**Квантово-химическое моделирование взаимодействия поверхностных агентов с квантовыми точками CdS**

***Исхаков А.Ф., Романова К.А.***

*Студент, 1 курс магистратуры*

*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*

*E-mail: iskhakov.adil@mail.ru*

Квантовые точки (КТ) являются перспективными объектами изучения нанотехнологий и материаловедения, разработка которых может привести к их широкому применению во многих областях техники. Модификация строения и поверхности КТ позволяет придавать им новые свойства, а также направленно варьировать уже существующие. Применение для модификации КТ поверхностных агентов повышает стабильность КТ, предотвращает их агломерацию, позволяет сохранить форму и размер частиц, исключает доступ к поверхности посторонних соединений. Помимо этого поверхностные агенты способны придать КТ новые свойства, в том числе биосовместимость для применения в биомедицине. По этим причинам необходимо понимание механизмов взаимодействия КТ и поверхностных агентов. Однако трудоемкость и немалая стоимость синтеза наночастиц ограничивает возможности экспериментального исследования широкого круга объектов. Квантово-химическое моделирование позволяет решить данные проблемы и определить свойства КТ до стадии их синтеза. Основная сложность квантово-химического моделирования заключается в адекватности используемых при этом методов и моделей, для оценки работоспособности которых требуется сравнение с экспериментальными данными.

В данной работе в качестве объектов исследования были выбраны ряд поверхностных агентов (тиогликолевая, тиопропионовая и дигидролиполевая кислоты, и др.) и полупроводниковые КТ CdS. Оптимизация геометрии молекул и расчеты их ИК˗спектров проводились в программе Gaussian с использованием метода Хартри-Фока (HF) и теории функционала плотности (DFT) со функционалами B3LYP, CAM-B3LYP, PBE1PBE и HSEH1PBE. В качестве базисных наборов были выбраны 6˗31G(d,p) и 6˗311G(d,p). Для выбора наиболее оптимального подхода было проведено сравнение рассчитанных ИК-спектров с экспериментальными. В результате для метода HF минимальная средняя погрешность составила 1,9% при базисном наборе 6-311G(d,p). Для метода DFT минимальная погрешность (1%) наблюдалась в случае функционала HSEH1PBE. В результате был выбран оптимальный подход к расчету молекул поверхностных агентов –HSEH1PBE / 6-311G(d,p).

На следующем этапе проводилась оптимизация геометрии поверхности КТ CdS, состоявшая из трех монослоев, на которой были закреплены молекулы поверхностных агентов. Был проведен расчет энергий образующихся донорно-акцепторных связей между поверхностными атомами Cd и функциональными группами поверхностных агентов. При этом были рассмотрены случаи моно- и бидентантной координации молекул агентов на поверхности КТ. Была произведена оценка влияния природы функциональных групп поверхностных агентов на величину энергии их донорно-акцепторной связи с поверхностью CdS.