

## КОМПЬЮТЕРНОЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕЛЕНА С ЧЕТВЕРТИЧНЫМИ АММОНИЕВЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ

А.В. Блинов, М.А. Пирогов, А.А. Гвозденко, А.Б. Голик, З.А. Рехман, М.А. Колодкин,  
Д.Д. Филиппов

ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»  
355017, Российская Федерация, Ставрополь, ул. Пушкина, 1  
blinov.a@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.357

**Аннотация:** В данной работе проведено компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия наночастиц селена с четвертичными аммониевыми соединениями, в рамках которого получены модели молекулярных комплексов, распределения электронной плотности, а также высшей заселённой и низшей свободной молекулярных орбиталей. У представленных молекулярных систем рассчитывалась полная энергия молекулярного комплекса  $E$ , разница энергии молекулы четвертичного аммониевого соединения и системы «четвертичное аммониевое соединение-наночастицы селена»  $\Delta E$ , энергия высшей заселённой молекулярной орбитали  $E_{HOMO}$ , энергия низшей свободной молекулярной орбитали  $E_{LUMO}$  и химическая жёсткость системы  $\eta$ . В результате анализа данных установлено, что взаимодействие наночастиц селена с четвертичными аммониевыми соединениями является энергетически выгодным ( $\Delta E > 11991$  ккал/моль). Оптимальной системой взаимодействия наночастиц селена с четвертичными аммониевыми соединениями является система «цетилтриметиламмония хлорид-наночастицы селена», что обусловлено наибольшим значением разницы энергии ( $\Delta E = 11991,79$  ккал/моль). Исходя из анализа полученных моделей молекулярных систем установлено, что при взаимодействии четвертичного аммониевого соединения с наночастицами селена происходит смещение электронной плотности и образование новых молекулярных орбиталей, что свидетельствует об образовании химического взаимодействия между молекулами. Далее была проведена ИК-спектроскопия наночастиц селена, стабилизированных цетилтриметиламмония хлоридом. На основе полученных данных установлено, что происходит падение интенсивности полос, в сравнении с ИК-спектром цетилтриметиламмония хлоридом, в областях от 2851 до 3026  $\text{см}^{-1}$  и от 1265 до 1377  $\text{см}^{-1}$ , характерных для групп  $\text{CH}_2$  и  $\text{CH}_3$ , что свидетельствует о присутствии молекул цетилтриметиламмония хлорида, ориентированных гидрофобной стороной к частицам селена, на их поверхности. После было проведено исследование морфологии частиц селена с помощью метода просвечивающей электронной микроскопии. В результате анализа ПЭМ-изображений подтверждено формирования слоя четвертичных аммониевых соединений на поверхности частиц селена диаметром от 25 до 60 нм.

**Ключевые слова:** наночастицы селена, четвертичные аммониевые соединения, квантово-химическое моделирование, цетилтриметиламмония хлорид, ИК-спектроскопия, просвечивающая электронная микроскопия.

### 1. Введение

В настоящее время на территории Российской Федерации наблюдается дефицит жизненно важных микроэлементов в организме,

таких как цинк, медь, марганец, йод и селен [1]. Селен является особенно важным эссенциальным микроэлементом, так как он входит в состав более 30 белков эукариотов, а также селеносодержащих аминокислот [2]. Недостаток селена в организме может приводить к различным заболеваниям, таким как болезнь Кешана и Кашина-Бека [3].

Перспективным направлением исследований является получение стабильных, биологически активных и малотоксичных соединений наночастиц селена. Это может быть достигнуто путём использования различных органических стабилизаторов [4, 5]. Так, в работе [6] наночастицы селена получают путём химического восстановления в водной среде в присутствии четвертичных аммониевых соединений (ЧАС) в качестве стабилизаторов, в результате чего получают частицы размером менее 20 нм.

Также для изучения процесса стабилизации различных наночастиц важным является проведение моделирования различного характера, которое позволяет расширить теоретическое познание о процессах, происходящих в коллоидных системах [7, 8]. Так, благодаря развитию отрасли компьютерного моделирования становится возможным изучать процессы коалесценции, формирования, а также стабилизации наночастиц [9-11]. Так, в работе [12] проводят квантово-химическое моделирование полимерной стабилизации наночастиц серебра, в рамках которого проводится изучение процесса взаимодействия молекул поливинилпирролидона с наночастицами серебра. В работе рассматривается взаимодействие атома серебра с мономерным звеном поливинилпирролидона через атомы азота и кислорода.

