

Специализированный учебно-научный центр (факультет) школа им.  
А.Н. Колмогорова  
Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

## Квантово-химические расчёты структур органических кристаллов

Выполнила

Данченко Анастасия, ученица 10-Л класса

Научный руководитель

Дзябченко Александр Валентинович, ведущий  
научный сотрудник НИФХИ им. Л.Я. Карпова

# Почему это важно?

- Изучение трехмерного строения и физико-химических свойств твердых веществ
- Проверка модельных теорий межмолекулярных взаимодействий
- Поиск новых полиморфов лекарственных веществ
- Поиск высокоплотных высокоэнергетических (ВТВЭ) материалов
- Помощь в расшифровке структурного эксперимента:
  - кристаллов при высоких температурах и давлениях
  - кристаллов с элементами беспорядка
  - кристаллов биомолекул

# Цели и задачи

## Цель работы:

Проведение расчетно-теоретического исследования молекулярного и кристаллического строения ряда органических соединений.

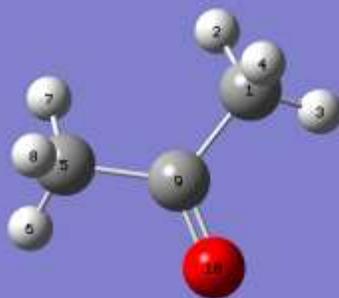
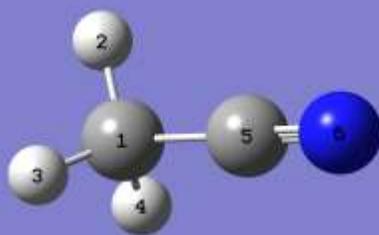
## Задачи:

- Провести исследование на примере нескольких органических соединений-растворителей
- Сравнить результаты расчётов с экспериментальными структурами и найти отклонения
- Сделать выводы об использованной теоретической модели

# Этапы работы

1. Расчёт оптимальной геометрии молекул и МЭП
2. Оптимизация моделей эффективных зарядов
3. Оптимизация параметров кристаллических структур с использованием разных моделей эффективных зарядов

# GAMESS/Firefly



File Process Utilities View Help

Batch Data:  Processing:

Active Job: C:\G98W\ Gauss\Acetonitrile\Acetonitrile.qif Output File: Acetonitrile.out

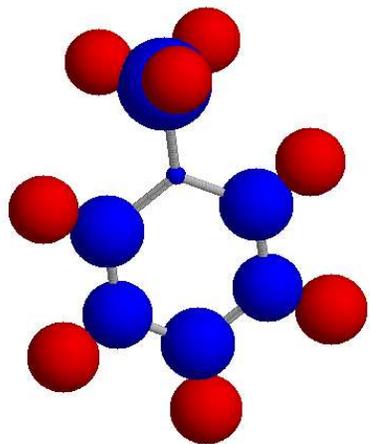
Run Progress: C:\G98W\I701.exe is processing...

```
X= -4.3140 Y= -0.0356 Z= 0.0030 Tot= 4.3142
Quadrupole moment (Debye-Ang):
XX= -20.6325 YY= -17.4636 ZZ= -17.8280
XY= 0.0263 XZ= -0.0018 YZ= -0.0274
Octapole moment (Debye-Ang**2):
XXX= -14.0931 YYY= 0.5998 ZZZ= 0.0754 XYY= -2.2991
XXY= 0.1534 XXZ= 0.0763 XZZ= -1.6802 YZZ= -0.6936
YYZ= -0.1125 XYZ= 0.0622
Hexadecapole moment (Debye-Ang**3):
XXXX= -189.2201 YYYY= -22.3074 ZZZZ= -22.6161 XXXY= -0.4466
XXXZ= -0.1421 YYXX= -1.1182 YYYZ= -0.0473 ZZZX= -0.1892
ZZZY= -0.0332 XXXY= -31.3647 XXZZ= -32.5429 YYZZ= -7.3245
XXYZ= -0.1681 YYXZ= 0.1686 ZZXY= 1.1567
N-N= 5.720912092308D+01 E-N=-4.222085505860D+02 KE= 1.315803553139D+02
```

