

Міністерство освіти і науки України

Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка

Фізико-математичний факультет

Кафедра фізики

Дипломна робота магістра

З теми: **Неемпіричні молекулярні спектри Raman та IR**

Виконав студент 2 курсу F1-M20 групи

Спеціальності 014 Середня освіта (Фізика)

Розум'як Денис Євгенович

**Керівник:** Поведа Р. А., канд. фіз.-мат.

наук, доцент

**Кам'янець-Подільський, 2021 р.**

## ЗМІСТ

|   |    |
|---|----|
| ВСТУП .....   | 3  |
| РОЗДІЛ 1. Проблематика комп'ютерного моделювання молекул та атомів  | 5  |
| 1.1 Теоретичні засади комп'ютерного моделювання спектрів .....  | 8  |
| РОЗДІЛ 2. Спектри та спектральний аналіз .....  | 9  |
| 2.1 Інфрачервона спектроскопія .....  | 11 |
| 2.1.1 Теорія ІЧ-спектру .....   | 14 |
| 2.2 Комбінаційне розсіювання світла .....   | 16 |
| 2.3 Коливальні спектри.....   | 22 |
| 2.4 Нормальні коливання.....  | 26 |
| 2.5 Адіабатичне наближення .....  | 28 |
| РОЗДІЛ 3. Методи комп'ютерного моделювання синтетичних спектрів та періодичних структур .....   | 31 |
| 3.1 Квантові методи .....   | 31 |
| 3.2 Метод Гартрі-Фока .....   | 32 |
| 3.3 Напівемпіричні методи.....  | 36 |
| 3.4 Досягнення в фізиці твердого тіла, медицині що були здійснені за допомогою синтетичних спектрів. ....   | 41 |
| РОЗДІЛ 4. Обраховані спектри Пірену (C <sub>16</sub> H <sub>10</sub> ), Етилену (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ), Поліетилену (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ) <sub>n</sub> та Поліпропілену(C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> ) <sub>n</sub> ..... | 43 |
| ВИСНОВКИ.....   | 71 |
| СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....  | 72 |

## ВСТУП

Квантову хімію та квантово-механічні розрахунки використовують для передбачення геометричної будови, енергії, термодинамічних характеристик не тільки для уже відомих, а і для теоретично можливих молекул. На даний час квантово-механічний метод досліджень надзвичайно швидко розвивається, він є одним з найважливіших методів хімічних досліджень. Певної цінності цей метод набуває в процесі передбачення властивостей ще невідомих сполук, синтез яких може бути досить складною процедурою, яка вимагає великих витрат часу і матеріальних ресурсів дослідників. Також на сучасному етапі розвитку комп'ютерних технологій і створення високопродуктивних і універсальних програм для квантової хімії, існує можливість розрахунку хімічних властивостей сполук з дуже високою точністю.

Одна з програм для розрахунку класів структури і властивостей молекул є програма GAUSSIAN. З часу її створення в 1970 році вийшло багато версій цієї програми, в кожному з яких були додано всі досягнення розвитку квантової хімії та програмування.

**Мета роботи** – синтезувати молекулярні коливання спектрів за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення, дослідити молекулярні коливання спектрів за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення та розрахувати за допомогою комп'ютерного моделювання спектри ІЧ-поглинання та комбінаційного розсіювання світла.

**Актуальність роботи** полягає в тому що на сучасному етапі розвитку науки та техніки стали доступні можливості моделювати поведінку молекул у віртуальних середовищах з дуже високим ступенем достовірності, що дозволяє досліджувати основні властивості речовин без їх синтезу. Таким чином можливо сильно підвищити ефективність наукових досліджень та прискорити процес синтезу тих молекул і речовин які проявлять потрібні електронні, оптичні та механічні властивості.

**Об'єкт дослідження:** молекулярні коливання спектрів та спектри ІЧ-поглинання(IR) і комбінаційного розсіювання світла(Raman).

**Предмет дослідження:** є змодельовані за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення молекули Пірену, Етилену, Поліетилену і Поліпропілену.

