**Квантово-химическое моделирование координации комплекса Eu(III) на поверхности квантовых точек CdS и ZnS**

***Исхаков А.Ф.***

*Аспирант, 1 год обучения*

*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*

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

Квантовые точки (КТ) представляют собой наноразмерные полупроводниковые частицы, обладающие уникальными физико-химическими свойствами. Также к современным материалам относят комплексы европия(III) (Eu(III)), которые используются в качестве люминофоров. Для этих материалов существует такое явления как перенос фотовозбуждения, что открывает уникальные возможности для создания оптических материалов на их основе. Одним из способов изучения структуры и свойства новых материалов является применение методов квантово-химических моделирования. Применение эффективных методов позволяет разрабатывать новый материал и усовершенствовать существующий до практического синтеза, обходя сложности синтеза и дороговизну материалов.

В данной работе в качестве объектов исследования были выбраны такие КТ как CdS и ZnS. В качестве поверхностных агентов (ПА) были выбраны тиокарбоновые кислоты — тиогликолевая, тиопропионовая и дигидролеполевая. В качестве модельного комплекса был выбран комплекса Eu(III) с 2-теноилтрифторацетоном (ТТА) и с основанием Льюиса.

Моделирование и оптимизация геометрии молекул ПА проводились с использованием метода DFT HSEH1PBE / 6-311G(d,p). В качестве метода моделирования и оптимизации геометрии поверхности КТ CdS и ZnS, состоявшей из трех монослоев, был выбран PM7. В качестве методов моделирования и оптимизация геометрии молекулы комплекса Eu(III) использовался метод RM1/Sparkle. Для оценки возможности координации комплекса Eu(III) на поверхности КТ был проведен расчет энергий образующихся донорно-акцепторных связей между: поверхностными атомами Cd и Zn и ПА с функциональными группами –SH; между комплексом Eu(III) и ПА с функциональными группами –COOH; а также расчет всей системы «КТ – ПА – комплекс Eu(III)»

Результаты показали, что поверхности КТ и ПА способны образовывать с друг другом донорно-акцепторную связь со значением энергии ~1–7 эВ. Также расчет показал, что энергия взаимодействия между ПА и комплексом Eu(III) имеет значение около 0,18 эВ, что говорит о возможной, но слишком слабой связи между компонентами. Оценка влияния системы «КТ – ПА – Eu(III)TTA3» на геометрию поверхности КТ в присутствии и без комплекса Eu(III) показала значение среднего отклонения длин связи 0,5 %, что говорит о возможности исследования взаимодействия поверхности КТ с ПА.

Дальнейшие исследования включат изучение других комплексов лантаноидов(III), а также их взаимное влияние друг на друга при координации на поверхности КТ

*Выражаю благодарность научному руководителю проф. д.х.н. Галяметдинову Ю.Г., доц. к.х.н. Романовой К.А. и сотрудникам кафедры ФКХ. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00. Тема исследования «Создание научных основ получения новых мультифункциональных материалов широкого спектра применения».*