

«Разработка программы для расчета электронной плотности молекул»

Дипломник: Фомина М.А.
Научный руководитель: Бажанов В.И.

Электронная плотность в квантовой механике

Электронная плотность - плотность вероятности распределения электронов в системе.

$$\rho(x) = |\psi_A(x)|^2$$

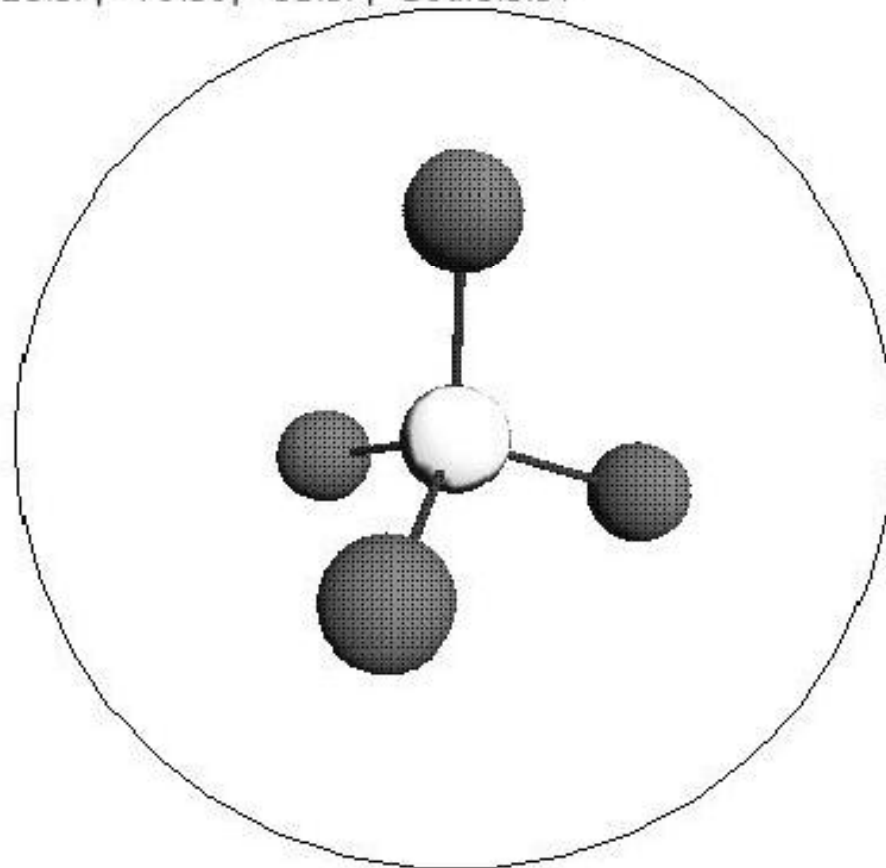
$$\rho_1(x_1; x_1') = \sum_{R(\text{занятые})} \psi_R(x_1) \psi_R^*(x_1');$$

Постановка задачи

Задача данной работы состоит в разработке программы, рассчитывающей электронную плотность молекулы.

В результате будет получена таблица значений электронной плотности и координаты ядер молекулы CH_4 (метана) в пространстве.

-28.37, -79.09, -53.37, Scale:5.81



Ход решения

Для решения задачи требуется провести следующие действия и расчеты :

1. вычислить волновые функции :

$$\chi_i(r_i) = A_i \sum_{k=1}^N c_{ik} \chi_{0k}(r_i)$$

n	l	m	α	χ_{0lmn}
1	0	0	± 1	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$
2	0	0	± 1	$\frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-\frac{r}{2}}$
2	1	0	± 1	$\frac{1}{4\sqrt{2}\pi} r e^{-\frac{r}{2}} \cos \theta$
2	1	∓ 1	± 1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} r e^{-\frac{r}{2}} \sin \theta e^{\mp i\varphi}$

