



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный технологический университет
«СТАНКИН» (ФГБОУ ВО «МГТУ «СТАНКИН»)

**Институт
информационных
технологий**

**Кафедра
информационных систем**

09.04.01 «Информатика и вычислительная техника»

Лабораторная работа №3.

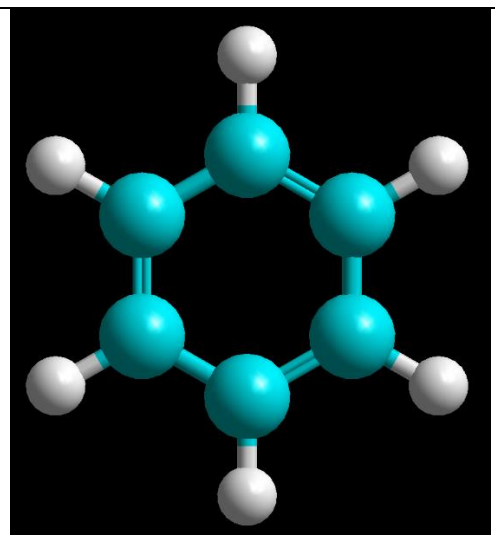
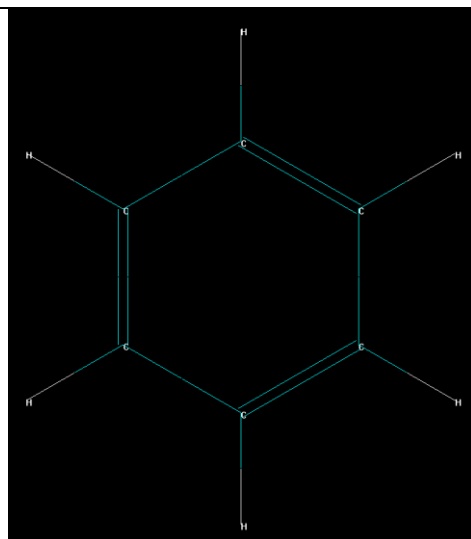
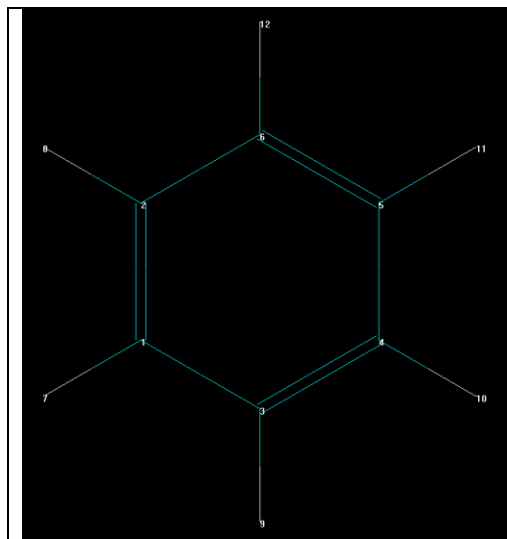
Выполнил