Таким образом, целью данной работы является проведение квантово-химического моделирования взаимодействия наночастиц селена с четвертичными аммониевыми соединениями для определения стабильной и энергетически выгодной конфигурации.

## **2. Экспериментальная часть**

Компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия наночастиц селена с ЧАС проводилось с помощью программного обеспечения QChem [14] с использованием молекулярного редактора IQmol [15] при следующих параметрах построения – расчет: Energy, метод: V3LYP, базис: 6-31G\*, convergence – 5, силовое поле – Gchemical. Расчет осуществлялся на оборудовании центра обработки данных (Schneider Electric). В рамках компьютерного квантово-химического моделирования рассматривались химическое взаимодействие между пятью атомами селена и ЧАС через углеводородные радикалы. В качестве ЧАС рассматривались следующие соединения: кокаמידопропил бетаин,

алкилдиметилбензиламмония хлорид, цетилтриметиламмония хлорид и дидецилдиметиламмония хлорид.

У полученных структур вычисляли полную энергию молекулярного комплекса  $E$ , разницу полной энергии молекулы ЧАС и системы «ЧАС-наночастицы селена»  $\Delta E$ , энергию высшей заселённой молекулярной орбитали  $E_{\text{HOMO}}$ , энергию низшей свободной молекулярной орбитали  $E_{\text{LUMO}}$  и химическую жёсткость системы  $\eta$ , рассчитываемую по формуле:

$$\eta = \frac{E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}}{2}. \quad (1)$$

Синтез наночастиц селена проводился методом химического восстановления в водной среде в присутствии ЧАС. В качестве селенсодержащего прекурсора использовали селенистую кислоту ( $\text{H}_2\text{SeO}_3$ ), в качестве восстановителя – аскорбиновую кислоту ( $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$ ). Синтез наночастиц селена проводился путём смешивания 0,036 М раствора селенистой кислоты с ЧАС и последующем добавлении по каплям 0,088 М раствора аскорбиновой кислоты. Полученный образец перемешивали в течение 5-10 минут.

Исследование функциональных групп в полученных образцах проводилось с помощью метода ИК-спектроскопии на спектрометре ФСА-1201 с преобразованием Фурье.

Исследование микроструктуры наночастиц селена проводилось на просвечивающем электронном микроскопе (ПЭМ) Carl Zeiss Libra 120M. Образцы наносили на медные сетки с углеродной подложкой с помощью ультразвукового диспергирования смеси образца с водой в соотношении 1:1.

### 3. Обсуждение результатов

Результаты компьютерного квантово-химического моделирования взаимодействия наночастиц селена с ЧАС представлены в Таблице 1.

В результате компьютерного квантово-химического моделирования установлено, что взаимодействие наночастиц селена с ЧАС является энергетически выгодным, что подтверждается значением разницы полной энергии молекулы ЧАС и молекулярной системы «ЧАС-наночастицы селена» ( $\Delta E > 11991$  ккал/моль).

Исходя из полученных квантово-химических расчётов определена оптимальная система взаимодействия наночастиц селена с ЧАС – «цетилтриметиламмония хлорид-наночастицы селена». Модель данной молекулярной системы представлена на рис. 1.

Молекулярная система «цетилтриметиламмония хлорид-наночастицы селена» обладает наибольшим значением разницы полной энергии ( $\Delta E = 11991,79$  ккал/моль) в сравнении с другими соединениями,

что свидетельствует о формировании энергетически выгодного взаимодействия наночастиц селена с ЧАС.