Ход решения

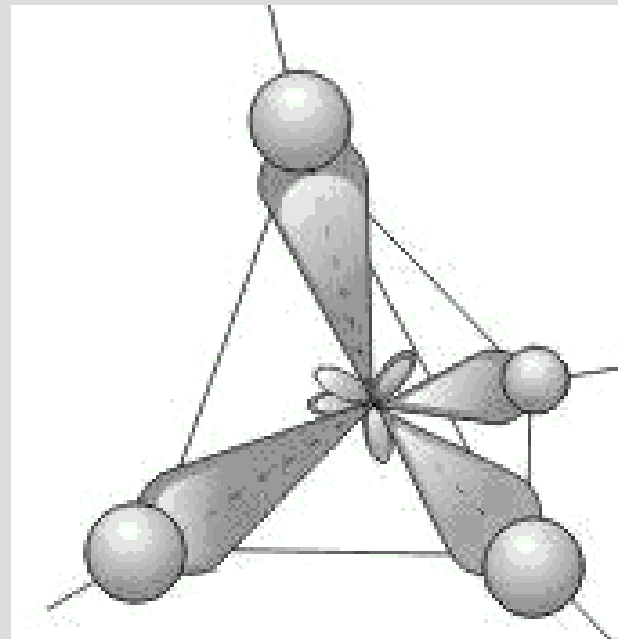
2. вычислить гибридные орбитали :

$$te_1 = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z),$$

$$te_2 = \frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z),$$

$$te_3 = \frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z),$$

$$te_4 = \frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z).$$



3. Вычислить электронную плотность атома углерода

$$\rho_C(x, y, z) = 2|\chi_{100}|^2 + |\chi_{te1}|^2 + |\chi_{te2}|^2 + |\chi_{te3}|^2 + |\chi_{te4}|^2$$

Ход решения

4. Найти главные оси симметрии для каждой из орбиталей

$$te_i, i = 1, 2, 3, 4$$

5. Выполнить преобразование координат, совместив поочередно каждую орбиталь с осью Ох;

6. Вычислить координаты атомов водорода;