Студент группы ИДМ-24-07

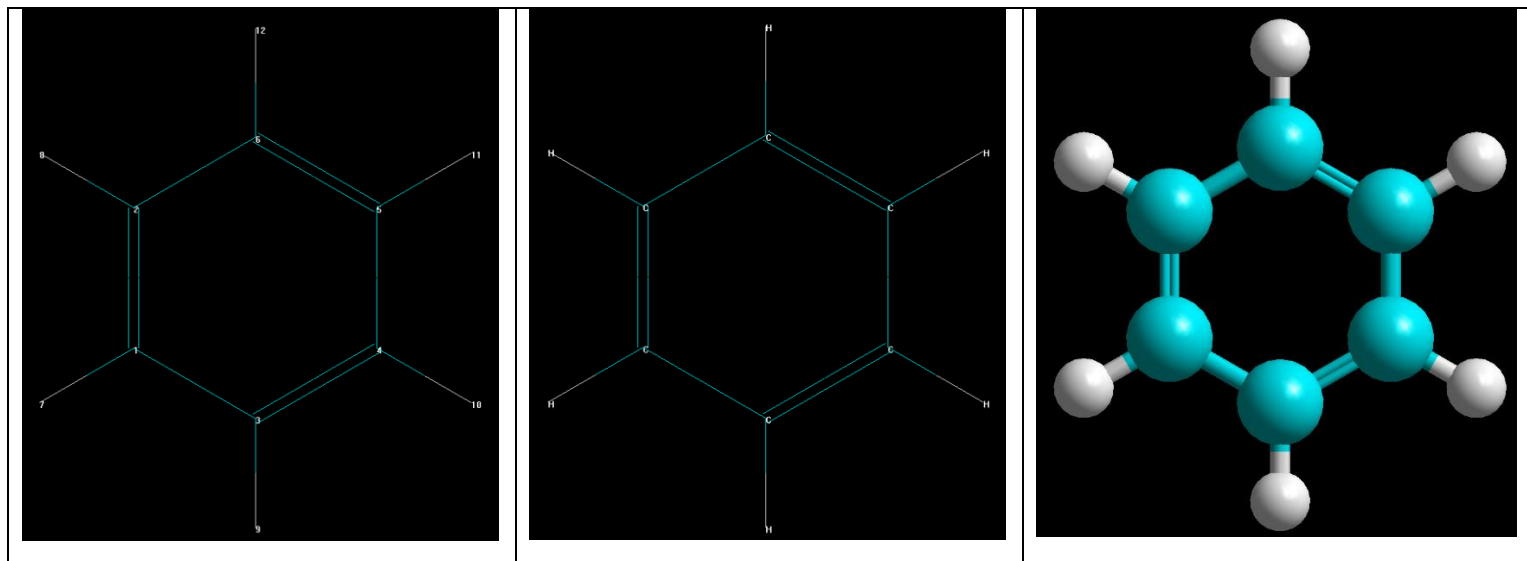
Туркин Александр

Москва, 2023

MM+



MNDO

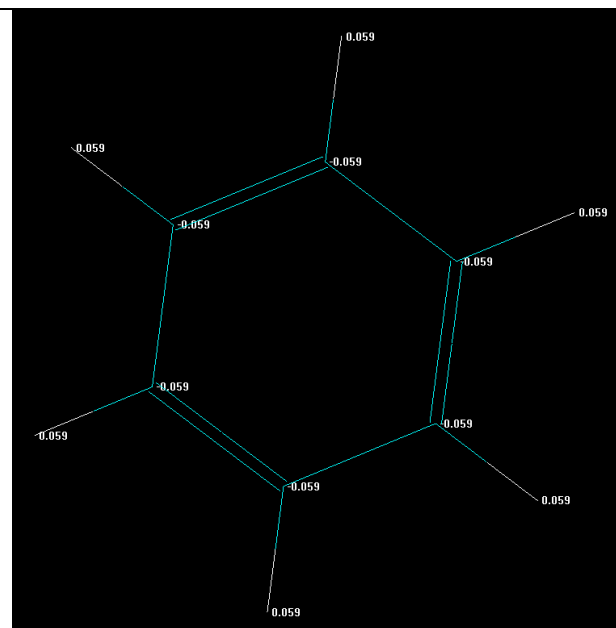


Расчет дипольного момента и оценка растворимости

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-0.000	0.000	0.000	0.000
sp Hybrid	0.000	0.000	-0.000	0.000
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	0.000	0.000	-0.000	0.000

Из-за отсутствия дипольного момента и неполярной природы бензола, он хорошо растворим в неполярных растворителях и плохо растворим в полярных растворителях, таких как вода.

