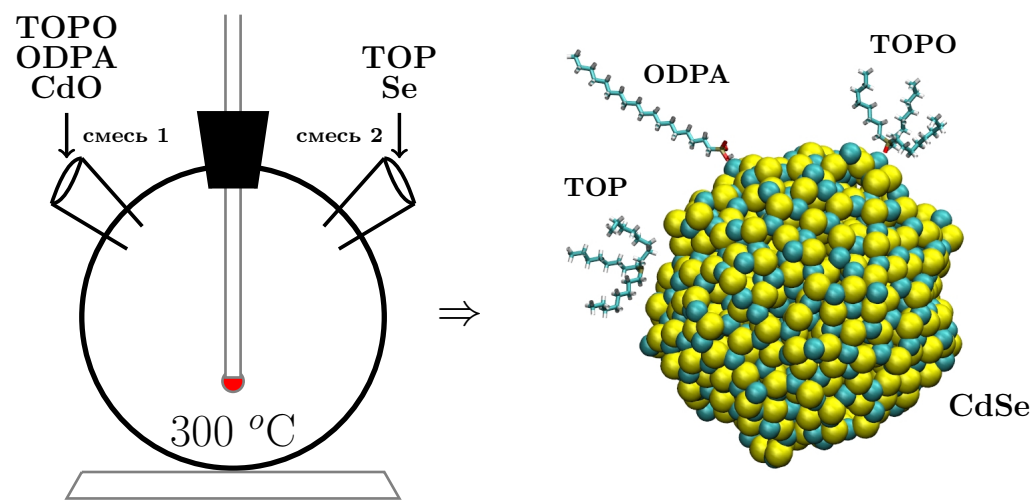


Компьютерное моделирование лигандных оболочек полупроводниковых коллоидных квантовых точек

Невидимов А.В., Разумов В.Ф
Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка
e-mail: *nevidimovsasha@yandex.ru*

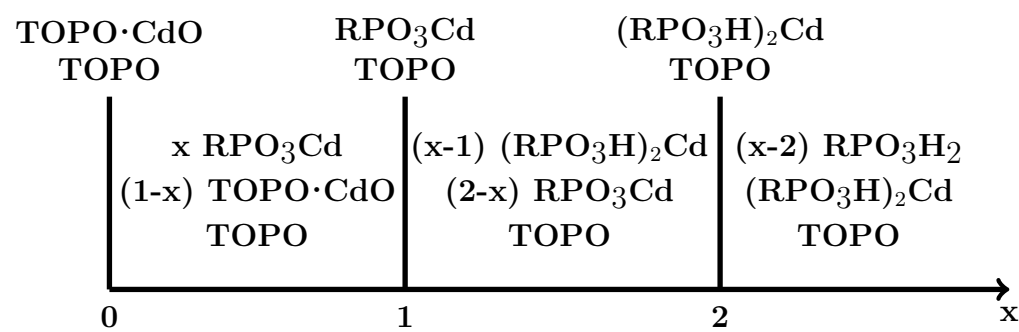
Задача



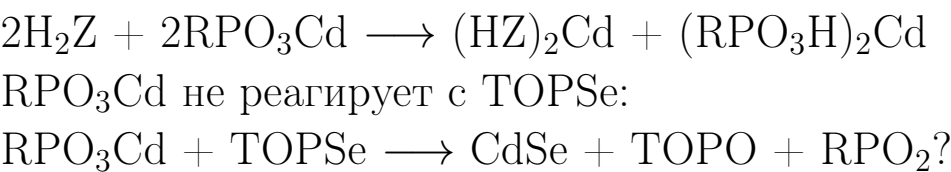
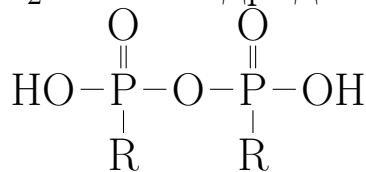
1. Какие лиганды и в какой форме в оболочке?
2. Сколько каждого лиганда в оболочке?
3. Как удерживаются лиганды поверхностью?

