

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Институт физики, нанотехнологий и телекоммуникаций  
Высшая инженерно-физическая школа

# Оптимизация геометрии молекулы этиленгликоля в Z-матричном представлении

Отчет по лабораторной работе №4, вариант 16

**Работу**

**выполнил:**

В. Х. Салманов

Группа:

3430302/60201

**Преподаватель:**

И. М. Соколов

Санкт-Петербург

2020

# Содержание

1. Цель работы	3
2. Постановка задачи	4
3. Теоретическая информация	5
3.1. Z-матрица . . . . .	5
4. Результаты	6
5. Выводы	8
6. Контроль результатов	9
7. Приложенные файлы	10

## 1. Цель работы

Провести оптимизацию геометрии молекулы этиленгликоля в z-матричном представлении.

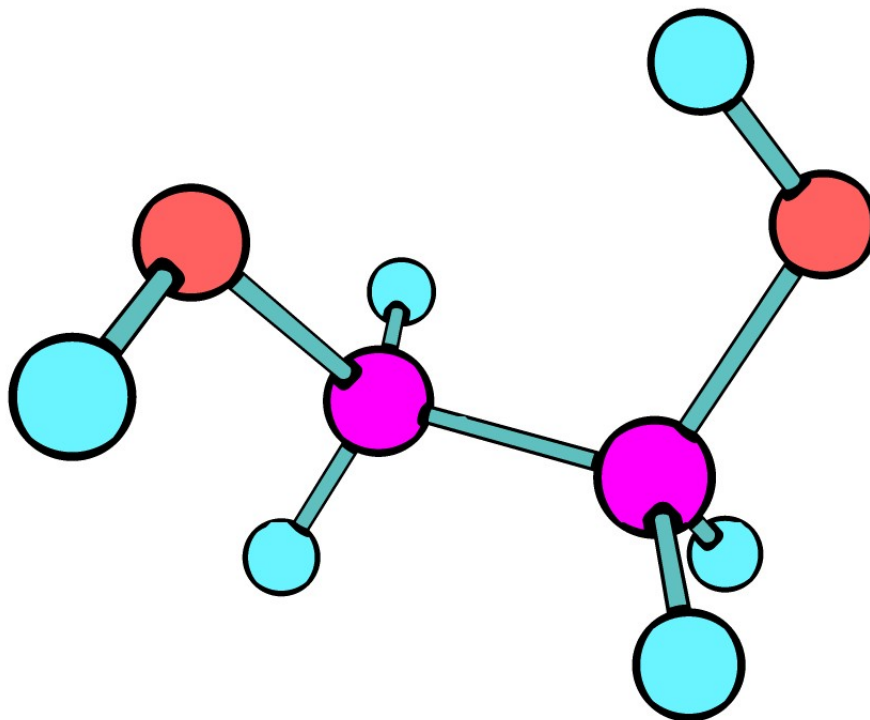


Рисунок 1.1. Молекула этиленгликоля.

## 2. Постановка задачи

Составить z-матрицу для молекулы этиленгликоля. Провести оптимизацию методом B3LYP в базисе 6-31G и привести следующие результаты:

- значение полной энергии и вкладов в нее до и после оптимизации;
- длины связей между всеми атомами, ковалентно связанными между собой;
- сопоставление результатов (полной энергии, длин связей, время оптимизации) со значениями, полученными в работе №2;

### 3. Теоретическая информация

#### 3.1. Z-матрица

В химии Z-матрицей называют способ представления координат атомов молекулярной системы. Кроме того, такое представление называют также внутренними координатами (internal coordinates). Это представление определяет каждый атом системы через атомный номер, длину связи, валентный угол и двугранный угол. Под связью в данном случае подразумевается не химическая связь, а просто вектор, направленный от одного атома к другому, хотя они могут и совпадать. Тем не менее, принято записывать Z-матрицу через длины и углы химических связей, так как такая запись позволяет описать не только относительное расположение атомов друг относительно друга, но и связи этих атомов.

Пример z-матрицы для молекулы этиленгликоля:

Element label	Atom 1	Bond length, Å	Atom 2	Bond angle, °	Atom 3	Dihedral angle, °
H	-	-	-	-	-	
O	1	1.1	-	-	-	-
C	2	1.2	1	109.5	-	-
C	3	1.4	2	109.5	1	-60.9
O	4	1.2	3	109.5	2	-60.9
H	5	1.1	4	109.5	3	58.6
H	3	1.1	2	109.5	1	60.9
H	3	1.1	2	109.5	1	178.9
H	4	1.1	5	109.5	6	179.5
H	4	1.1	5	109.5	6	-62.6

## 4. Результаты

### Энергия системы

Была проведена оптимизация геометрии методом B3LYP в базисе 6-31G.

Таблица 4.1

**Значения составляющих полной энергии для молекулы до и после проведения оптимизации (раздел ENERGY COMPONENTS)**

	До оптимизация, Хартри	После оптимизации, Хартри
Кинетическая энергия электронов	230.372	228.911
Электрон-электронное взаимодействие	227.240	213.149
Электрон-ядерное взаимодействие	-834.435	-804.018
Ядер-ядерное взаимодействие	146.936	131.912
<b>Полная энергия</b>	<b>-229.886</b>	<b>-230.045</b>

### Длины связей

Была проведена оптимизация геометрии методом B3LYP в базисе 6-31G.

Таблица 4.2

**Длины связей в молекуле до и после оптимизации (раздел BOND ORDER AND VALENCE ANALYSIS)**

Связь	Длина связи, Å		Относительная разница, %
	До оптимизации	После оптимизации	
O1-H9	1.100	0.980	-10.91
O1-C3	1.200	1.467	22.25
C3-H5	1.100	1.098	-0.18
C3-H6	1.100	1.092	-0.73
C3-C4	1.400	1.523	8.79
C4-H8	1.100	1.104	0.36
C4-H7	1.100	1.094	-0.55
C4-O2	1.200	1.448	20.67
O2-H10	1.100	0.983	-10.64

## Сопоставление результатов

В работе №2 полная энергия оптимизированной геометрии равна -230.045 Хартри. Результат, полученный в данной работе, совпадает с результатом прошлой работы. Из таблицы ниже также можно видеть, что геометрии полученных структур совпадают:

Таблица 4.3

Сопоставление длин связей структур

Связь	Длина связи, Å		Относительная разница, %
	В работе №2	В работе №4	
O1-H9	0.980	0.980	0.00
O1-C3	1.467	1.467	0.00
C3-H5	1.098	1.098	0.00
C3-H6	1.092	1.092	0.00
C3-C4	1.523	1.523	0.00
C4-H8	1.104	1.104	0.00
C4-H7	1.094	1.094	0.00
C4-O2	1.448	1.448	0.00
O2-H10	0.983	0.983	0.00

Однако в предыдущей работе оптимизация сошлась за 125 сек., в то время как в данной работе – за 165 сек.

## 5. Выводы

Задачу оптимизации геометрии можно решать в различных координатных системах: картезианских, нормальных, картезианских масс-взвешенных, z-матричных и др. От выбора системы координат зависит скорость сходимости результата.



## 6. Контроль результатов

Результаты данного расчета (полная энергия оптимизированной геометрии) совпадает с той, которая была получена в работе №2.

## 7. Приложенные файлы

- Ethylene\_glycol.mol – исходный файл в формате mol;
- Ethylene\_glycol.inp – исходные данные GAMESS для расчета методом DFT (B3LYP) в базисе 6-31G;
- Ethylene\_glycol.log – результат расчета методом DFT (B3LYP) в базисе 6-31G.