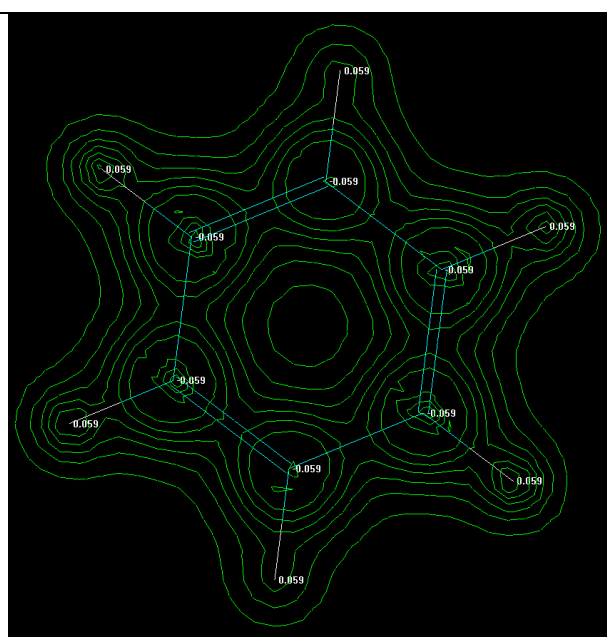
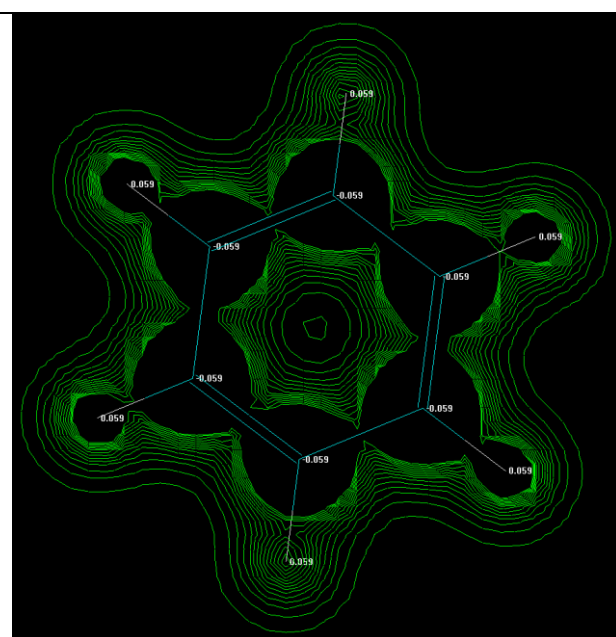
Расчет электронной структуры и спектров молекулы