Реакции в исходной смеси

Пусть $x = \frac{n(ODPA)}{n(CdO)}$. Состав смеси 1 зависит от x :



При добавлении смеси 2 имеем реакции:
 $CdO \cdot TOPO + TOPSe \rightarrow CdSe + 2TOPO$
 $(RPO_3H)_2Cd + TOPSe \rightarrow CdSe + TOPO + H_2Z$,
где H_2Z — ангидрид ODPA:



Лиганды в оболочке

В зависимости от $n(ODPA):n(CdO):n(TOPSe)$ оболочка может иметь следующие лиганды:
ТОРО и TOP (во всех системах), RPO_3H_2 (система 3), RPO_3Cd (система 4), $(RPO_3H)_2Cd$ (система 5), H_2Z (система 6), $(HZ)_2Cd$ (система 7).

Результаты моделирования^[1]

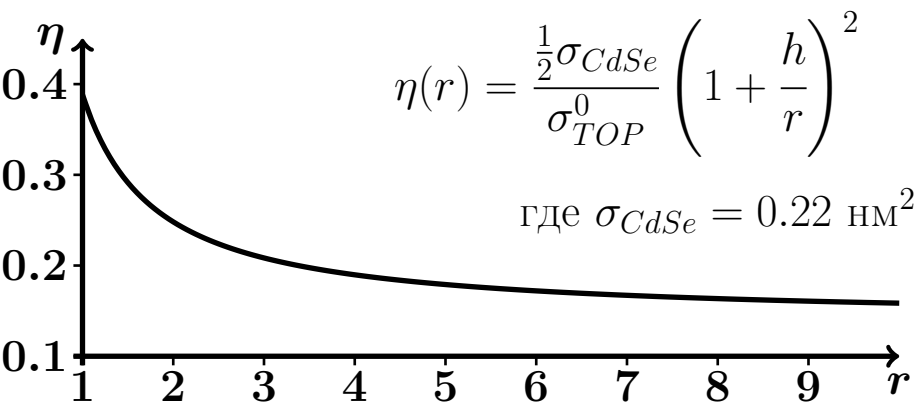
В системе 2 радиус CdSe равен 4.5 нм, в остальных — 1.9 нм. Под действием растворителя (хлороформ) лиганды вымываются из оболочки:

	ТОР	ТОРО	ODPA (форма)
1 ^[2]	75 → 38	75 → 67	—
2 ^[3]	303 → 126	303 → 299	—
3 ^[3]	53 → 24	53 → 49	30 → 21 (RPO ₃ H ₂)
4	53 → 27	53 → 51	30 → 30 (RPO ₃ Cd)
5	53 → 14	53 → 52	20 → 20 ((RPO ₃ H) ₂ Cd)
6	53 → 26	53 → 52	20 → 15 (H ₂ Z)
7	53 → 12	53 → 50	10 → 10 ((HZ) ₂ Cd)

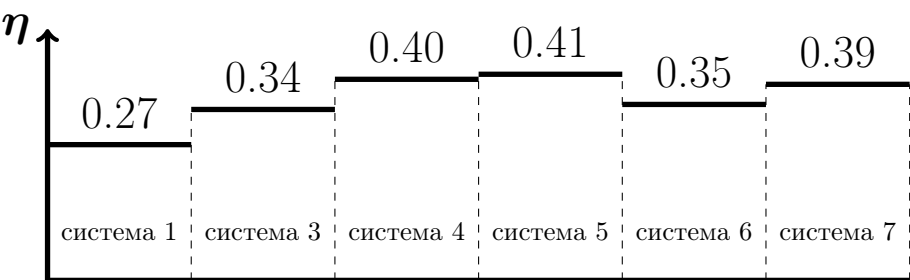
Из систем 1 и 2 следует зависимость площади сечения молекулы TOP (ТОРО) от радиуса CdSe:

$$\sigma_{TOP}(r) = \left(\frac{r}{r+h} \right)^2 \sigma_{TOP}^0,$$

где $h = 0.67$ нм, $\sigma_{TOP}^0 = 0.79$ нм².
Доля связанных с лигандами TOP/ТОРО атомов поверхности зависит от радиуса CdSe:



Доля защищённых атомов другими лигандами:



Литература

1. Пакет молекулярной динамики NAMD ks.uiuc.edu/Research/namd
2. Коллоидный журнал, 2016, 78(1), 68–74
3. Коллоидный журнал, 2016, 78(5), 596–601