**Методи дослідження:** в процесі виконання роботи використано такі методи досліджень як: Квантові методи, Метод Гартрі-Фока та Напівемпіричні методи, також описані їхні відмінності.

**Структура та об'єм роботи.** Дипломна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел. Робота викладена на 75 сторінках друкованого тексту.

## ВИСНОВКИ

Магістерське дослідження на тему: «Неемпіричні молекулярні спектри Raman та IR» виконано майже у повному обсязі. В даній дипломній роботі було розглянуто та проаналізовано актуальність комп'ютерного моделювання спектрів а також основні методи такі як: Квантові методи, Метод Гартрі-Фока та Напівемпіричні методи, вказані їхні відмінності. Розглянуті теоретичні засади комп'ютерного моделювання спектрів. Описані галузі промисловості в яких використовують традиційну спектроскопію та синтетичні спектри. Вказані основні досягнення і роль в сучасній фізиці та медицині, роль синтетичних спектрів в створенні нових ліків і матеріалів.

Розраховано коливальні спектри пірену та етилену, отримано їхні нормальні моди коливань та рівні енергій. Також обчислені спектри інфрачервоного поглинання та комбінаційного розсіювання світла молекул пірену та етилену.

Обчислені та відображені на графіках спектри інфрачервоного поглинання (IR) та комбінаційного розсіювання світла (Raman).

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.

1. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. – 618 ст.
2. Атомні і молекулярні спектри [Електронний ресурс] //sites.google.com/ – 2019. – Режим доступу до ресурсу: <https://sites.google.com/view/galinaokhotnik-tt14/%D0%B0%D1%82%D0%BE%D0%BC%D0%BD%D1%96-%D1%96-%D0%BC%D0%BE%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%83%D0%BB%D1%8F%D1%80%D0%BD%D>.
3. Банкер Ф. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. М.: Мир, 1981. – 333 с.
4. Барсуков В.И. Атомный спектральный анализ М.: 2005. – 103 с.
5. Бахшиев Н.Г. Введение в молекулярную спектроскопию. Ленинград: ЛГУ, 1987. – 215 с.
6. Беллами Л. Инфракрасные спектры молекул, пер. с англ. М., 1957. – 592с.
7. Блейкмор Дж. Физика твердого тела М.: Мир, 1988. – 608 с.
8. Брандмюллер И., Мозер Г., Введение в спектроскопию комбинационного рассеяния света, пер. с нем. М., 1964. – 628 с.
9. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работы с программами Gaussian і GaussView. М.: Солон Прес, 2011. – 220 с.
10. Войтюк И.И. Симметрия молекул. Новосибирск: Изд-во НГУ 1988. – 80с.
11. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. в 2-х частях. Часть 1: Пер. с англ. – М.: Мир, 1990.
12. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Физматлит, 1963. – 704 с.
13. Давыдов А.С. Теория твердого тела. М.: Наука, 1976. – 646 с.
14. Дудик М.В., Хазіна С.А. Моделювання фізичних явищ у комп'ютерних навчальних програмах: Навчальний посібник. – Умань, 2007. – 72 с.
15. Дудик М.В., Хазіна С.А. Навчання майбутніх вчителів фізики технології комп'ютерного моделювання // Інформатика та інформаційні технології в навчальних закладах. – 2006.
16. Етилен, властивості [Електронний ресурс] // Вікіпедія – Режим доступу до ресурсу: <https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%95%D1%82%D0%B8%D0%BB%D0%B5%D0%BD>.

