

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

**XXVII ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ-ХИМИКОВ
(С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ)**

Нижегород, 16-18 апреля 2024 г.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Нижегород
Издательство Нижегородского государственного университета
2024

УДК 54
ББК 24
Д 22

XXVII Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием): тезисы докладов (Нижний Новгород, 16–18 апреля 2024 г.). Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2024. – 741 с.

ISBN 978-5-91326-881-5

В сборник включены тезисы докладов XXVII Всероссийской конференции молодых учёных-химиков (с международным участием). В ежегодных конференциях, проходящих в Университете Лобачевского, участвуют молодые ученые, аспиранты, студенты и школьники. Эти конференции способствуют активизации научно-исследовательской деятельности молодых ученых и специалистов, расширению их научного кругозора и связей между различными научными направлениями, обмену актуальной информацией, выявлению инновационного потенциала молодежи, расширению связей между наукой и производством.

ISBN 978-5-91326-881-5

УДК 54
ББК 24

Электронная версия сборника тезисов докладов на сайте:
<http://www.youngchem-conf.unn.ru/>

Моделирование кинетики фотоиндуцированной фрагментации ретиналя

Кулиев Р.Г., Белецан О.Б., Боченкова А.В.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,

Москва, Россия

E-mail: kuliev71@mail.ru, ol.beletsan2015@yandex.ru,

bochenkova@phys.chem.msu.ru

Протонированное основание Шиффа транс-ретиналя является хромофорной группой родопсинов 1-го типа – светочувствительных белков, выполняющих фотоэнергетическую и сенсорную функции. Поглощение фотона в белковом окружении приводит к изомеризации транс-ретиналя, и через последовательное образование интермедиатов молекула возвращается в исходное состояние. Таким образом осуществляется фотоцикл – механизм функционирования ретиналь-содержащих белков. Однако проведение реакции в газовой фазе предотвращает возможность передачи энергии окружающей среде и, как следствие, одним из возможных каналов реакции является фотоиндуцированная фрагментация. Избыток энергии перераспределяется после фотовозбуждения по колебательным модам и, если ее достаточно для преодоления барьера реакции, происходит изомеризация молекулы и дальнейшая фрагментация с образованием укороченного основания Шиффа и толуола. При возбуждении в видимом диапазоне реакция протекает селективно. Целями данной работы являются анализ механизма данной реакции, построение кинетической схемы и расчет времени жизни изолированных молекул ретиналя после фотовозбуждения в видимом диапазоне.

В работе разработан и реализован метод расчета времени жизни изолированной системы в зависимости от длины волны возбуждения в рамках квазиравновесной теории. Метод основан на расчете плотности колебательных уровней с помощью алгоритма Байера-Свайнхарта. Вычисление энергий стационарных точек проведены с использованием многоконфигурационной теории возмущений второго порядка в варианте MRMP2/CASSCF(12,12)/cc-pVDZ. С помощью разработанного метода был исследован механизм фотоиндуцированной фрагментации ретиналя, а также проведена оценка времени жизни изолированных молекул при возбуждении с длиной волны 530 и 550 нм. По итогам работы проведено сравнение теоретических и экспериментальных времен жизни и показано их хорошее согласие, предложена кинетическая модель для описания процесса фотоиндуцированной фрагментации и предложен способ оценки времени жизни молекулы в зависимости от длины волны возбуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №22-13-00126).