

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ СПЕКТРОВ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ 4*H*-ИМИДАЗОЛА

Кравчук Р.И.<sup>1</sup>, Безносюк С.А.<sup>1</sup>

Научный руководитель – доктор. физ-мат. наук, профессор Безносюк С.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Алтайский государственный университет

kravchuk\_ri@mail.ru

### Введение

Моделирование спектров с использованием квантово-химических расчетов – один из ключевых этапов в предсказании свойств веществ и материалов на их основе. С помощью моделирования можно определить энергии высших занятых и низших свободных молекулярных орбиталей, энергию флуоресценции, предсказать диапазон длин волн возбуждения и эмиссии флуоресценции, проследить влияние растворителей разной полярности на смещение пиков флуоресценции.

В качестве потенциальных соединений, способных к флуоресценции, выбирают те, которые имеют плоское строение и сопряженную систему  $\pi$ -связей, например, азотсодержащие гетероциклы, обладающие повышенной электронной плотностью и соединенные с электроноакцепторными группами [1].

### Основная часть

В качестве основных объектов для моделирования были выбраны 4,4-диметил-2-(перфторфенил)-4*H*-имидазолы, модифицированные *N,N*-дифенил-[1,1'-бифенил]-, тиофеновыми (тиофенил-2, тиофенил-3) радикалами, которые будут выполнять роль доноров электронной плотности. Моделирование спектров в УФ-области и флуоресценции проводилось с использованием квантового пакета ORCA 6.0.1 [2] в рамках B3LYP/def2-TZVPP с учетом дисперсионной поправки D4 в газовой фазе и в разных растворителях (ацетон, толуол) в рамках континуальной модели CPCM. Визуализация спектров и молекулярных орбиталей проводилась с помощью пакета анализа волновых функций Multiwfn 3.8 [3].

Согласно квантово-химическим расчетам, выбранные молекулы поглощают УФ-излучение в диапазоне 330 нм для *N,N*-дифенил-[1,1'-бифенил]-производного с эмиссией в диапазоне 465 нм. Тиофеновые производные поглощают в диапазоне 365-440 нм и испускают в диапазоне 385-460 нм. С увеличением полярности среды (вакум-толуол-ацетон) наблюдается батохромный сдвиг пиков на 20-30 нм. Разница энергий высшей занятой и низшей свободной орбиталей располагается в диапазоне 2,5-3,0 эВ.

### Выводы

Квантово-химическое моделирование спектров в рамках теории B3LYP/def2-TZVPP позволяет теоретически предсказывать спектры абсорбции и эмиссии электромагнитного излучения в УФ-области и дает качественное представление о влиянии растворителя на спектральные свойства веществ. Полученные данные можно использовать как отправную точку для экспериментальных исследований или для создания баз данных для машинного обучения.

### Литература

1. Moseev T., Varaksin M. Fluoroaromatic 2H-imidazole-based push-pull fluorophores: Synthesis, theoretical studies, and application opportunities as probes for sensing the pH in saliva // *Dyes and Pigments*. 2022. Vol. 202. p. 110251. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2022.110251>.
2. Neese F. Software update: the ORCA program system—Version 5.0. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science* 2022;12:e1606. <https://doi.org/10.1002/wcms.1606>.
3. Lu T, Chen F. Multiwfn: a multifunctional wavefunction analyzer. *J Comput Chem* 2012;33:580–592. <https://doi.org/10.1002/jcc.22885>