17. Етилен. Молекулярні, електронні та структурні формули, фізичні властивості. Хімічні властивості [Електронний ресурс] // <https://edufuture.biz/> – Режим доступу до ресурсу:  
[https://edufuture.biz/index.php?title=%D0%95%D1%82%D0%B8%D0%BB%D0%B5%D0%BD.\\_%D0%9C%D0%BE%D0%BB%D0%B5%D0%D1%82%D1%96.\\_%D0%A5%D1%96%D0%BC%D1%96%D1%87%D0%BD%D1%96\\_%D0%B2%D0%BB%D0%B0%D1%81%D1%82%D0%B8%D0%B2%D0%BE%D1%81%D1%82%D1%96](https://edufuture.biz/index.php?title=%D0%95%D1%82%D0%B8%D0%BB%D0%B5%D0%BD._%D0%9C%D0%BE%D0%BB%D0%B5%D0%D1%82%D1%96._%D0%A5%D1%96%D0%BC%D1%96%D1%87%D0%BD%D1%96_%D0%B2%D0%BB%D0%B0%D1%81%D1%82%D0%B8%D0%B2%D0%BE%D1%81%D1%82%D1%96).
18. Заидель А. Н., Основы спектрального анализа, М., 1965,
19. Зейман Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974. – 478 с.
20. Зисман Т.А., Тодес О.М. Курс общей физики. Том III М.: 1970. – 336 с.
21. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. Том 1. Перевод а англ. М.: Гос. изд-во технико-теоретической литературы, 1956. – 321 с.
22. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. Том 2. Перевод а англ. М.: Гос. изд-во технико-теоретической литературы, 1956. – 321 - 592 с.
23. Інфрачервона спектроскопія [Електронний ресурс] // <https://uk.wikipedia.org/> – Режим доступу до ресурсу:  
[https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%86%D0%BD%D1%84%D1%80%D0%B0%D1%87%D0%B5%D1%80%D0%B2%D0%BE%D0%BD%D0%B0\\_%D1%81%D0%BF%D0%B5%D0%BA%D1%82%D1%80%D0%BE%D1%81%D0%BA%D0%BE%D0%BF%D1%96%D1%8F](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%86%D0%BD%D1%84%D1%80%D0%B0%D1%87%D0%B5%D1%80%D0%B2%D0%BE%D0%BD%D0%B0_%D1%81%D0%BF%D0%B5%D0%BA%D1%82%D1%80%D0%BE%D1%81%D0%BA%D0%BE%D0%BF%D1%96%D1%8F).
24. Карапетьянц М.Х., Дракин С. И. Строение вещества. М.: Высшая школа, 1978. – 480 с.
25. Квантовая оптика Типи спектрів. Спектри поглинання і випромінювання. Спектральний аналіз [Електронний ресурс] // <https://subject.com.ua/> – Режим доступу до ресурсу:  
<https://subject.com.ua/dovidnik/physics/127.html>.
26. Киреев П.С. Физика полупроводников М.: Высшая школа 1975. – 586 с.
27. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М.: Наука, 1967. – 492 с.
28. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990. – 383 с.
29. Клопман Г., Иванс Р. Методы пренебрежения дифференциальным перекрыванием. Полуэмпирические методы расчета электронных структур. - Т.2.- М.: Мир, 1980. – 437 с.
30. Кобзев Г.И. Применение неэмпирических и полуэмпирических методов в квантово-химических расчетах - Оренбург - 2004. – 445 с.