Определение положения
реакционных центров

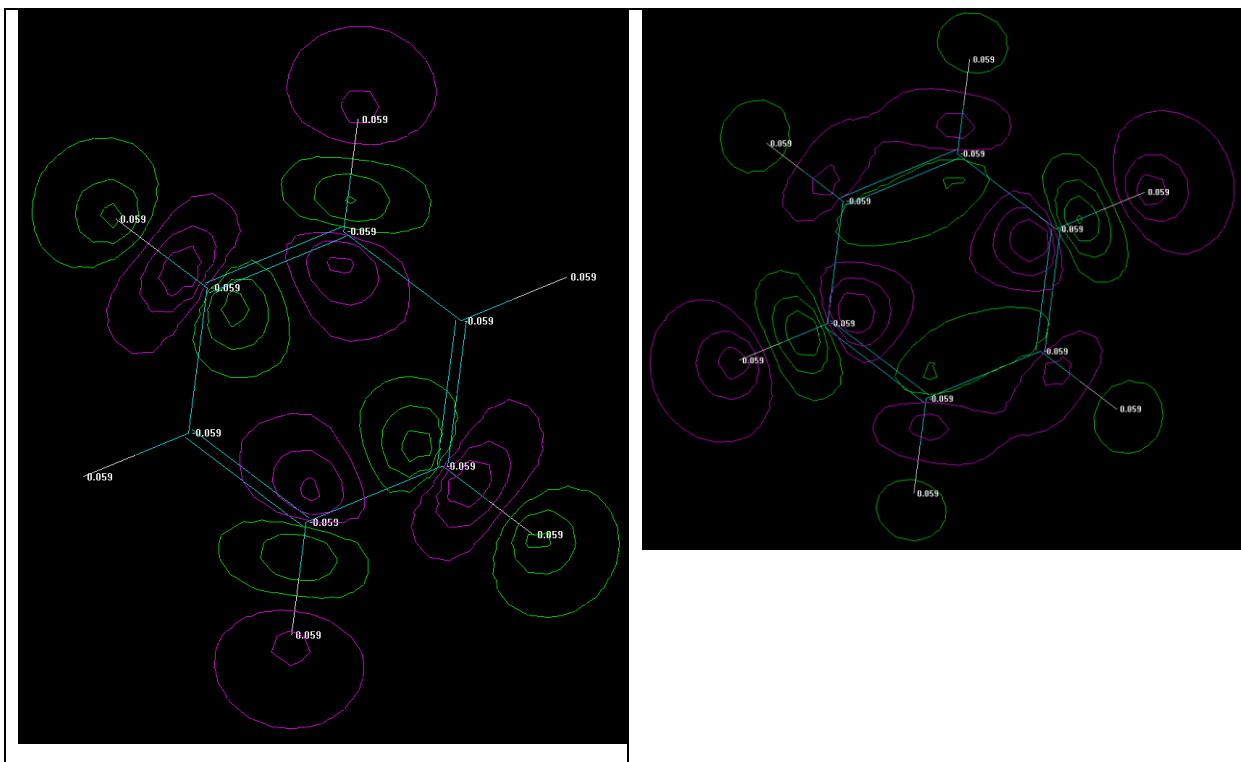
Распределение зарядов
такого, что на каждом атоме
углерода заряд -0.059, а на каждом
атоме водорода 0.059.

Вывод: атомы Н – наиболее
вероятные центры электрофильной
атаки.



Энергия ВЗМО – 4.945 эВ

Энергия НВМО - 4.945 эВ



Разложение ВЗМО и НВМО по атомным орбиталям

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS									
AO:	1 S C	1 Px C	1 Py C	1 Pz C	2 S C				
	1.210479	0.929982	0.918852	0.999999	1.210478				
AO:	2 Px C	2 Py C	2 Pz C	3 S C	3 Px C				
	0.929981	0.918851	1.000002	1.210478	0.913287				
AO:	3 Py C	3 Pz C	4 S C	4 Px C	4 Py C				
	0.935545	1.000001	1.210481	0.929981	0.918853				
AO:	4 Pz C	5 S C	5 Px C	5 Py C	5 Pz C				
	0.999998	1.210477	0.929981	0.918853	1.000002				
AO:	6 S C	6 Px C	6 Py C	6 Pz C	7 S H				
	1.210482	0.913289	0.935545	0.999998	0.940691				
AO:	8 S H	9 S H	10 S H	11 S H	12 S H				
	0.940686	0.940685	0.940689	0.940687	0.940689				

Определение нуклеофильных и электрофильных свойств молекулы

Энергия НВМО положительна, следовательно бензол – нуклеофил.

Определение жесткости и мягкости молекулы

Молекула бензола – нуклеофил, т.ч. работаем с ВЗМО. ВЗМО молекулы отделена от соседней МО (№25 4.895 эВ) на 0.05 эВ. Следовательно, считается жестким реагентом.

Жесткость молекулы = 0 эВ

Расчет вибрационного спектра и определение характеристик наиболее интенсивных мод колебаний

