



Ермолаева А.А

DFT РАСЧЁТ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ОРБИТАЛЕЙ ФТАЛОЦИАНИНА КОБАЛЬТА(II)

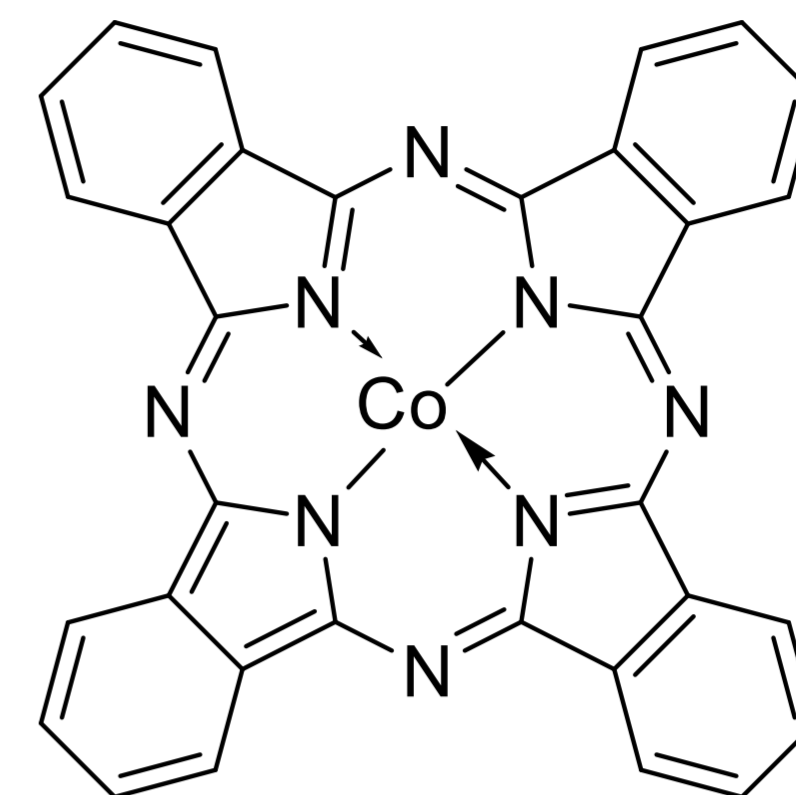
Тверской
государственный
университет

Кафедра неорганической и аналитической химии ТвГУ
Руководитель Алексеев В.Г.

E-mail: aermolaeva155@gmail.com

Объект исследования: фталоцианин кобальта(II)

