

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ МОЛЕКУЛЯРНОЇ МЕХАНІКИ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ БУДОВИ ІММОБІЛІЗОВАНИХ КОМПЛЕКСІВ ВАНАДИЛУ*Малюк М. В.*

Національний університет «Києво-Могилянська академія»

04070, м. Київ, вул. Г. Сковороди, 2, Україна

m.maliuk@ukma.edu.ua

Імобілізовані координаційні сполуки ванадилу (VO^{2+}) є перспективними системами для каталізу, матеріалознавства та біомедичних застосувань. Однак їхня будова та склад залишаються часто невизначеними через обмеженість експериментальних методів встановлення структури на поверхні носія. Вивчення цих комплексів з використанням методів молекулярної механіки є важливим кроком до розуміння їхніх властивостей та функціональності.

Методи квантової хімії дозволяють проводити глибокий аналіз електронної структури, однак є ресурсозатратними та обмеженими щодо великих систем. У цьому контексті молекулярна механіка (ММ) стає альтернативним підходом, що забезпечує швидке прогнозування просторової будови імобілізованих комплексів ванадилу на різних носіях.

У даній роботі проведено моделювання імобілізованих комплексів VO^{2+} на поверхні функціоналізованого кремнезему для визначення стабільних конфігурацій. Оцінено вплив природи носія на геометричні параметри комплексів та їхню стабільність. Встановлено, що молекулярна механіка дозволяє отримувати структури (Рис.), які добре узгоджуються з відомими експериментальними даними та розрахунками методами квантової хімії.

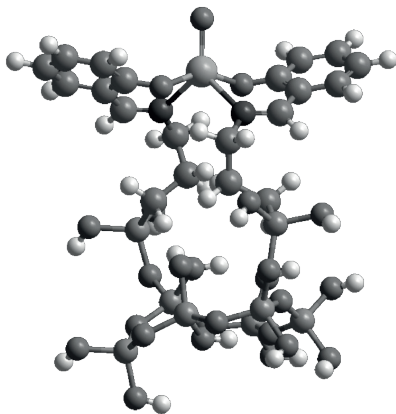


Рис. Комплекс ванадію з основою Шиффа (саліцилалемін) імобілізований на поверхні SiO_2 змодельований методом молекулярної механіки.

Отримані результати демонструють, що методи молекулярної механіки можуть бути ефективним інструментом для попереднього аналізу структури імобілізованих комплексів ванадилу. Це відкриває перспективи для подальших комбінованих досліджень, що включають як класичні, так і квантово-хімічні підходи, для розробки нових каталізаторів і функціональних матеріалів.