

УДК 539.194:535.37

DOI: 10.17223/00213411/63/8/86

*В.А. ПОМОГАЕВ<sup>1,2</sup>, П.Н. КЛЮЕВ<sup>3</sup>, Р.Р. РАМАЗАНОВ<sup>3</sup>, А.И. КОНОНОВ<sup>3</sup>***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, быстроедействие 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>