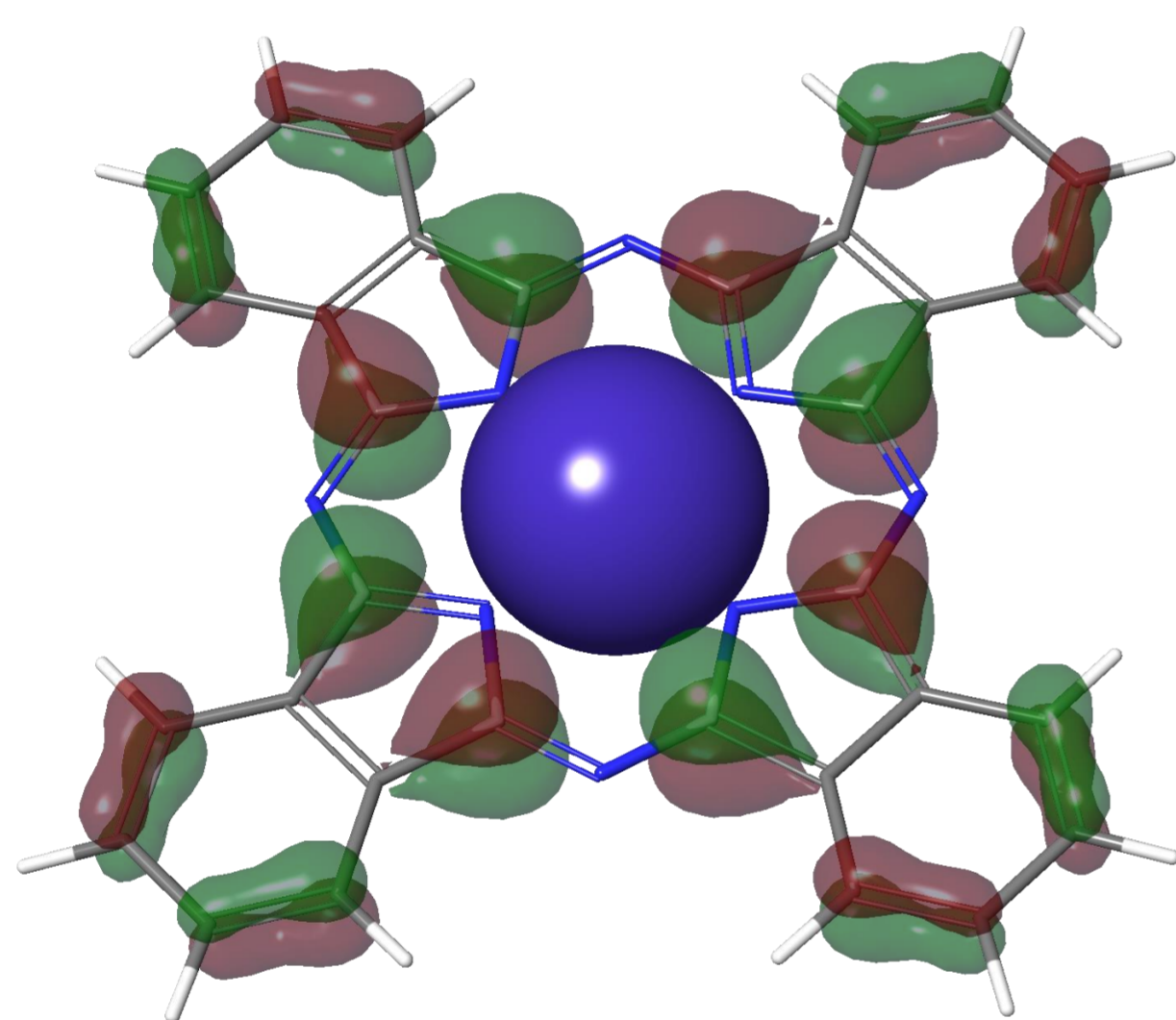
Фталоцианин кобальта (CoPc) используется во многих органических электронных устройствах, таких как светоизлучающие диоды (LED), органические фотогальванические элементы (OPV), органические полевые транзисторы (OFET) и химические датчики.



