

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

Молекулярное моделирование

Отчет по лабораторной работе №2, вариант 16

Работу

выполнил:

В. Х. Салманов

Группа:

3430302/60201

Преподаватель:

И. М. Соколов

Санкт-Петербург

2020

Содержание

1. Описание работы	3
2. Постановка задачи	4
3. Теоретическая информация	5
3.1. Теория функционала плотности	5
4. Результаты	6
5. Контроль результатов	9

1. Описание работы

Подготовить исходные данные с помощью программы Avogadro. Провести оптимизация геометрии (Energy Optimization) с помощью программы GAMESS. Проанализировать результаты.

Расчитываемая молекула: этиленгликоль $C_2H_4 - (OH)_2$

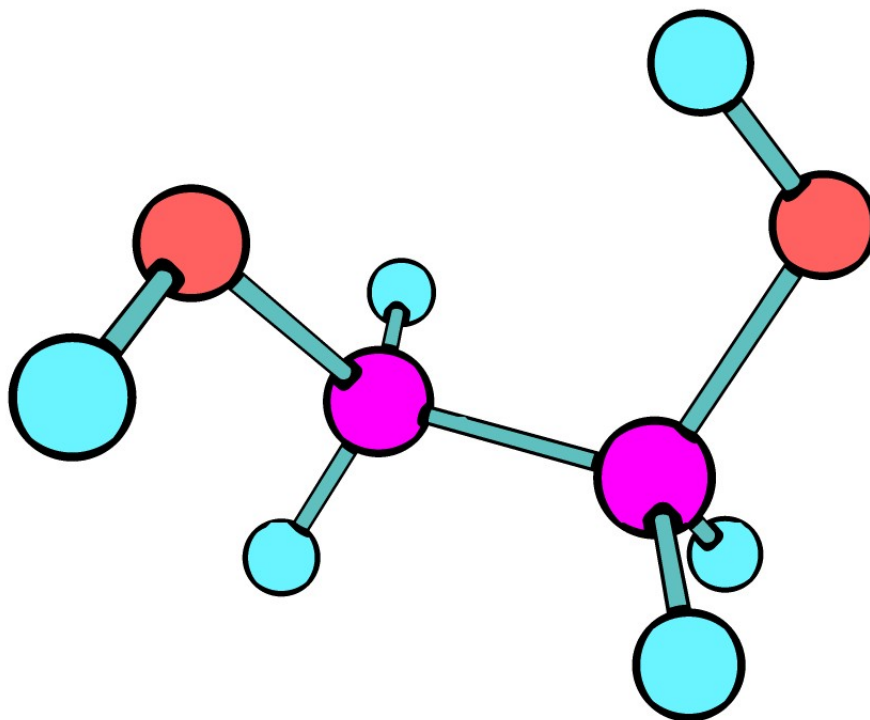


Рисунок 1.1. Изопропанол. Цветами обозначены атомы: голубой - водород, фиолетовый - углерод, красный - кислород.

2. Постановка задачи

Предварительно оптимизировать молекулярную структуру с помощью программы Avogadro, затем провести геометрическую оптимизацию с помощью программы GAMESS методом DFT. Проанализировать следующие показатели:

- номер слейтеровской орбитали, локализованной на атоме кислорода, которая вносит существенный вклад в НОМО;
- определить заселенность по Малликену атомов кислорода и максимальную меж-атомную заселенность;
- привести исходное значение полной энергии (в а.е.) до начала процесса оптимизации и полную энергию, полученную после завершения процесса оптимизации геометрии. Для полной энергии, полученной по окончании оптимизации, привести вклады электронной энергии и энергии кулоновского отталкивания ядер.
- сопоставить геометрии (длины связей) до и после оптимизации, визуализировать результат.

3. Теоретическая информация

3.1. Теория функционала плотности

ТФП связывает свойства молекулярных систем с электронной плотностью основного состояния¹ и опирается на теорему Хоэнберга—Кона, которая утверждает, что энергия системы есть функционал электронной плотности, а точная электронная плотность основного состояния обеспечивает минимум энергии:

$$E[\rho] = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla^2 \psi_i(\vec{r}) + \int V(\vec{r}) \rho(\vec{r}) + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + E_{xc}[\rho]$$

Различные методы ТФП отличаются друг от друга выбором обменно-корреляционного функционала. Один из наиболее популярных методов является гибридный метод B3LYP, в котором смешаны различные другие методы ТФП.