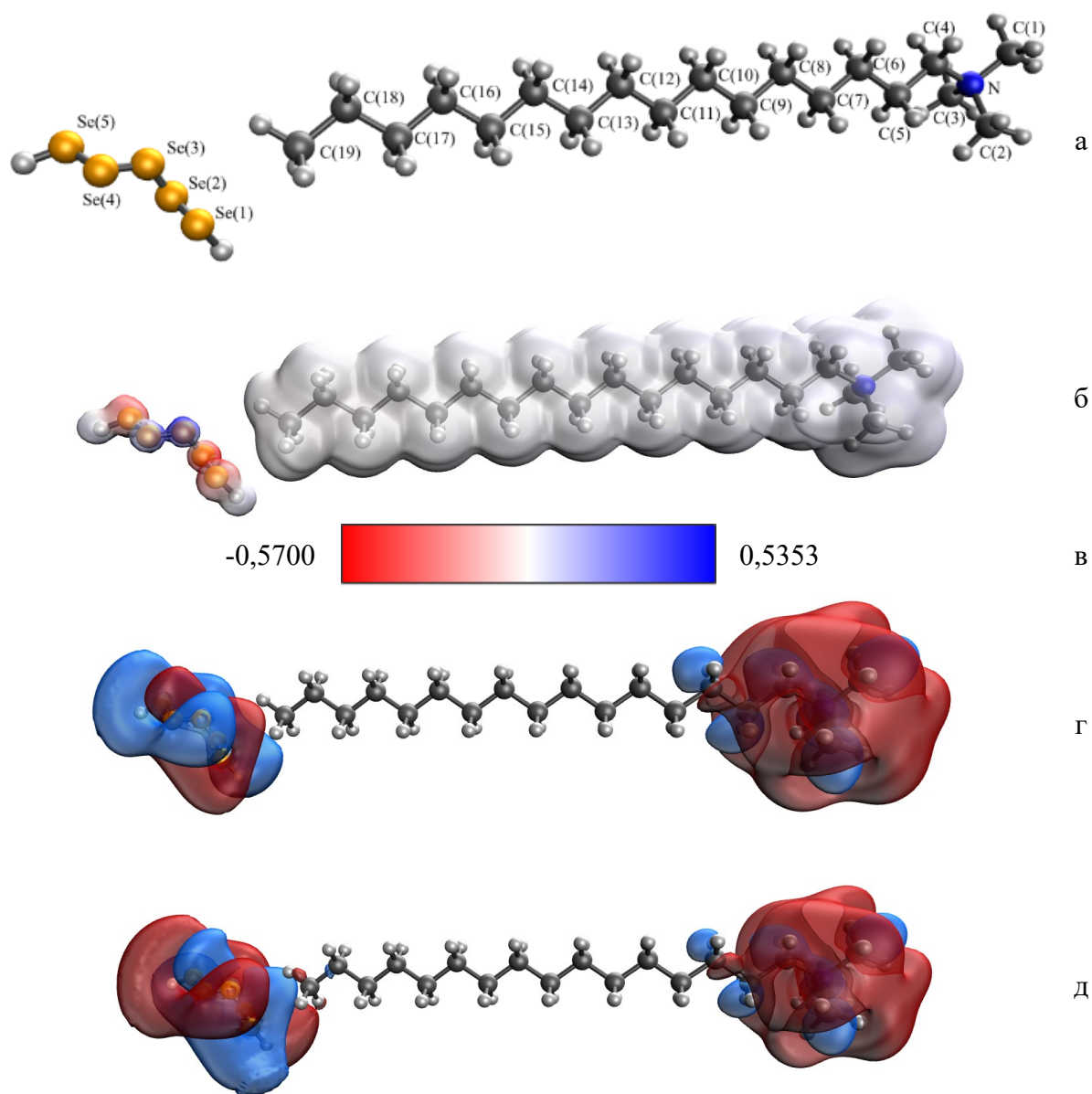


Рис. 1. Результаты компьютерного квантово-химического моделирования молекулярной системы «цетилтриметиламмония хлорид-наночастицы селена»: а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – градиент распределения электронной плотности; г – высшая заселённая молекулярная орбиталь; д – низшая свободная молекулярная орбиталь.

В результате анализа полученных моделей можно сделать вывод, что при взаимодействии с селеном наблюдается смещение положительного заряда от катиона азота в молекуле цетилтриметиламмония хлорида к центральному атому селена, а также образование общих молекулярных орбиталей между цетилтриметиламмония хлоридом и пятью атомами

селена, что свидетельствует об изменении структуры молекул и образовании химического взаимодействия между молекулой ЧАС и наночастицами селена [13].

Таблица 1. Результаты компьютерного квантово-химического моделирования взаимодействия наночастиц селена с ЧАС.