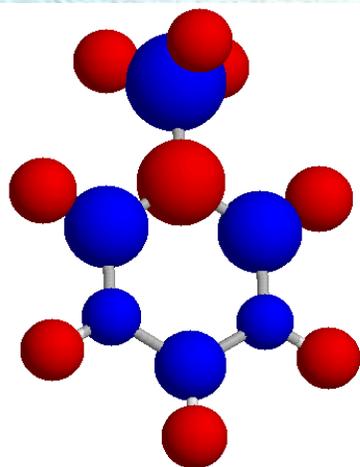
Computing 1-Electron Integral First or Second Derivatives

# FitMEP

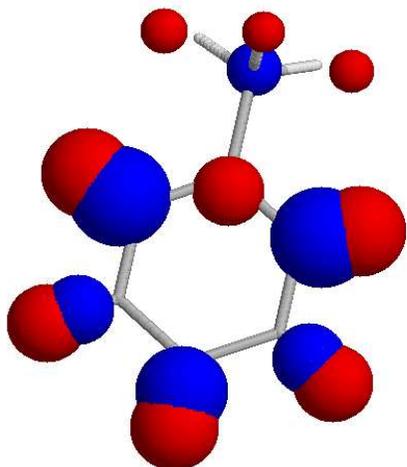
Model Mulliken  
R=24%



Model BAC  
R=4%



Model BSC  
R=2%



Сравнение моделей ЭЗ. Тoluол  $C_7H_8$

Точечная группа симметрии = Cs

Число пробных точек сетки МЭП  $N_p = 84124$

Метод QM: Хартри-Фок с базисом АО гауссова типа 6-31G(d,p)

---

Модель	R,	Rr	D	Q <sub>xx</sub>	Q <sub>zz</sub>
MC	0.462	23,6	0.394	4.037	-6.222
BAC	0.074	3,8	0.293	2.725	-5.213
BSC	0.038	1,9	0.29	2.742	-5.258
QM	0	0	0.292	2.751	-5.262

---

**MC = 'Mulliken Charges'; BAC = 'Best Atomic Charges'; BSC = 'Best Site Charges'; QM = 'Quantum Mechanical'**

R (в ккал/моль) = среднеквадр. отклонение модельного потенциала от QM МЭП

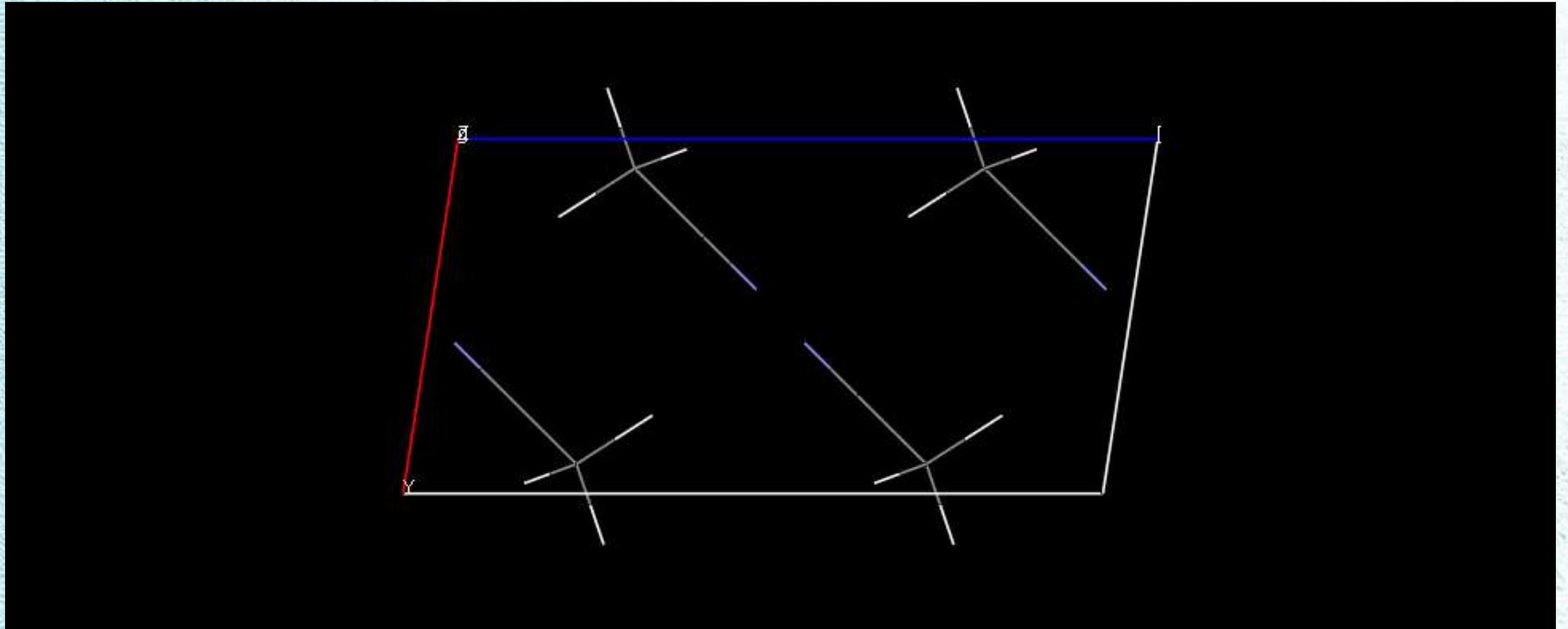
Rr (в %) = относительное среднеквадратичное отклонение

