

УДК 539.194:535.37

DOI: 10.17223/00213411/63/8/86

В.А. ПОМОГАЕВ^{1,2}, П.Н. КЛЮЕВ³, Р.Р. РАМАЗАНОВ³, А.И. КОНОНОВ³**КОМБИНИРОВАННОЕ КВАНТОВО-КЛАССИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФОТОИНДУЦИРОВАННОГО ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ
ОТ БИОПОЛИМЕРНЫХ СЕГМЕНТОВ К ФОТОХРОМНЫМ ЗОНДАМ***

Механизм тушения флуоресценции человеческого сывороточного альбумина путем переноса энергии фотоиндуцированного электронного возбуждения от единственного в структуре триптофанового остатка к введенному в его окрестность нитроспиропирановому донору исследован путем гибридного компьютерного моделирования, включающего в себя классическую молекулярную динамику и полуэмпирические фотофизические расчеты для построения статистических спектров излучения триптофана и поглощения нитроспиропирана. Проведены оценки вероятности перераспределения электронного возбуждения между донором и акцептором с последующей фотохромной трансформацией нитроспиропирана к мероцианиновой форме, которая легко распознаваема благодаря значительному смещению длинноволновой полосы поглощения и может рассматриваться как люминесцентный детектор протекающих фотопроцессов. Детально рассмотрены механизмы переноса энергии между неравновесными фрагментами в типичных комбинациях их комплекса. Общая схема и технические детали моделирования оптических спектров проиллюстрированы на простой системе молекулы антрацена в аргоне. Также представлено обсуждение других комбинаций классического представления с квантово-механическими расчетами, развиваемыми на различных теоретических уровнях, которые применяются в современной вычислительной молекулярной спектроскопии.

Ключевые слова: гибридное КМ-ММ-моделирование, биологические последовательности, перенос возбужденной энергии, статистические спектры, фотофизический отклик, оптические зонды.

Введение

Методы молекулярной спектроскопии находят применение во всех областях современной химии, от физической до органической, от аналитической до биологической. Как степень сложности получения и интерпретации спектральных данных, так и разнообразие применения спектроскопического анализа расширились до беспрецедентных границ областей теоретических знаний и практического применения в биополимерных исследованиях, медицине, фармакологии, экологической энергетике, лазерных и электронных технологиях и ряде других дисциплин, где регистрируются спектральные отклики на разнообразные процессы взаимодействия между частицами вещества. Это позволяет извлекать полезную информацию для разработки и тестирования новых материалов с заданными свойствами, а также для исследования и контроля за всевозможными молекулярными реакциями. Современная наука и промышленность имеют дело со все более сложными комбинированными веществами и химическими средами, пограничными агрегатными состояниями, в частности с биомолекулярными матрицами, в которых возможно точно настраивать и отслеживать спектральные свойства хромофора.

Химические реакции в органических и биополимерных структурах с учетом окружения изучаются, в основном, на растворах или супрамолекулярных матрицах. Следовательно, понимание процессов взаимодействия между соединением и его окружением является одной из ключевых задач теоретических исследований. Молекулярное моделирование структур и химических процессов играет существенную роль в интерпретации и предсказании спектроскопических свойств, которые могут быть прямо сопоставлены с экспериментальной информацией и дать более глубокое теоретическое обоснование и понимание исследуемых объектов и реакций. Даже в тех случаях, когда расчеты не воспроизводят измеряемые спектры с удовлетворительной точностью, они все же могут быть полезны для качественного выяснения того, как окружение влияет на положение или интенсивность пиков и спектрального профиля.

В последнее двадцатилетие вместе со стремительным ростом компьютерных мощностей, быстрой скоростью и емкостью процессоров и доступностью к гигантским объемам памяти хранения информации стали бурно развиваться комбинированные (*multiscale*) квантово-классические мето-

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-53-51005 НИФ_а РФФИ-Корея).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>