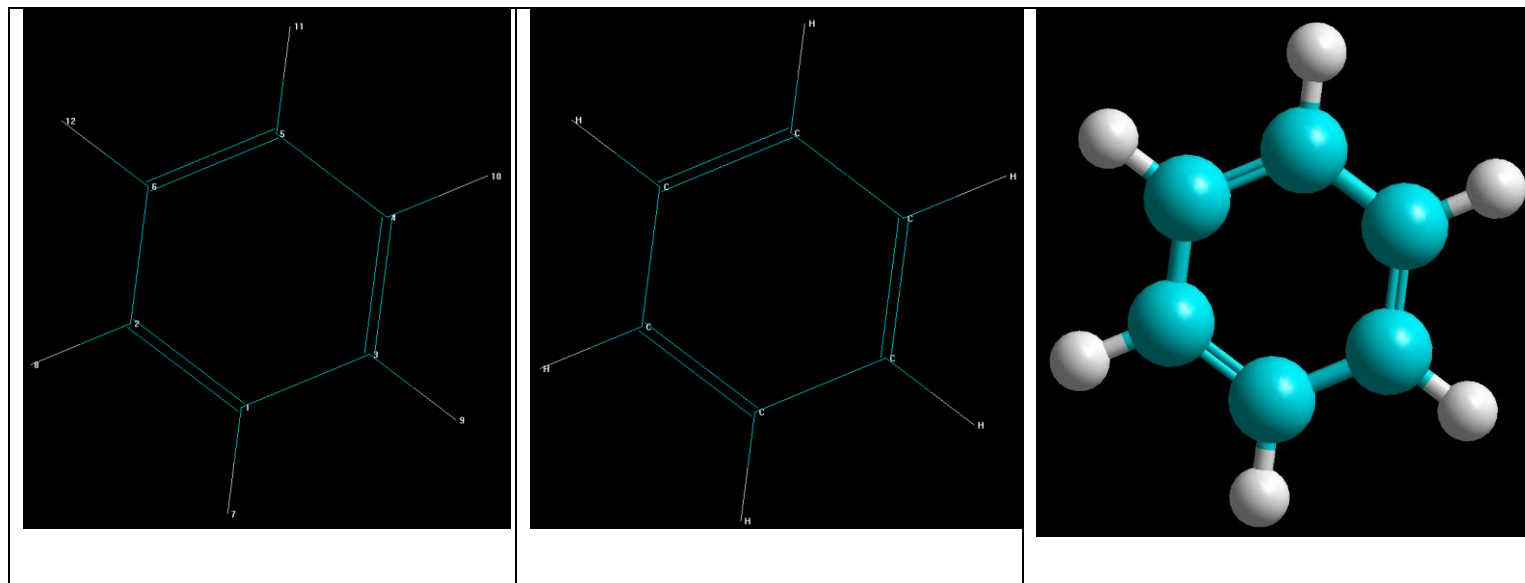
Было проведено вибрационное моделирование для бензола.

Энергетические характеристики молекулы

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-19637.3630459 (kcal/mol)
Total Energy	=	-31.294126116 (a.u.)
Binding Energy	=	-1316.7360839 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy	=	-18320.6269620 (kcal/mol)
Electronic Energy	=	-74997.7871156 (kcal/mol)
Core-Core Interaction	=	55360.4240697 (kcal/mol)
Heat of Formation	=	21.2159161 (kcal/mol)
Gradient	=	0.0380764 (kcal/mol/Ang)

AB-INITIO



Расчет дипольного момента и оценка растворимости

Dipole Moment (Debye):

X: 0.0000 Y: -0.0000 Z: -0.0000 Ttl: 0.0000

Из-за отсутствия дипольного момента и неполярной природы бензола, он хорошо растворим в неполярных растворителях и плохо растворим в полярных растворителях, таких как вода.