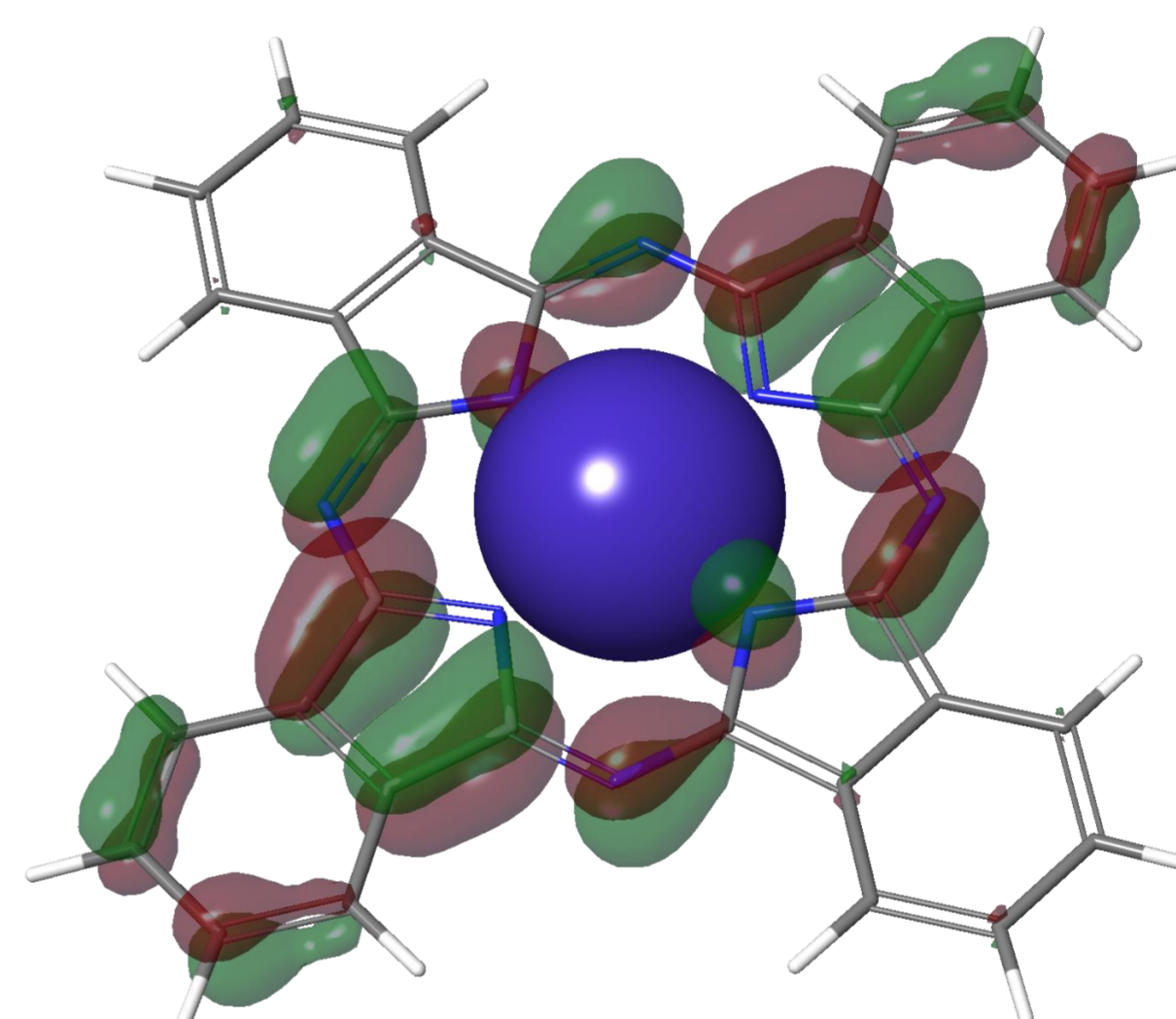
Структурная формула фталоцианина кобальта

Цель: подобрать функционал, обеспечивающий правильный расчёт энергии HOMO и LUMO молекулы фталоцианина кобальта(II).

Изображение электронных орбиталей фталоцианина кобальта



HOMO



LUMO

Геометрия молекулы CoPc рассчитана методом DFT / PW6B95-D3 / LACVP**++, длины и углы связей хорошо совпадают с экспериментальными данными.

Результаты расчёта энергии HOMO и LUMO представлены в таблице

Функционал	Тип функционала	HOMO, eV	LUMO, eV	E _g , eV
Эксперимент		-5.0	-3.4	1.6
M11-L	meta-GGA	-5.10	-3.60	1.50
TPSS	meta-GGA	-4.40	-3.21	1.19
MN12-L	meta-NGA	-4.33	-3.00	1.33
SCAN	meta-GGA	-4.25	-3.20	1.05
PW6B95-D3	hybrid-GGA	-5.37	-2.85	2.52
M05-2X-D3	hybrid-GGA	-5.93	-2.40	3.53
M06-2X-D3	hybrid-GGA	-5.92	-2.45	3.47
M06-L	meta-GGA	-3.89	-3.14	0.75
OLYP-D3	GGA	-3.98	-3.05	0.93
ωB97X-D	hybrid-GGA	-6.38	-1.65	4.73

Вывод: хорошее совпадение с экспериментальными данными обеспечивает использование meta-GGA функционала M11-L.