

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

# Определение структуры комплексов пропанола с молекулой воды и энергии образующейся водородной связи

Отчет по лабораторной работе №5, вариант 16

**Работу**

**выполнил:**

В. Х. Салманов

Группа:

3430302/60201

**Преподаватель:**

И. М. Соколов

Санкт-Петербург

2020

# Содержание

1. Цель работы	3
2. Постановка задач	4
3. Теоретическая информация	5
3.1. Водородная связь . . . . .	5
4. Результаты	6
5. Выводы	7
6. Контроль результатов	8
7. Приложенные файлы	9

## 1. Цель работы

Определить возможные структуры комплексов пропанола с молекулой воды и энергии образующейся при этом водородной связи.

## 2. Постановка задач

Предположить возможные комплексы молекул пропанола с водой, провести оптимизацию методом RHF/STO-3G и привести следующие результаты:

- число действительно различных комплексов с водородной связью;
- для каждого комплекса – энергию водородной связи;
- наиболее энергетически выгодный комплекс и соответствующее значение водородной связи.

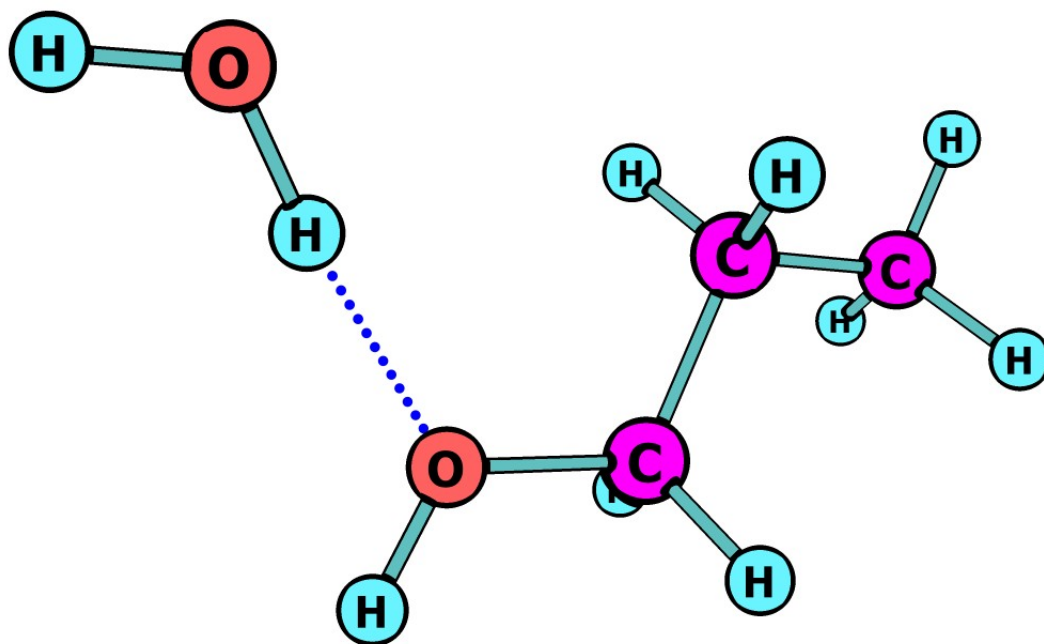


Рисунок 2.1. Один из предложенных комплексов пропанола с молекулой воды.

### 3. Теоретическая информация

#### 3.1. Водородная связь

Водородная связь — форма ассоциации между электроотрицательным атомом и атомом водорода Н, связанным ковалентно с другим электроотрицательным атомом. В качестве электроотрицательных атомов могут выступать N, O или F. Энергия водородной связи, как правило, по абсолютной величине находится в пределах (0.003 - 0.022) Хартри.

