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-26** Лупинос А. В.

**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:

Вариант 77: циклопентанон, BLYP/DEF2-SVP, RIJCOSX, GridX5, D3BJ, вода

**Теоретическое обоснование решения**

**Квантовая механика**  это основная физическая теория, описывающая движение и взаимодействие микроскопических частиц, таких как молекулы, атомы и их составляющие. Теория была разработана в начале 20-го века учёными, включая Макса Планка, Альберта Эйнштейна, Нильса Бора, и других.

Основной принцип квантовой механики – это корпускулярно-волновой дуализм, который говорит, что частицы ведут себя одновременно как частицы и как волны. Это особенно заметно у очень маленьких объектов, таких как электроны. В результате квантовая механика отказывается от некоторых классических представлений, например, о четких траекториях движения частиц. Вместо этого используется концепция волновой функции, которая описывает вероятность нахождения частицы в определенном месте и в определённое время.

Главным математическим инструментом квантовой механики является **уравнение Шрёдингера**, которое описывает, как волновая функция частицы меняется во времени. Наиболее общая форма уравнения Шрёдингера — это форма, включающая зависимость от времени:

,

где гамильтониан (оператор, включающий потенциальную и кинетическую энергию системы), волновая функция, пространственные координаты частицы или системы частиц, мнимая единица, приведенная постоянная Планка (, где постоянная Планка), оператор частной производной по времени.

Для стационарных состояний, когда волновая функция не зависит от времени, уравнение Шрёдингера принимает вид:

,

где полная энергия квантовомеханической системы.

Электронная плотность () это вероятность найти электрон в определенном объеме пространства. Определяет все свойства системы.

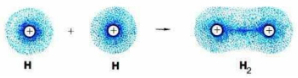
,

то есть, вероятность нахождения электрона в бесконечно малом объеме 𝑑𝑟 около точки 𝑟 равна 𝑁.

,

где пространственные координаты электронов, а спиновые координаты[[1]](#footnote-0) электронов.

Из-за антисимметричности волновой функции не важно, координата какого именно электрона () используется в определении.



**Теоремы Хоэнберга-Кона** представляют собой важные результаты квантовой механики, связанные с электронной структурой атомов и молекул. Вот две основные теоремы:

1. Существует внешний потенциал[[2]](#footnote-1) с точностью до постоянной, который является уникальным функционалом[[3]](#footnote-2) электронной плотности, и определяет гамильтониан системы . Отсюда следует, что основное энергетическое состояние многочастичной системы[[4]](#footnote-3) есть функционал электронной плотности.
2. Энергия подсистемы электронов[[5]](#footnote-4), сформулированная в виде функционала электронной плотности, имеет минимум, равный энергии основного состояния.

Базисные наборы и методы в ORCA:

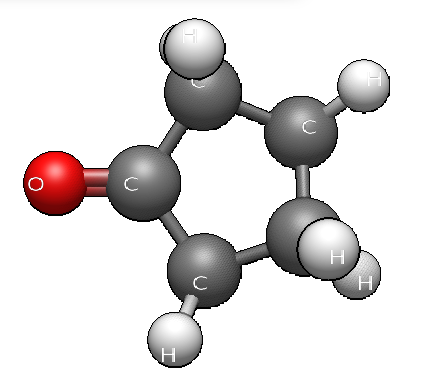
* **BLYP.** Это обменно-корреляционный[[6]](#footnote-5) функционал, который часто используется в квантово-химических расчетах. BLYP обозначает функционал Беккера, Ли и Янга, который комбинирует параметры обмена и корреляции, основанные на плотности.
* **DEF2-SVP.** Это набор математических функций, которые используются для представления электронной структуры молекулы. К DEF2-SVP автоматически добавляется еще один набор математических функций, чтобы улучшить точность расчетов.
* **D3BJ.** Этот метод позволяет учесть слабые силы взаимодействия между атомами или молекулами. D3BJ помогает учесть такие силы, которые не всегда учитываются в стандартных расчетах, но которые могут быть важны для понимания химических свойств молекул.
* **Opt.** Запуск оптимизации геометрии молекулы, чтобы найти ее наиболее стабильную конфигурацию.
* **NumFreq.** Расчет количественных значений частот колебаний молекулы (волновых чисел).
* **xyzfile.** Формат файла, содержащего информацию о геометрии молекулы в пространственных координатах.

Конфигурационные параметры:

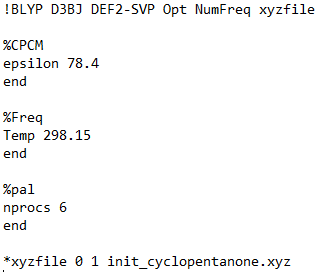
* **CPCM.** Континуальная поляризуемость раствора (Continuum Polarizable Continuum Model). Это модель, используемая в расчетах квантовой химии для учета взаимодействия молекулы с растворителем. Метод CPCM моделирует растворитель как непрерывную среду[[7]](#footnote-6) с определенной диэлектрической проницаемостью[[8]](#footnote-7).
* **Freq.** Указывает на запуск расчета частоты колебаний молекулы.
* **pal.** Параметры параллелизации. Используется для определения параметров параллелизации в программе для квантово-химических расчетов. Это включает в себя указание количества процессоров (nprocs), которые будут использованы для ускорения расчетов.
* **0 1:** Заряд и спиновое состояние молекулы. В данном случае, "0" указывает на отсутствие заряда (нейтральная молекула), а "1" указывает на один неспаренный электрон (неспаренный спин).

