

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ДЛЯ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ

Гонтова С.С. (ИТМО), Нуждина Я.С. (ИТМО)

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, PhD

Мельчакова Ю.А. (ИТМО)

Введение. Металл-органические каркасы (MOF) представляют собой пористые материалы, состоящие из металлических кластеров, соединенных лигандами [1]. В качестве таких линкеров используются соединения, содержащие карбоксильные группы и азотсодержащие гетероциклические соединения ввиду их реакционной способности. Размер и свойства каркасов изменяются за счет добавления лигандов с заданными химическими, физическими и электронными свойствами. Подбор лиганда имеет большое практическое значение для синтеза материала с необходимыми характеристиками, обеспечивающими процессы сорбции и катализа [1,2]. Для выбора линкеров и решения подобных задач используются программы квантово-химического моделирования [1].

Основная часть. Для исследования свойств лигандов и анализа возможности применения их в металл-органических каркасах были выбраны следующие молекулы: аминокислоты, янтарная кислота, терефталевая кислота, этилендиамин. В рамках квантово-химического моделирования с помощью ПО GAMESS были исследованы структура и свойства как исходных молекул, так и их ковалентно-связанных смесей: аминокислоты с янтарной кислотой, терефталевой кислоты с этилендиамином. В рамках работы был выбран метод функционала плотности (DFT) и функционал B3LYP с базисным набором 6-31G**, так как данный подход более корректно оценивает электронный обмен и электронную корреляцию [1,3].

В рамках расчетов были смоделированы устойчивые структуры молекул и их смесей, а также получены распределение малликовских зарядов, определен вектор поляризуемости и дипольный момент, значение ширины запрещенной зоны и локализация граничных молекулярных орбиталей (HOMO, LUMO). Также был произведен расчет матрицы вторых производных и ИК-спектр частот колебаний молекулы.

Выводы. Были получены структуры исходных молекул и их смесей, а также карты распределения электронной плотности. Затем был проведен сравнительный анализ структуры молекул, оценка пространственного расположения лигандов и их электронных и проводящих свойств. Анализ ширины запрещенной зоны подтвердил диэлектрическую природу исследуемых структур. Полученные структуры предложено использовать в качестве линкеров для металл-органических каркасов.

Список использованных источников:

1. Odoh S.O., Cramer C.J., Truhlar D.G., Gagliardi L. Quantum-Chemical Characterization of the Properties and Reactivities of Metal–Organic Frameworks // *Chemical Reviews*. – 2015. – Т. 115, № 12. – С. 6051–6111.
2. Sun Q., Qin L., Lai C., Liu S., Chen W., Xu F., Ma D., Li Y., Qian S., Chen Z., Chen W., Ye H. Constructing functional metal-organic frameworks by ligand design for environmental applications // *Journal of Hazardous Materials*. – 2023. – Т. 447. – № 130848.
3. Hai G., Wang H. Theoretical studies of metal-organic frameworks: Calculation methods and applications in catalysis, gas separation, and energy storage // *Coordination Chemistry Reviews*. – 2022. – Т. 469. – № 214670.