

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Сибирский федеральный университет»

На правах рукописи

Щугорева Ирина Андреевна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И РАСЧЕТ СПЕКТРАЛЬНЫХ
СВОЙСТВ СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ
КВАНТОВОХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

04.06.01 Химические науки

02.00.04 Физическая химия

Научно-квалификационная работа

Научный руководитель:

Д-р хим. наук, профессор

Денисов Виктор Михайлович

Красноярск 2022

АННОТАЦИЯ

научно-квалификационной работы

Методы молекулярного моделирования в настоящее время стали неотъемлемой частью изучения функционально-структурных взаимосвязей в органических полимерах. Такой подход позволяет решать широкий класс задач, зачастую недоступных экспериментальным методам и дает понимание свойств материала еще до его синтеза, что способствует сокращению временных и денежных затрат.

В настоящей работе были исследованы полимеры трёх видов: сополифлуорены, сополиамиды и аптамеры. Материалы на их основе нашли широкое применение в различных отраслях, например, таких как: оптоэлектроника, медицина, экология и т.д. Для первых двух типов полимеров был экспериментально определен и состав, и структура, но неизвестна природа влияния различных заместителей на их оптические свойства. Для аптамеров, был известен только нуклеотидный состав, но не известна структура, поскольку получение кристаллов данных олигонуклеотидов невозможно. Поэтому целью было исследование взаимосвязи структура-свойства для органических макромолекул методами компьютерного моделирования. Были выполнены следующие задачи: моделирование флуореновых и антразолиновых звеньев синтетических полимеров с различными заместителями. Поиск геометрии в основном и возбуждённом состоянии. Расчёт фотофизических характеристик флуорен- и антразолин-содержащих полимеров. Сопоставление полученных спектральных данных с особенностями состава и строения полимера. Определение пространственной структуры коротких синтетических олигонуклеотидов (аптамеров).

В результате сделаны следующие выводы:

1. Путь сопряжения в сополиамидах значительно влияет на их спектральные свойства. Спектры поглощения и люминесценции полимеров с пара-конфигурацией имеют большую интенсивность и сдвинуты в длинноволновую область по сравнению с полимерами в мета-конфигурации.

2. Для сополиамидов с пара-конфигурациями донорная группа приводит к гипсохромному сдвигу, а для полимеров с мета-конфигурацией к батохромному сдвигу, в то время как акцепторные и разнонаправленные группы приводят к батохромному сдвигу для всех типов полимеров.

3. Увеличение числа бензотиазольных групп в цепи сополифлуорена приводит к уменьшению энергетической щели с 2,90 эВ до 2,73 эВ и, как следствие, изменение спектральных свойств.

4. Рассчитанные спектры поглощения мономерных звеньев сополифлуорена с алкильными заместителями показали, что их длина не оказывает существенное влияние на оптические свойства. Это объясняется тем, что, электронные состояния цепи предельных углеводородов не внося вклад в образование молекулярных орбиталей, определяющих основные электронные переходы в поглощении и люминесценции.

5. Методами компьютерного моделирования получены третичные структуры аптамера LC-18t. Сравнение полученных 3D-моделей с экспериментальными данными МУРР позволило отобрать наиболее вероятную конформацию аптамера в растворе.

Практическое применение результатов НКР возможно в оптоэлектронике и в биотехнологии в качестве базы для создания биосенсоров и органических оптоэлектронных устройств.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Сибирский федеральный университет»

На правах рукописи



Щугорева Ирина Андреевна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И РАСЧЕТ СПЕКТРАЛЬНЫХ
СВОЙСТВ СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ
КВАНТОВОХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

04.06.01 Химические науки

02.00.04 Физическая химия

Научно-квалификационная работа

Научный руководитель:

д-р хим. наук, профессор



Денисов Виктор Михайлович

Красноярск 2022