**Ход работы**

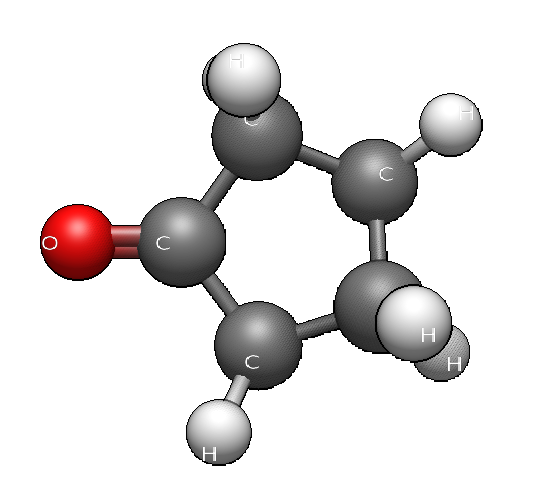
Исходная геометрия init\_cyclopentanone.xyz:



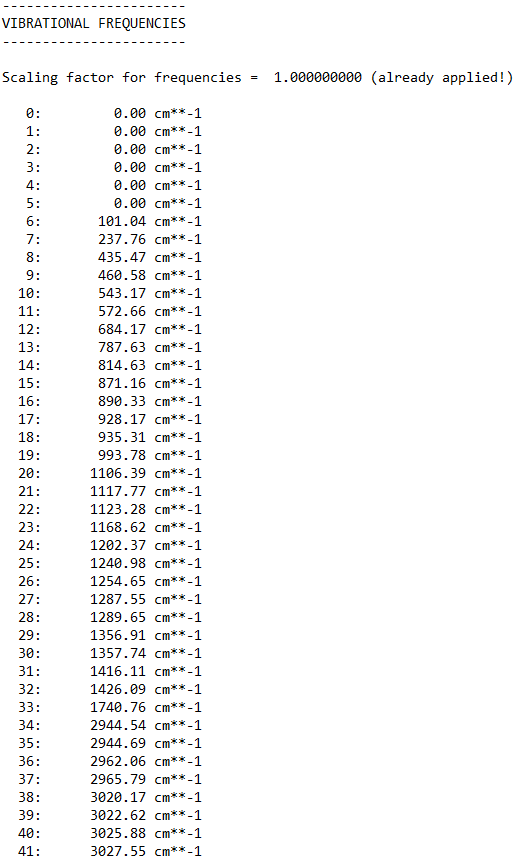
input-файл для оптимизации геометрии cyclopentanone.inp:



В результате создается файлы cyclopentanone.out и cyclopentanone.xyz:

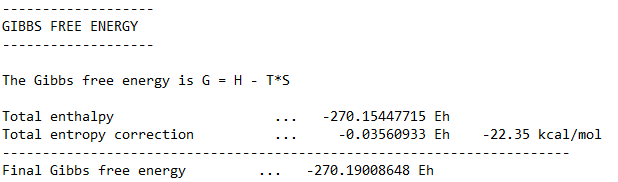


В cyclopentanone.out необходимо посмотреть вибрационные частоты (Vibrational frequencies), чтобы удостовериться, что была найдена оптимальная геометрия молекулы. Если все частоты положительные - геометрия оптимальна, если есть отрицательные - не оптимальна:



**Выводы**

Найденная с помощью ORCA геометрия молекулы является оптимальной, так как нет отрицательных вибрационных частот. Энергия Гиббса равна -270,19008648 Eh (Энергия Хартри)



1. Спиновые координаты - это числа, которые описывают ориентацию и размер внутреннего момента импульса частицы. [↑](#footnote-ref-0)
2. Внешний потенциал - это потенциальная энергия, создаваемая внешними источниками, которые действуют на систему. Внешний потенциал играет важную роль в определении динамики системы и может оказывать существенное влияние на поведение частиц внутри нее. Например, в случае атома внешний потенциал определяет энергетические уровни электронов и их возможные переходы между этими уровнями. [↑](#footnote-ref-1)
3. Функционал - это отображение из пространства функций в множество действительных чисел. Иными словами, функционал принимает функцию в качестве аргумента и возвращает число. [↑](#footnote-ref-2)
4. Основное энергетическое состояние многочастичной системы - это состояние системы, в котором энергия наименьшая среди всех возможных состояний. Оно определяет основные свойства системы, такие как ее структура, стабильность и способность к реакциям. [↑](#footnote-ref-3)
5. Энергия подсистемы - это энергия, которая связана с определенной частью или подмножеством системы, взятой в изоляции от остальной системы. [↑](#footnote-ref-4)
6. Обменно-корреляционное взаимодействие в квантовой механике описывает способы, которыми электроны в молекуле взаимодействуют друг с другом. Обменное взаимодействие отражает обмен пространственными координатами электронов, в то время как корреляционное учитывает их взаимное влияние на энергию системы помимо обмена. [↑](#footnote-ref-5)
7. Непрерывная среда - среда, в которой молекулы раствора распределены равномерно. [↑](#footnote-ref-6)
8. Диэлектрическая проницаемость - это мера способности среды или материала пропускать электрическое поле. Она влияет на взаимодействие между молекулами в растворе. [↑](#footnote-ref-7)