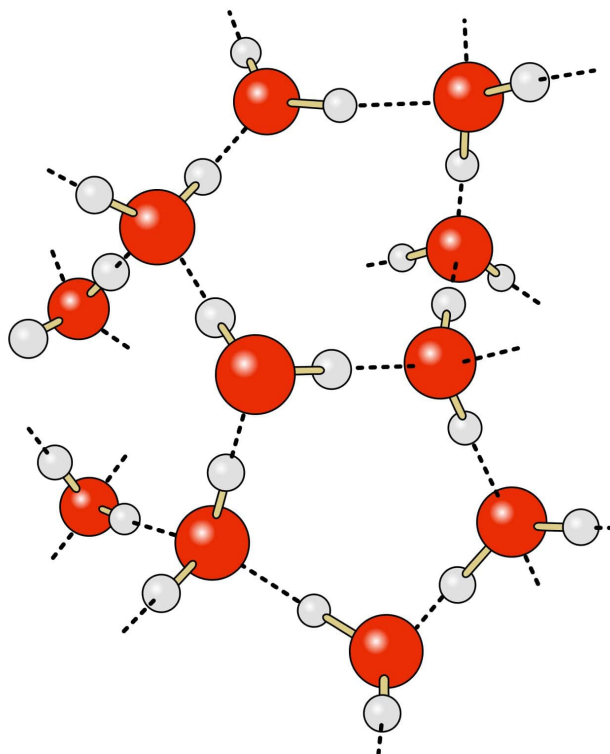


Рисунок 3.1. Водородная связь между молекулами воды (чёрные пунктирные линии).

## 4. Результаты

Было предложено 5 различных комплексов. После проведения оптимизации были получены два стабильных различных комплекса. Информация о данных комплексах приведена в таблице ниже:

Таблица 4.1

Составляющие энергии комплексов

№ комплекса	Описание комплекса	Полная энергия комплекса, Хартри	Полная энергия невзаимодействующего комплекса, Хартри	Энергия водородной связи, Хартри
1	Водородная связь между O2 и H1	-265.688	-265.678	0.01
2	Водородная связь между O1 и H3	-265.687	-265.678	0.009

Более стабильным оказался первый комплекс.

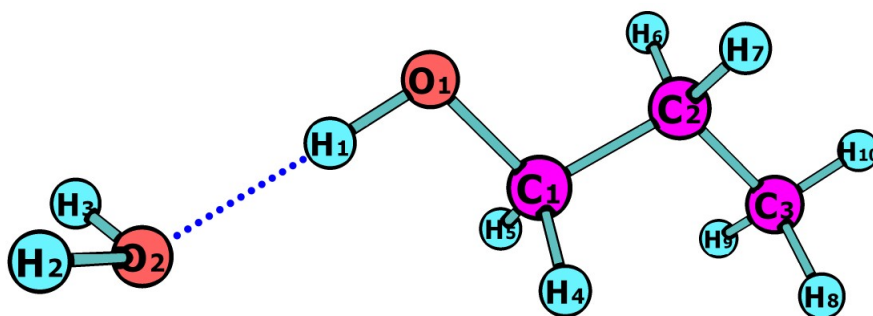


Рисунок 4.1. Комплекс №1.

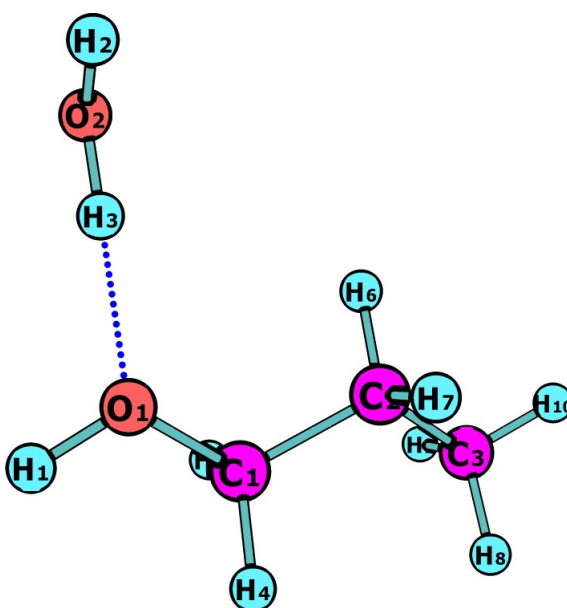


Рисунок 4.2. Комплекс №2.

## 5. Выводы

Полученное значение энергии водородной связи для двух соединений находится в допустимом пределе: (0.003 - 0.022) Хартри. Оба комплекса являются стабильными и в растворе могут быть присутствовать оба комплекса.

## 6. Контроль результатов

- у каждого рассматриваемого комплекса в выходном файле содержится “EQUILIBRIUM GEOMETRY LOCATED”;
- из пяти предложенных конформеров были обнаружены тождественные: энергия совпадает до 4 знака после запятой, геометрии тождественны;
- значения энергий водородной связи находятся в допустимых пределах.



## 7. Приложенные файлы

- `complex_origin.xyz` – исходная структура невзаимодействующего комплекса;
- файлы в папке `input` – файлы на вход GAMESS;
- файлы в папке `output` – выходные файлы GAMESS.