Молекулярная система	$E$ , ккал/моль	$\Delta E$ , ккал/моль	$E_{HOMO}$ , эВ	$E_{LUMO}$ , эВ	$\eta$ , эВ
Кокаמידопропил бетаин	-1082,54	–	-0,006	0,025	0,016
Кокаמידопропил бетаин- наночастицы селена	-13074,30	11991,756	-0,029	-0,025	0,001
Алкилдиметилбензиламмония хлорид	-878,73	–	-0,010	0,048	0,029
Алкилдиметилбензиламмония хлорид-наночастицы селена	-12870,48	11991,748	-0,032	-0,027	0,003
Цетилтриметиламмония хлорид	-803,90		0,022	0,084	0,031
Цетилтриметиламмония хлорид- наночастицы селена	-12795,69	11991,787	-0,005	-0,000	0,003
Дидецилдиметиламмония хлорид	-921,83	–	0,028	0,085	0,029
Дидецилдиметиламмония хлорид-наночастицы селена	-12913,53	11991,693	0,000	0,008	0,004

На рис. 2 представлен ИК-спектр наночастиц селена, стабилизированных цетилтриметиламмония хлоридом.

Анализ ИК-спектра цетилтриметиламмония хлорида показал наличие полос колебаний на 1377 и 1651  $\text{см}^{-1}$ , которые соответствуют симметричным колебаниям группы  $\text{CH}_2$ , а также полос на 2851, 2870, 2887, 2899, 2916, 2920 и 2924  $\text{см}^{-1}$ , характерных для группы  $\text{CH}_2$ . Также в диапазоне от 1265 до 1344  $\text{см}^{-1}$  наблюдаются полосы симметричных колебаний  $\text{CH}_3$  группы. Полосы колебаний на 2951, 2955, 2959, 3021 и 3028  $\text{см}^{-1}$  также характерны для группы  $\text{CH}_3$ . Кроме этого, на 1479 и 1494  $\text{см}^{-1}$  присутствуют полосы, характерные для связи  $\text{NH}^+$ .

Исходя из анализа ИК-спектра наночастиц селена, стабилизированных цетилтриметиламмония хлоридом, можно сделать вывод, что на 1377, 2851 и 2920  $\text{см}^{-1}$  также наблюдаются колебания, характерные для группы  $\text{CH}_2$ . Кроме этого, на 2951, 3026  $\text{см}^{-1}$  и в диапазоне от 1265 и 1344  $\text{см}^{-1}$  наблюдаются полосы, соответствующие колебаниям группы  $\text{CH}_3$ . На ИК-спектре также присутствуют колебания группы  $\text{CH}$  (3399 и 3483  $\text{см}^{-1}$ ) и связи  $\text{NH}^+$  (1479, 1493  $\text{см}^{-1}$ ). Также ИК-спектр наночастиц селена содержит колебания на 592 и 665  $\text{см}^{-1}$ , характерные для металлического селена, и колебания на 721  $\text{см}^{-1}$ , характерные для связи  $\text{Se}-\text{O}$ .

