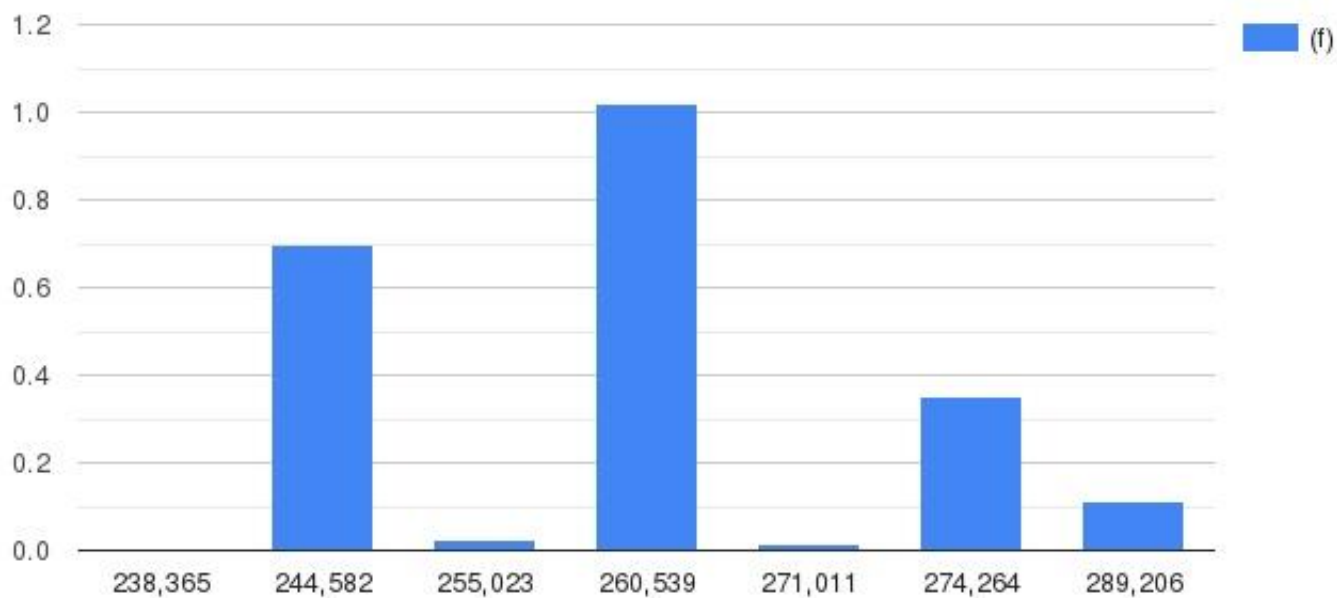


Рисунок 4. Диаграмма зависимости дипольного момента перехода от длины волны молекулы  $N^1,N^5$ -ди- $F$ -бензилиденнафтолин-1,5-диамин.

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