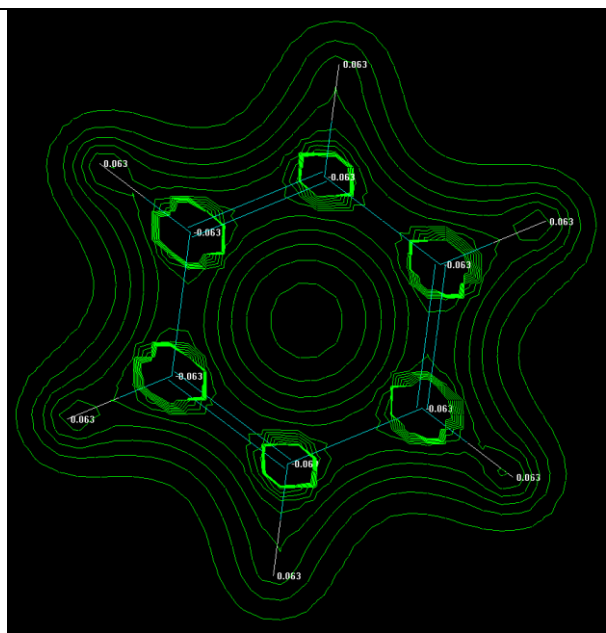
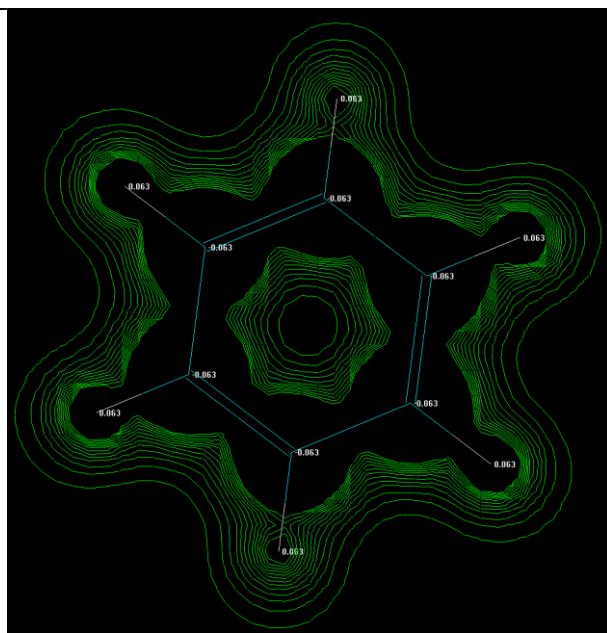
Расчет электронной структуры и спектров молекулы



Определение положения
реакционных центров

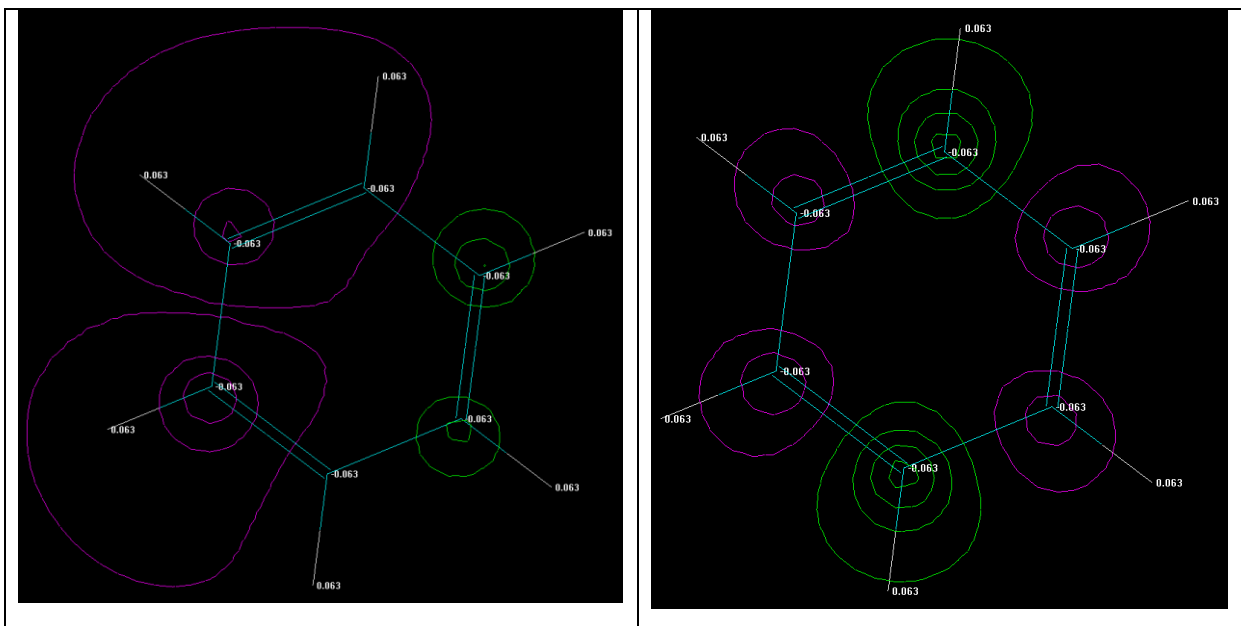
Распределение зарядов
такого, что на каждом атоме
углерода заряд -0.063, а на каждом
атоме водорода 0.063.