¹Для исследования возбужденных состояний можно использовать TD DFT или TD HF

4. Результаты

Определить номер НОМО, которая содержит существенный вклад АО, локализованной на атоме кислорода.

Номер НОМО 17. Наиболее существенный вклад вносит $2p_z$ -орбиталь (-0.537052), центрированная на атоме O2 (раздел EIGENVECTORS).

Анализ заселенностей атомов O1 и O2

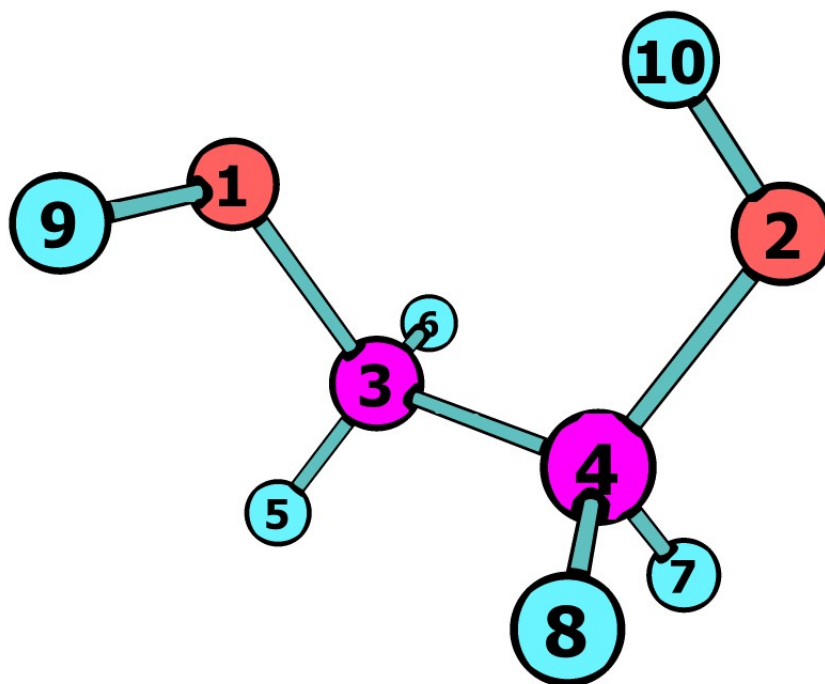


Рисунок 4.1. Номера атомов в молекуле этиленгликоль. Цветами обозначены атомы: голубой - водород, фиолетовый - углерод, красный - кислород.

Полная заселенность по Малликену для атомов O1 и O2 составляет 8.6. Так как заряд ядра атома кислорода составляет +8, то в данном соединении кислород является электроотрицательным. Максимальная межатомная заселенность образована между атомами C3-H6 – 0.745322 (разделы TOTAL MULLIKEN AND LOWDIN ATOMIC POPULATIONS и MULLIKEN ATOMIC OVERLAP POPULATIONS).

Сопоставление полной энергии

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

Таблица 4.1

Значения составляющих полной энергии для молекулы до и после проведения оптимизации (в Хартри)

	До оптимизация	После оптимизации
Кинетическая энергия электронов	229.082	228.911
Электрон-электронное взаимодействие	214.520	213.127
Электрон-ядерное взаимодействие	-807.080	-803.973
Ядер-ядерное взаимодействие	133.435	131.889
Полная энергия	-230.042	-230.045

Изменение полной энергии составило менее 1%, что является несущественным. Это значит, что Avogadro хорошо проводит оптимизацию.

