Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Факультет цифровых технологий и химического инжиниринга

Кафедра информационных компьютерных технологий

**ОТЧЕТ ПО ПРАКТИЧЕСКОЙ РАБОТЕ № 8**

**ПО КУРСУ**

**«ЦИФРОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ»:**

**«Оптимизация геометрии молекулы в Orca»**

Ведущий преподаватель

Ст. преподаватель Скичко Е.А.

**СТУДЕНТ группы КС-20** Мелехин А.А.

**Москва**

**2024**

# **Задание**

Выполнить оптимизацию (начальные приближения для геометрии следует взять из cccbdb NIST), рассчитать частоты колебаний для 298.15 K (доказав тем самым через отсутствие отрицательных частот устойчивость молекулы) найти полную энергию и энергию Гиббса в Eh для молекулы с настройками:

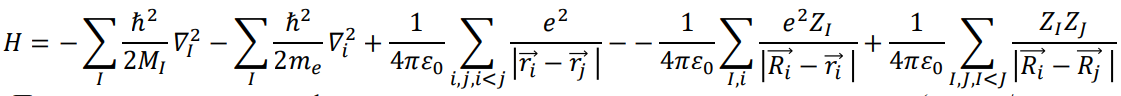
2-гидроксипиридин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ

**Теоретическое обоснование решения**

**Квантовая механика** — это раздел физики, который изучает поведение и взаимодействие частиц на уровне атомов и субатомных частиц. Она описывает природу на мельчайших масштабах, где классические законы физики, такие как законы Ньютона, перестают быть применимыми.

**Стационарное уравнение Шредингера:**

R – координаты ядер, r – координаты электронов, E – полная энергия квантовомеханической системы, H – гамильтониан (оператор, включающий потенциальную и кинетическую энергию системы), - функция, которая определяет все свойства квантовомеханической системы.



Первые два слагаемых в формуле описывают кинетическую энергию частиц (атомов/ионов массой и электронов массой , соответственно), третье слагаемое – электрон-электронное взаимодействие, четвертое слагаемое – электрон-ионное взаимодействие, пятое слагаемое – ион-ионное взаимодействие, *e* – заряд электрона, – заряд иона, – электрическая постоянная.

**Электронная плотность** ρ(r) – функция трех пространственных координат.

Где *r* означают пространственные координаты электронов, а s – спиновые координаты электронов. Из-за антисимметричности волновой функции не важно, координата какого именно электрона используется в определении.

**Теоремы Хоэнберга-Кона**

**1** Существует внешний потенциал с точностью до постоянной, который является уникальным функционалом электронной плотности, и определяет гамильтониан системы H. Отсюда следует, что основное энергетические состояние многочастичной системы есть функционал электронной плотности. → электронная плотность *ρ(r)* определяет все свойства системы.

**2** Энергия подсистемы электронов, сформулированная в виде функционала электронной плотности, имеет минимум, равный энергии основного состояния.

BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ

BLYP - XC-функционал

D3BJ - Учет слабых взаимодействий

DEF2-TZVP - Основной базисный набор TZ качества. Дополнительный набор def2/J добавится автоматически. Раздельно-валентный triple-zeta. Высокий уровень учета поляризации 6-311G(3df,pd).

**Файл hydro2.inp (**[**ссылка на папку**](https://disk.yandex.ru/d/OzYcC5XCSSuArA)**)**

!BLYP D3BJ def2-TZVP Opt NumFreq xyzfile

%Freq

Temp 298.15

end

%pal

nprocs 6

end

\*xyzfile 0 1 hydro2.xyz

**Результаты расчетов (файл hydro2.out)**

-----------------------

VIBRATIONAL FREQUENCIES

-----------------------

Scaling factor for frequencies = 1.000000000 (already applied!)

0: 0.00 cm\*\*-1

1: 0.00 cm\*\*-1

2: 0.00 cm\*\*-1

3: 0.00 cm\*\*-1

4: 0.00 cm\*\*-1

5: 0.00 cm\*\*-1

6: 161.73 cm\*\*-1

7: 379.43 cm\*\*-1

8: 443.66 cm\*\*-1

9: 471.24 cm\*\*-1

10: 533.57 cm\*\*-1

11: 600.82 cm\*\*-1

12: 683.76 cm\*\*-1

13: 711.89 cm\*\*-1

14: 739.40 cm\*\*-1

15: 784.71 cm\*\*-1

16: 827.22 cm\*\*-1

17: 897.31 cm\*\*-1

18: 965.38 cm\*\*-1

19: 976.08 cm\*\*-1

20: 993.27 cm\*\*-1

21: 1078.36 cm\*\*-1

22: 1126.24 cm\*\*-1

23: 1186.30 cm\*\*-1

24: 1201.36 cm\*\*-1

25: 1351.15 cm\*\*-1

26: 1410.19 cm\*\*-1

27: 1447.52 cm\*\*-1

28: 1522.80 cm\*\*-1

29: 1599.07 cm\*\*-1

30: 1676.98 cm\*\*-1

31: 3092.88 cm\*\*-1

32: 3123.51 cm\*\*-1

33: 3136.14 cm\*\*-1

34: 3151.78 cm\*\*-1

35: 3475.32 cm\*\*-1

-------------------

GIBBS FREE ENERGY

-------------------

The Gibbs free energy is G = H - T\*S

Total enthalpy ... -323.47467466 Eh

Total entropy correction ... -0.03542244 Eh -22.23 kcal/mol

-----------------------------------------------------------------------

Final Gibbs free energy ... **-323.51009710** Eh

For completeness - the Gibbs free energy minus the electronic energy

G-E(el) ... 0.06150831 Eh 38.60 kcal/mol

----------------

TOTAL SCF ENERGY

----------------

Total Energy : **-323.54235869** Eh -8804.03517 eV

Components:

Nuclear Repulsion : 275.10882642 Eh 7486.09175 eV

Electronic Energy : -598.65118511 Eh -16290.12692 eV

One Electron Energy: -983.01299705 Eh -26749.14355 eV

Two Electron Energy: 384.36181194 Eh 10459.01663 eV

Virial components:

Potential Energy : -646.09022890 Eh -17581.00893 eV

Kinetic Energy : 322.54787021 Eh 8776.97376 eV

Virial Ratio : 2.00308323

DFT components:

N(Alpha) : 25.000011041277 electrons

N(Beta) : 25.000011041277 electrons

N(Total) : 50.000022082554 electrons

E(X) : -42.758375240578 Eh

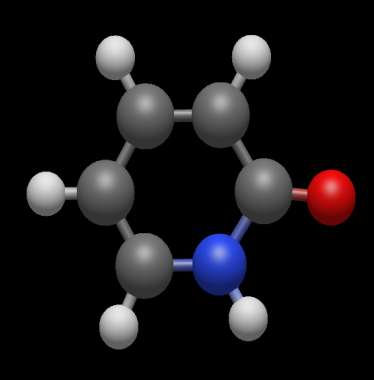
E(C) : -1.716144136818 Eh

E(XC) : -44.474519377397 Eh

DFET-embed. en. : 0.000000000000 Eh

**Вывод:** анализируя данные, полученные в файле *hydro2.out*, можно сделать вывод о том, что геометрия молекулы подобрана *оптимально*, так как все частоты положительные. Полная энергия: **-323.54235869** **Eh**. Энергия Гиббса: **-323.51009710** **Eh**.

**Исходная молекула**



**Оптимизированная молекула**