Вывод: атомы Н – наиболее
вероятные центры электрофильной
атаки.



Энергия ВЗМО – 7.3686 эВ

Энергия НВМО - 13.8544 эВ



Разложение ВЗМО и НВМО по атомным орбиталям

Mol. Orbital	23	24
Symmetry:	1 E2U	1 B1G
Eigenvalue	0.27079	0.50914
S C 1	0.00000	0.00000
S C 2	0.00000	0.00000
Px C 1	0.00000	0.00000
Py C 1	0.00000	0.00000
Pz C 1	0.09287	0.52439
S C 3	0.00000	0.00000
S C 4	0.00000	0.00000
Px C 4	0.00000	0.00000
Py C 4	0.00000	0.00000
Pz C 4	-0.61207	0.52442
S C 5	0.00000	0.00000
S C 6	0.00000	0.00000
Px C 6	0.00000	0.00000

Py	C	6	0.00000	0.00000
Pz	C	6	0.51922	0.52441
S	H	7	0.00000	0.00000
S	H	8	0.00000	0.00000
S	H	9	0.00000	0.00000
S	H	10	0.00000	0.00000
S	H	11	0.00000	0.00000
S	H	12	0.00000	0.00000

Определение нуклеофильных и электрофильных свойств молекулы

Энергия НВМО положительна, следовательно бензол – нуклеофил.

Определение жесткости и мягкости молекулы

Молекула бензола – нуклеофил, т.ч. работаем с ВЗМО. ВЗМО молекулы отделена от соседней МО (№22 7.3676эВ) на 0.0009 эВ. Следовательно, считается жестким реагентом.

$$\text{Жесткость молекулы} = \frac{1}{2} (13.8544 - 7.3686) = 3.2429 \text{ эВ}$$

Расчет вибрационного спектра и определение характеристик наиболее интенсивных мод колебаний

Было проведено вибрационное моделирование для бензола.

Энергетические характеристики молекулы

ENERGIES AND GRADIENT	
Total Energy	= -143004.0026487 (kcal/mol)
Total Energy	= -227.891356059 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	= 141856.0016006 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	= 226.061900164 (a.u.)
The Virial (-V/T)	= 2.0081
eK, ee and eN Energy	= -271351.9036142 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	= 128347.9009655 (kcal/mol)
RMS Gradient	= 0.0740960 (kcal/mol/Ang)

Таблица 1. Геометрия молекулы Бензола.

Длина связи или валентный угол	Данные ММ+ расчета	Данные MNDO расчета	Данные расчета ab- initio	Эксперимент
C-C	1.34243	1.40662	1.38666	1.397
C=C	1.34244	1.40665	1.38681	1.397
C-H	1.10386	1.0904	1.0827	1.084
C-C-H	120.018	120.006	119.996	120
C-C=C	119.992	119.999	120.002	120

Справочные данные были взяты из «Краткий справочник физико-химических величин. Издание десятое, испр. и дополн. / Под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой - СПб.: «Иван Федоров», 2003 г. С. 194».

ВЫВОД

Метод *ab-initio* демонстрирует наилучшие результаты по сравнению с MM+ и MNDO, что подтверждает его высокую точность в расчетах геометрии молекул. Все методы показывают, что бензол имеет высокую степень ковалентности, что согласуется с его известной структурой и свойствами.