31. Комп'ютерне молекулярне моделювання [Електронний ресурс]. – 2020. – Режим доступу до ресурсу:  
[https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%9A%D0%BE%D0%BC%D0%BF%27%D1%8E%D1%82%D0%B5%D1%80%D0%BD%D0%B5\\_%D0%BC%D0%BE%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%83%D0%BB%D1%8F%D1%80%D0%BD%D0%B5\\_%D0%BC%D0%BE%D0%B4%D0%B5%D0%BB%D1%8E%D0%B2%D0%B0%D0%BD%D0%BD%D1%8F](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%9A%D0%BE%D0%BC%D0%BF%27%D1%8E%D1%82%D0%B5%D1%80%D0%BD%D0%B5_%D0%BC%D0%BE%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%83%D0%BB%D1%8F%D1%80%D0%BD%D0%B5_%D0%BC%D0%BE%D0%B4%D0%B5%D0%BB%D1%8E%D0%B2%D0%B0%D0%BD%D0%BD%D1%8F).
32. Кросс А., Введение в практическую инфракрасную спектроскопию, пер. с англ. М., 1961. – 114 с.
33. Метод Гартрі — Фока [Електронний ресурс] //uk.wikipedia.org/ – Режим доступу до ресурсу:  
[https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4\\_%D0%93%D0%B0%D1%80%D1%82%D1%80%D1%96\\_%E2%80%94%D0%A4%D0%BE%D0%BA%D0%B0](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4_%D0%93%D0%B0%D1%80%D1%82%D1%80%D1%96_%E2%80%94%D0%A4%D0%BE%D0%BA%D0%B0).
34. Минкин В. И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М.. Теория строения молекул: Электронные оболочки. М.: Высшая школа, 1979. – 560 с.
35. Мокрушин. В.С. Квантово-химические расчеты органических молекул. - Екатеринбург – 2005.
36. Наберухин Ю.И. Лекции по молекулярной спектроскопии. Новосибирск: Инд-во НГУ, 1978. – 293 с.
37. Немошкаленко В.В., Кучеренко Ю.Н. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. К.: Наукова демка, 1986. – 294 с.
38. Осадько И.С. Селективная спектроскопия одиночных молекул. М.: Наука, 2000. – 320 с.
39. Прикладная инфракрасная спектроскопия. Пер. с англ./Под ред. Д.Кендалла. М.: Мир, 1970. – 328 с.
40. Рамановская спектроскопия [Електронний ресурс] // <https://www.mt.com/> – Режим доступу до ресурсу:  
[https://www.mt.com/ru/ru/home/applications/L1\\_AutoChem\\_Applications/Raman-Spectroscopy.html](https://www.mt.com/ru/ru/home/applications/L1_AutoChem_Applications/Raman-Spectroscopy.html).
41. Рамановский спектр [Електронний ресурс] // <https://dic.academic.ru/> – Режим доступу до ресурсу:  
<https://dic.academic.ru/dic.nsf/ruwiki/1116344>.
42. Русанов А. К. Основы количественного спектрального анализа руд и минералов. М., 1971.
43. Савельев И.В. Курс общей физики. Том 3 М., 1979. – 508 с.
44. Сигал Дж. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. Т.2 М.: Мир, 1980. – 327 с.



45. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия. Основы, техника, аналитическое применение. перевод с англ. М.: Мир, 1982. – 328 с.
46. Соловьев М.Е, Соловьев М.М. Компьютерная химия. М.: Солон Прес, 2005. – 535 с.
47. Спектри випромінювання і поглинання [Електронний ресурс] // <https://sites.google.com/> – Режим доступу до ресурсу: <https://sites.google.com/site/spektriviprominuvanna/>.
48. СПЕКТРОСКОПІЯ КОМБІНАЦІЙНОГО РОЗСІЮВАННЯ СВІТЛА [Електронний ресурс] // <https://www.pharmencyclopedia.com.ua/> – Режим доступу до ресурсу: <https://www.pharmencyclopedia.com.ua/article/595/spektroskopiya-kombinacijnogo-rozsiyuvannya-svitla>
49. Степанов В. Н., Нестеров И. А. Применение неэмпирических методов квантовой химии для определения внутримолекулярных эффектов взаимодействия заместителей - М.: Химия, - 2010. – 820 с.
50. Строение молекулы этилена [Електронний ресурс] // <http://ru.solverbook.com/> – Режим доступу до ресурсу: <http://ru.solverbook.com/spravochnik/ximiya/11-klass/stroenie-atoma/molekula-etilena/>.
51. Сущинский М.М. Комбинационное рассеяние света и строение вещества. М.: Наука, 1981. – 576 с.
52. Теорія розсіювання [Електронний ресурс] // <https://uk.freejournal.org/> – Режим доступу до ресурсу: <https://uk.freejournal.org/1240331/1/teoriya-zburen.html>.  
Теорія розсіювання [Електронний ресурс] // <https://uk.freejournal.org/> – Режим доступу до ресурсу: <https://uk.freejournal.org/1240331/1/teoriya-zburen.html>.
53. Цюлике Л. Квантовая химия: Основы и общие методы. - Т.1.- М.: Мир, 1976. – 512 с.
54. Чулановский В. М., Введение в молекулярный спектральный анализ, М. - Л., 1951.
55. Щембелов Г.А., Устынюк Д.А., Мамаев В.Н. и др. Квантово-химические методы расчета молекул. - М.: Химия, 1980. – 178 с.