Сопоставление длин связей

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

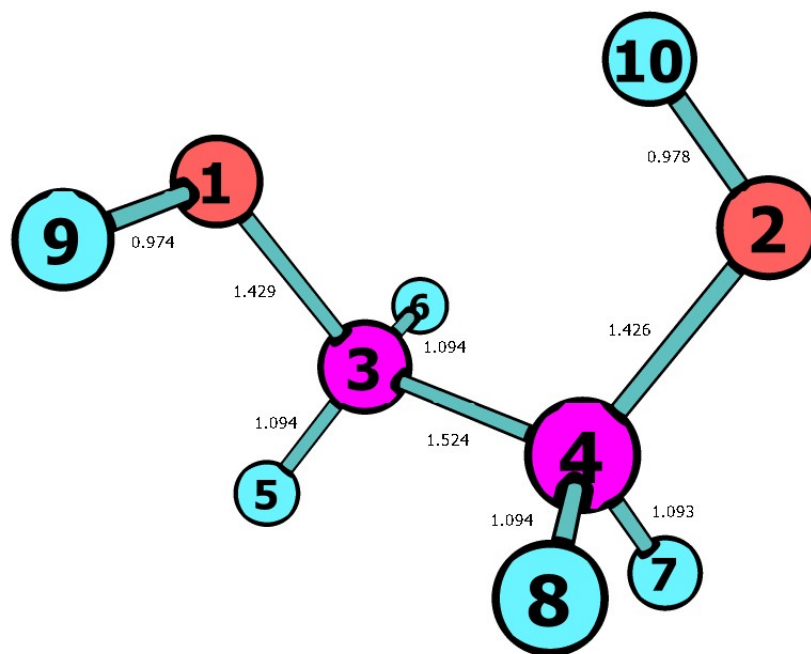


Рисунок 4.2. Геометрия молекулы до оптимизации

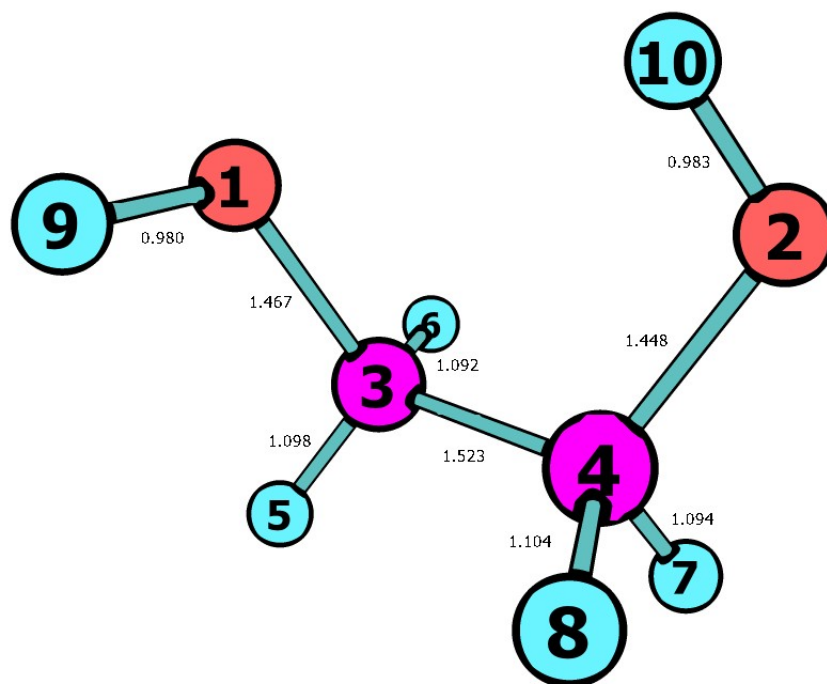


Рисунок 4.3. Геометрия молекулы после оптимизации

Таблица 4.2

Длины связей в молекуле до и после оптимизации

Связь	Длина связи		Относительная разница, %
	До оптимизации	После оптимизации	
O1-H9	0.974	0.980	0.62
O1-C3	1.429	1.467	2.66
C3-H5	1.094	1.098	0.37
C3-H6	1.094	1.092	-0.18
C3-C4	1.524	1.523	-0.07
C4-H8	1.094	1.104	0.91
C4-H7	1.093	1.094	0.09
C4-O2	1.426	1.448	1.54
O2-H10	0.978	0.983	0.51

Как видно из таблицы, наиболее существенно изменилась связь O1-C3.

5. Контроль результатов

Процесс оптимизации геометрии в расчете действительно завершен (в выходном файле содержится: "EQUILIBRIUM GEOMETRY LOCATED"). В результате расчета получена геометрия с более низкой полной энергией, чем после предварительной оптимизации в Avogadro.

Приложенные файлы:

- 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;