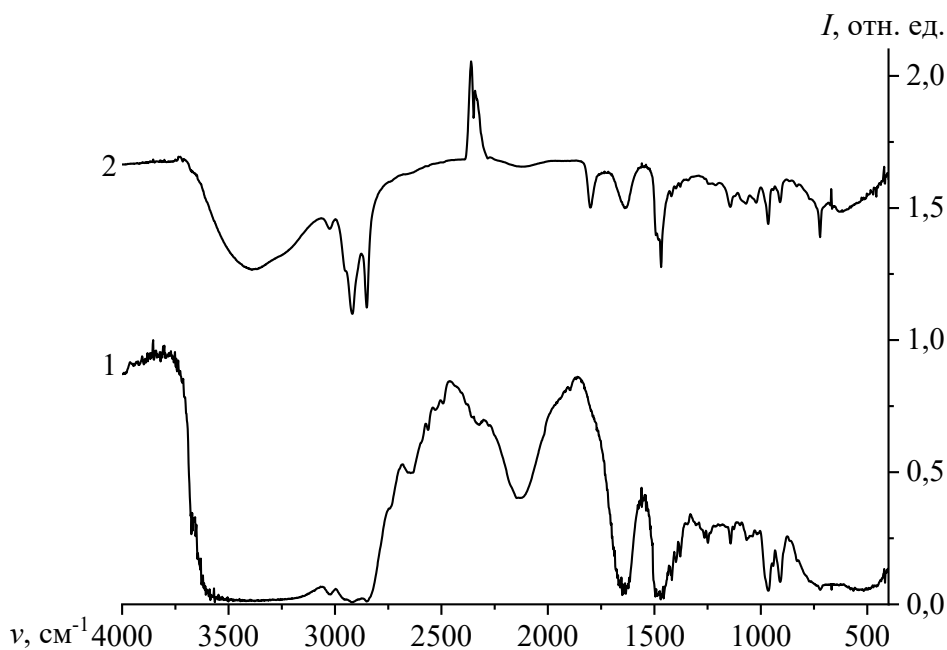


Рис. 2. ИК-спектры: 1 – цетилтриметиламмония хлорида; 2 – наночастиц селена, стабилизированных цетилтриметиламмония хлоридом.

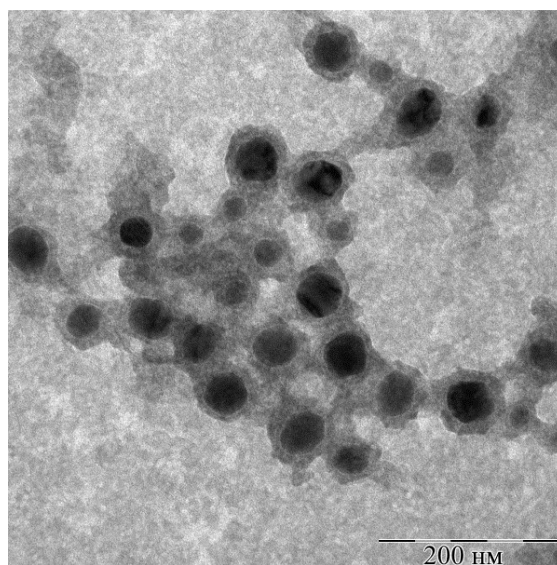


Рис. 3. ПЭМ-изображение наночастиц селена, стабилизированных цетилтриметиламмония хлоридом.

В результате анализа ИК спектров можно сделать вывод, что происходит падение интенсивности полос в областях от 2851 до 3026  $\text{cm}^{-1}$  и от 1265 до 1377  $\text{cm}^{-1}$ , характерных для групп  $\text{CH}_2$  и  $\text{CH}_3$ , что свидетельствует о том, что на поверхности частиц селена присутствует цетилтриметиламмония хлорид, ориентированный гидрофобной стороной к частицам селена, что согласуется с результатами компьютерного квантово-химического моделирования.

ПЭМ-изображение наночастиц селена, стабилизированных

цетилтриметиламмония хлоридом, представлено на рис. 3. Анализ ПЭМ-изображений показал, что частицы селена имеют сферическую форму и окружены тонким слоем стабилизатора – цетилтриметиламмония хлоридом, что подтверждает результаты исследования образцов наночастиц селена методом ИК-спектроскопии и компьютерного квантово-химического моделирования взаимодействия наночастиц селена с молекулой ЧАС. Также установлено, что на снимке присутствует частицы диаметром от 25 до 60 нм.

#### **4. Заключение**

В результате компьютерного квантово-химического моделирования изучен процесс взаимодействия селена с ЧАС. Получены модели молекулярных комплексов, распределения электронной плотности, высшей заселённой и низшей свободной молекулярных орбиталей, а также значения разницы полной энергии молекулярного комплекса и химической жёсткости. Установлено, что взаимодействие ЧАС с наночастицами селена является энергетически выгодным, а оптимальным взаимодействием является молекулярная система «цетилтриметиламмония хлорид-наночастицы селена».

Также получены и проанализированы ИК-спектры цетилтриметиламмония хлорида и наночастиц селена, стабилизированных им. В результате установлено, что молекулы ЧАС находятся на поверхности частиц селена, направленные гидрофобной стороной к частицам. На основе результатов ПЭМ подтверждено формирование слоя ЧАС на поверхности частиц селена, а также установлено, что стабилизация наночастиц селена цетилтриметиламмония хлоридом приводит к образованию сферических частиц диаметром до 60 нм, окружённым слоем ЧАС

В дальнейшем планируется разработка и оптимизация методики синтеза наночастиц селена с четвертичными аммониевыми соединениями, исследование агрегативной устойчивости и морфологии полученных образцов.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-16-00120, <https://rscf.ru/project/23-16-00120/>). Исследования проведены с использованием оборудования Центра коллективного пользования Северо-Кавказского федерального университета при финансовой поддержке Минобрнауки России, уникальный идентификатор проекта РФ—2296.61321X0029.*

#### **Библиографический список:**

1. **Ибрагимов, М.Я.** Взаимосвязь дисбаланса макро и микроэлементов и здоровье населения (обзор литературы) / М.Я. Ибрагимов, Л.Я. Сабирова, Е.С. Березкина и др. // Казанский медицинский журнал. – 2011. – Т. 92. – №. 4. – С. 606-609.