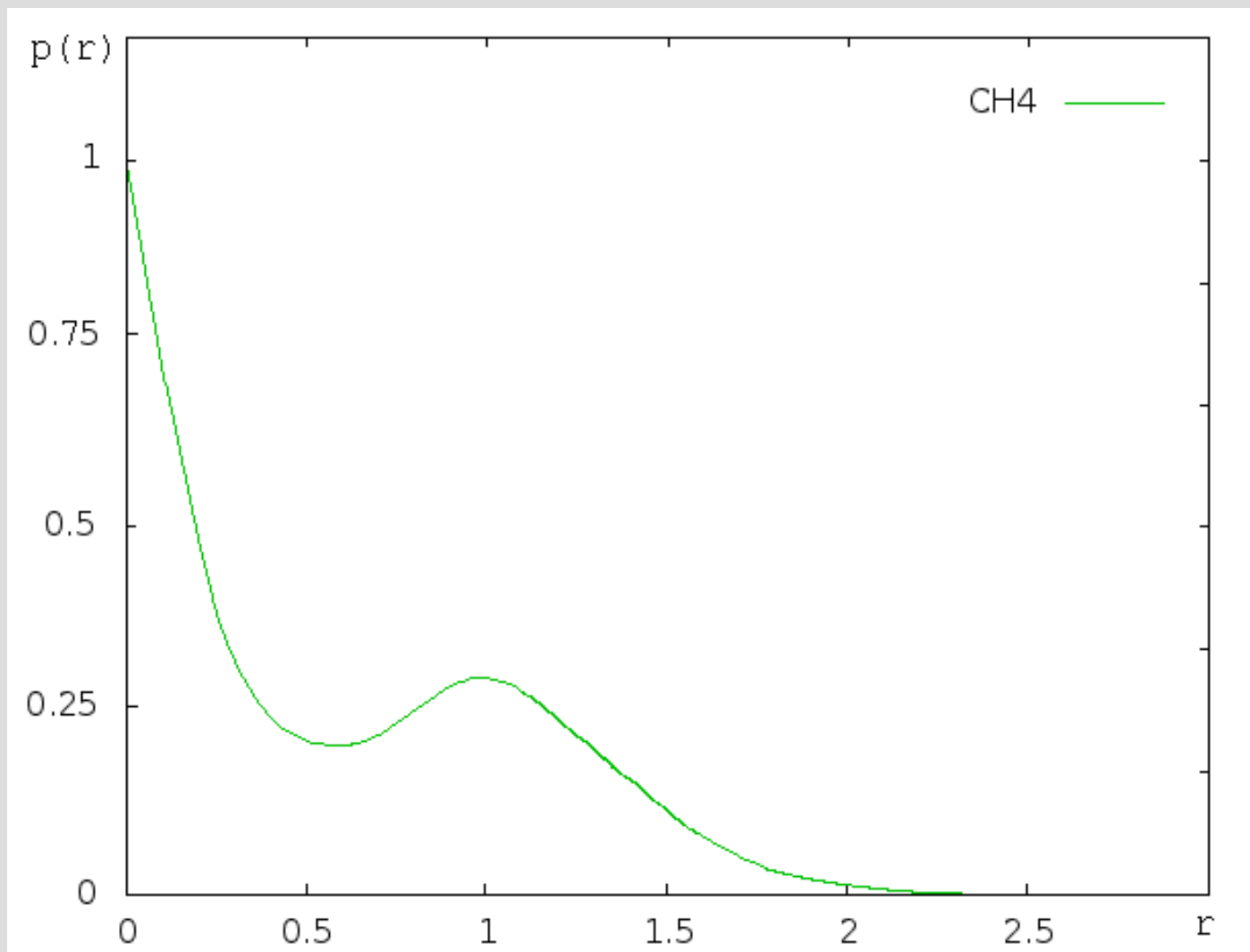
7. Вычислить МО для всех связей

$$\psi_{i1} = \psi_{i2} = \chi_{tei} + \chi_{100}, i = 1, 2, 3, 4$$

8. Вычислить электронную плотность молекулы метана

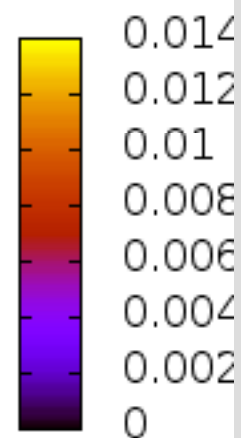
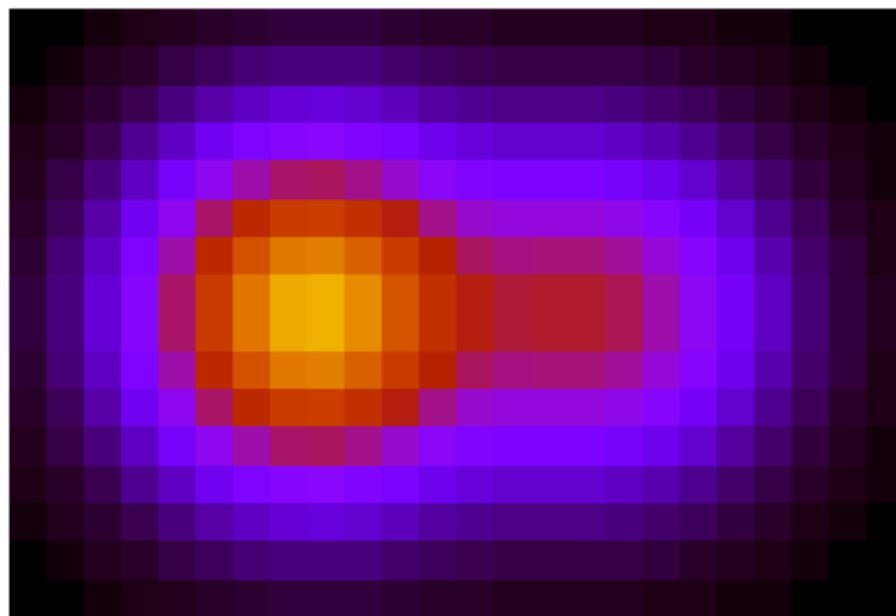
$$\rho_{CH_4}(x, y, z) = 2|\chi_{100}|^2 + \sum_{i=1}^4 (|\psi_{i1}|^2 + |\psi_{i2}|^2)$$

График зависимости электронной плотности от r на связи C-H



Метан. Молекулярная орбиталь

Electron density Methan



Результаты

- Получена программа, рассчитывающая электронную плотность молекулы метана координаты атомов в пространстве
- Результаты могут быть использованы для определения типов химических связей, присутствующих в молекуле, получения графиков областей связи молекулярного облака для вычислений межмолекулярного взаимодействия, взаимодействия с адсорбентом и др.
- Программа может быть изменена, если потребуется рассмотреть другое приближение для волновой функции либо рассчитать электронную плотность другой молекулы.