2. **Полубояринов, П.А.** Метаболизм и механизм токсичности селенсодержащих препаратов, используемых для коррекции дефицита микроэлемента селена / П.А. Полубояринов, Д.Г. Елистратов, В.И. Швец // Тонкие химические технологии. – 2019. – Т. 14. – №. 1. – С. 5-24. DOI: 10.32362/2410-6593-2019-14-1-5-24.
3. **Решетник, Л.А.** Селен и здоровье человека (обзор литературы) / Л.А. Решетник, Е.О. Парфенова // Экология моря. – 2000. – Т. 54. – С. 20-25.
4. **Копейкин, В.В.** Синтез наночастиц селена в водных растворах поливинилпирролидона и морфологические характеристики образующихся нанокомпозитов / В.В. Копейкин, С.В. Валуева, А.И. Киппер и др. // Высокомолекулярные соединения. Серия А. – 2003. – Т. 45. – №. 4. – С. 615-622.
5. **Апрятин, К.В.** Синтез биологически активной композиции хитозан-наночастицы селена / К.В. Апрятин, Е.И. Мурач, С.В. Амарантов и др. // Прикладная биохимия и микробиология. – 2022. – Т. 58. – №. 2. – С. 140-145. DOI: 10.31857/S0555109922020027.
6. **Блинов, А.В.** Оптимизация методики получения наночастиц селена, стабилизированных кокамидопропилбетаином / А.В. Блинов, Д.Г. Маглакелидзе, Е.А. Бражко и др. // Российский химический журнал. – 2022. – Т. 66. – №. 1. – С. 86-92. DOI: 10.6060/rcj.2022661.12.
7. **Невидимов, А.В.** О стабилизации коллоидных квантовых точек селенида кадмия в присутствии октадецилфосфоновой кислоты / А.В. Невидимов, В.Ф. Разумов // Коллоидный журнал. – 2018. – Т. 80. – №. 1. – С. 78-85. – DOI: 10.7868/S0023291218010081.
8. **Гафнер, Ю.Я.** Влияние атомов золота на строение наночастиц Cu-Au при моделировании процесса газофазного синтеза / Ю.Я. Гафнер, Д.А. Рыжкова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 399-407. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.399.
9. **Колосов, А.Ю.** Моделирование процесса коалесценции наночастиц золота методом Монте-Карло / А.Ю. Колосов, Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2012. – Вып. 4. – С. 129-142.
10. **Безносюк, С.А.** Компьютерное моделирование алгоритмической эволюции квантово-размерных наночастиц / С.А. Безносюк, С.В. Важенин, М.С. Жуковский и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2006. – Т. 3. – №. 4. – С. 7-14.
11. **Соловьев, М.Е.** Квантово-химическое моделирование формирования наночастиц из карбоксилатов меди / М.Е. Соловьев, В.И. Иржак // Коллоидный журнал. – 2015. – Т. 77. – №. 3. – С. 377-383. DOI: 10.7868/S0023291215030180.
12. **Блинов, А.В.** Компьютерное квантово-химическое моделирование полимерной стабилизации наночастиц серебра / А.В. Блинов, М.А. Ясная, А.А. Блинова и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 414-421. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.414.
13. **Цирельсон, В.Г.** Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твёрдые тела: учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон. – 5-е изд., электрон. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2021. – 522 с.
14. Q-Chem 6.1 User's Manual. – Режим доступа: <https://manual.q-chem.com/latest/>. – 02.06.2023.
15. IQmol Molecular Viewer. – Режим доступа: <http://www.iqmol.org/>. – 02.06.2023.

#### References:

1. Ibragimova M.Ya., Sabirova L.Ya., Berezkina E.S. et al. Vzaimosvyaz' disbalansa makro i mikroelementov i zdorov'e naseleniya (obzor literatury) [The relationship of the imbalance of macro-and microelements and the health of the population (review)], *Kazanskii meditsinskii zhurnal [Kazan medical journal]*, 2011, vol. 92, no. 4, pp. 606-609. (In Russian).
2. Poluboyarinov P.A., Elistratov D.G., Shvets V.I. Metabolizm i mekhanizm toksichnosti selenosoderzhashchikh preparatov, ispol'zuemykh dlya korrektsii defitsita mikroelementa selena [Metabolism and mechanism of toxicity of selenium-containing supplements used for optimizing human selenium status], *Tonkie Khimicheskie Tekhnologii [Fine Chemical Technologies]*, 2019, vol. 14, no. 1, pp. 5-24. DOI: 10.32362/2410-6593-2019-14-1-5-24.
3. Reshetnik L.A., Parfjonova E.O. *Selen i zdorov'e cheloveka (obzor literatury)* [Selenium and people's health (literary review)], *Ehkologiya morya [Ecology of the sea]*, 2000, vol. 54, pp. 20-25. (In Russian).
4. Kopeikin V.V., Valueva S.V., Kipper A.I., Borovikova L.N., Filippov A.P. Synthesis of selenium nanoparticles in aqueous solutions of poly(vinylpyrrolidone) and morphological characteristics of the related nanocomposites, *Polymer Science, Series A*, 2003, vol. 45, issue 4, pp. 374-379.
5. Apryatina K.V., Veselov V.S., Smirnova L.A. et al. Synthesis of a bioactive composition of chitosan-selenium nanoparticles, *Applied Biochemistry and Microbiology*, 2022, vol. 58, issue 2, pp. 126-131. DOI:



10.1134/S0003683822020028.

6. Blinov A.V., Maglakelidze D.G., Brazhko E.A. et al. Optimization of the technique for obtaining selenium nanoparticles stabilized with cocamidopropyl betaine, *Russian Journal of General Chemistry*, 2022, vol. 92, issue 12, pp. 2939-2943. DOI: 10.1134/s1070363222120489.

7. Nevidimov A.V., Razumov V.F. On stabilization of colloidal quantum dots of cadmium selenide in the presence of octadecylphosphonic acid, *Colloid Journal*, 2018, vol. 80, issue 1, pp. 73-80. DOI: 10.1134/S1061933X18010088.

8. Gafner Y.Ya., Ryzhkova D.A. Vliyanie atomov zolota na stroenie nanochastits Cu-Au pri modelirovanii protsessa gazofaznogo sinteza [Influence of gold atoms on the structure of Cu-Au nanoparticles at simulation of the process of gas-phase synthesis]. *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2022, issue 14, pp. 399-407. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.399.

9. Kolosov A.Yu., Sdobnyakov N.Yu., Komarov P.V. et al. Modelirovanie protsessa koalestsentsii nanochastits zolota metodom Monte-Karlo [Simulation of the coalescence process of gold nanoparticles by Monte-Carlo method], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2012, issue 4, pp. 129-142. (In Russian).

10. Beznosyuk S.A., Vazhenin S.V., Zhukovskii M.S. et al. *Komp'yuternoe modelirovanie algoritmicheskoy evolyutsii kvantovo-razmernykh nanochastits* [Computer modeling of algorithmic evolution of quantum-dimensional nanoparticles], *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya [Basic Problems of Material Science]*, 2006, vol. 3, no. 4, pp. 7-14. (In Russian).

11. Solov'ev M.E., Irzhak V.I. Quantum-chemical simulation of nanoparticle formation from copper carboxylates, *Colloid Journal*, 2015, vol. 77, issue 3, pp. 353-358. DOI: 10.1134/S1061933X15030187.

12. Blinov A.V., Yasnaya M.A., Blinova A.A. et al. Komp'yuternoe kvantovo-khimicheskoe modelirovanie polimernoj stabilizatsii nanochastits serebra [Computer quantum-chemical simulation of polymeric stabilization of silver nanoparticle], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2019, issue 11, pp. 414-421. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.414. (In Russian).

13. Tsirel'son V.G. *Kvantovaya khimiya. Molekuly, molekulyarnye sistemy i tvorydye tela: uchebnoe posobie dlya vuzov* [Quantum chemistry. Molecules, molecular systems and solids: study guide for universities], 2-nd ed. Moscow, BINOM. Laboratoriya znanij Publ., 2021 – 522 p. (In Russian).

14. Q-Chem 6.1 User's Manual. Available at: <https://manual.q-chem.com/latest/> (accessed 02.06.2023).

15. IQmol Molecular Viewer. Available at: [www.url: http://www.iqmol.org/](http://www.url: http://www.iqmol.org/) (accessed 02.06.2023).

*Original paper*

### COMPUTER QUANTUM-CHEMICAL MODELING OF THE INTERACTION OF SELENIUM NANOPARTICLES WITH QUATERNARY AMMONIUM COMPOUNDS

A.V. Blinov, M.A. Pirogov, A.A. Gvozdenko, A.B. Golik, Z.A. Rekhman, M.A. Kolodkin,  
D.D. Filippov

*North-Caucasian Federal University, Stavropol, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.357

**Abstract:** In this paper, a computer quantum-chemical simulation of the interaction of selenium nanoparticles with quaternary ammonium compounds was carried out, in which models of molecular complexes, electron density distribution, as well as higher populated and lower free molecular orbitals were obtained. For the presented molecular systems, the total energy of the molecular complex  $E$ , the difference in the energy of the quaternary ammonium compound molecule and the system «quaternary ammonium compound-selenium nanoparticles»  $\Delta E$ , the energy of the highest occupied molecular orbital  $E_{HOMO}$ , the energy of the lowest unoccupied molecular orbital  $E_{LUMO}$ , and the chemical rigidity of the system  $\eta$  were calculated. As a result of data analysis, it was found that the interaction of selenium nanoparticles with quaternary ammonium compounds is energetically advantageous ( $\Delta E > 11991$  kcal/mol). The optimal system of interaction of selenium nanoparticles with quaternary ammonium compounds is the «cetyltrimethylammonium chloride-selenium nanoparticles» system, which is due to the highest value of the energy difference ( $\Delta E = 11991,79$  kcal/mol). Based on the analysis of the obtained models of molecular systems, it was found that when a quaternary ammonium compound interacts with selenium nanoparticles, the electron density is shifted and new molecular orbitals are formed, which indicate formation of a chemical interaction between the molecules. Next,

IR spectroscopy of selenium nanoparticles stabilized with cetyltrimethylammonium chloride was performed. Based on the data obtained, it is found that there is a decrease in the intensity of the bands, in comparison with the IR spectrum of cetyltrimethylammonium chloride, in the regions from 2851 to 3026  $\text{cm}^{-1}$  and from 1265 to 1377  $\text{cm}^{-1}$ , characteristic of the  $\text{CH}_2$  and  $\text{CH}_3$  groups, which indicates the presence of cetyltrimethylammonium chloride molecules oriented with the hydrophobic side to selenium particles on their surface. After that, the morphology of selenium particles was studied using the transmission electron microscopy method. As a result of the analysis of transmission electron microscopy images, the formation the layer of the quaternary ammonium compound on the surface of selenium particles with a diameter of 25 to 60 nm was confirmed.

*Keywords: selenium nanoparticles, quaternary ammonium compounds, quantum chemical modeling, cetyltrimethylammonium chloride, IR spectroscopy, transmission electron microscopy.*

*Блинов Андрей Владимирович – к.т.н., и.о. заведующего кафедрой физики и технологии наноструктур и материалов ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»*

*Пирогов Максим Александрович – студент 4 курса кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»*

*Гвозденко Алексей Алексеевич – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»*

*Голик Алексей Борисович – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»*

*Рехман Зафар Абдулович – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»*

*Колодкин Максим Андреевич – заведующий учебно-лабораторным комплексом кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»*

*Филиппов Дионис Демокритович – студент 3 курса кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»*

*Andrey V. Blinov – Ph. D., acting head of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University*

*Maxim A. Pirogov – 4<sup>th</sup> year student of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University*

*Alexey A. Gvozdenko – assistant of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University*

*Alexey B. Golik – assistant of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University*

*Zafar A. Rekhman – Assistant, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University*

*Maxim A. Kolodkin – Head of the Educational and Laboratory Complex, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials of the Faculty of Physics and Technology of the North Caucasus Federal University*

*Dionis D. Filippov – 3<sup>rd</sup> year student, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University*

Поступила в редакцию/received: 22.07.2023; после рецензирования/ revised: 27.08.2023; принята/accepted: 29.08.2023.