D (в Дебаях) = дипольный момент молекулы

Q<sub>xx</sub> и Q<sub>zz</sub> (в Дебаях.Å) – независимые компоненты квадрупольного момента

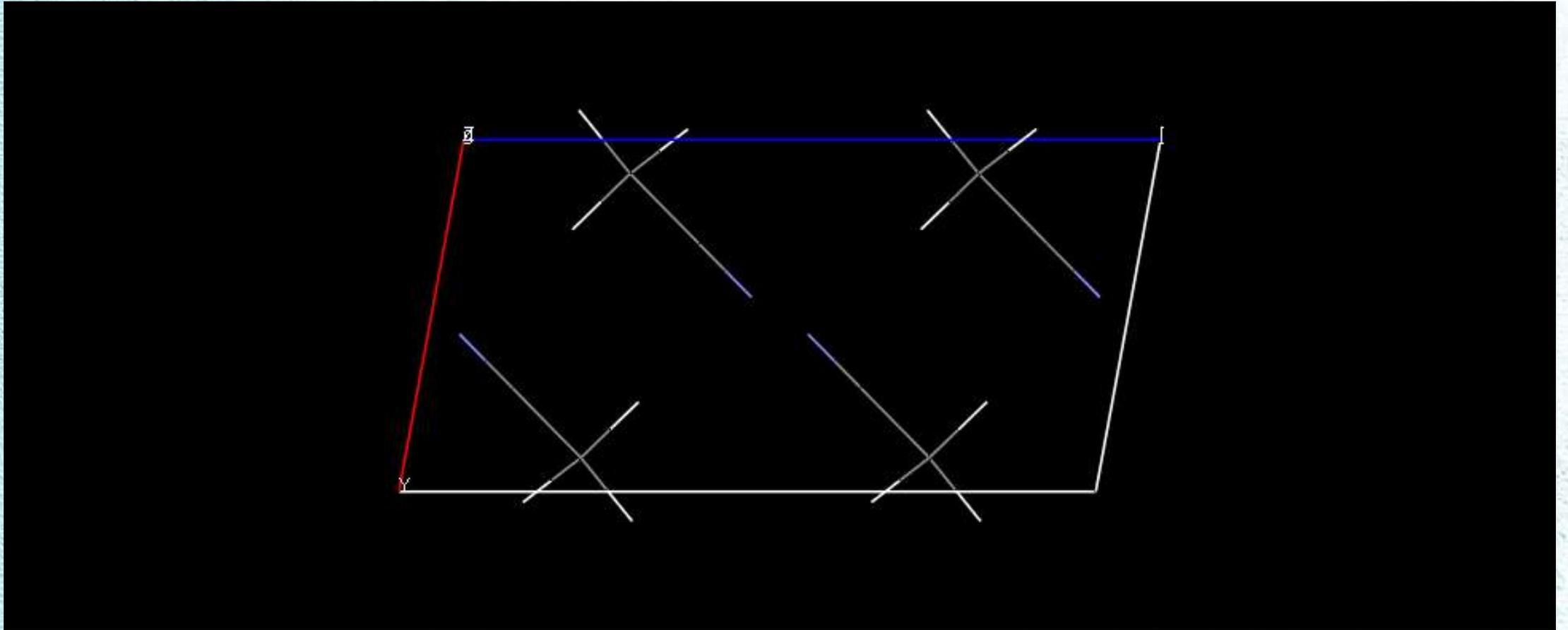
# PMC

Model Mulliken



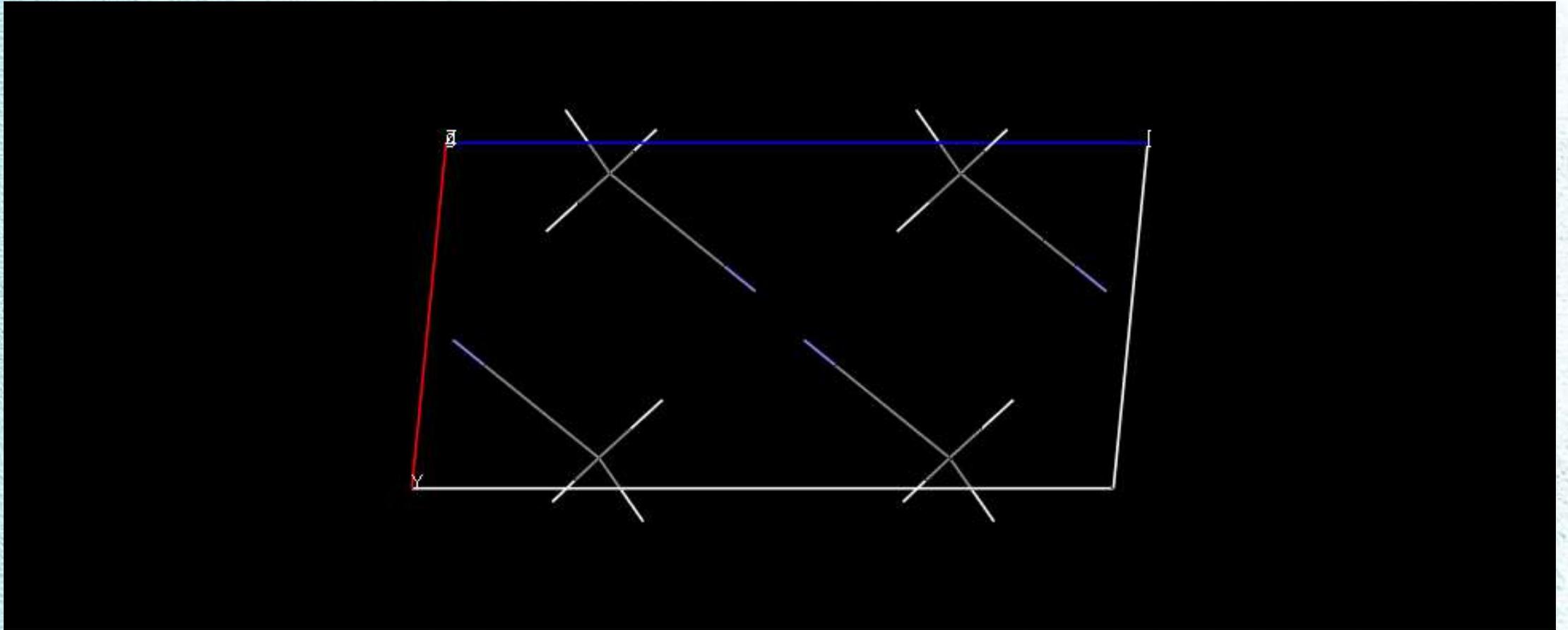
# PMC

Model BAC



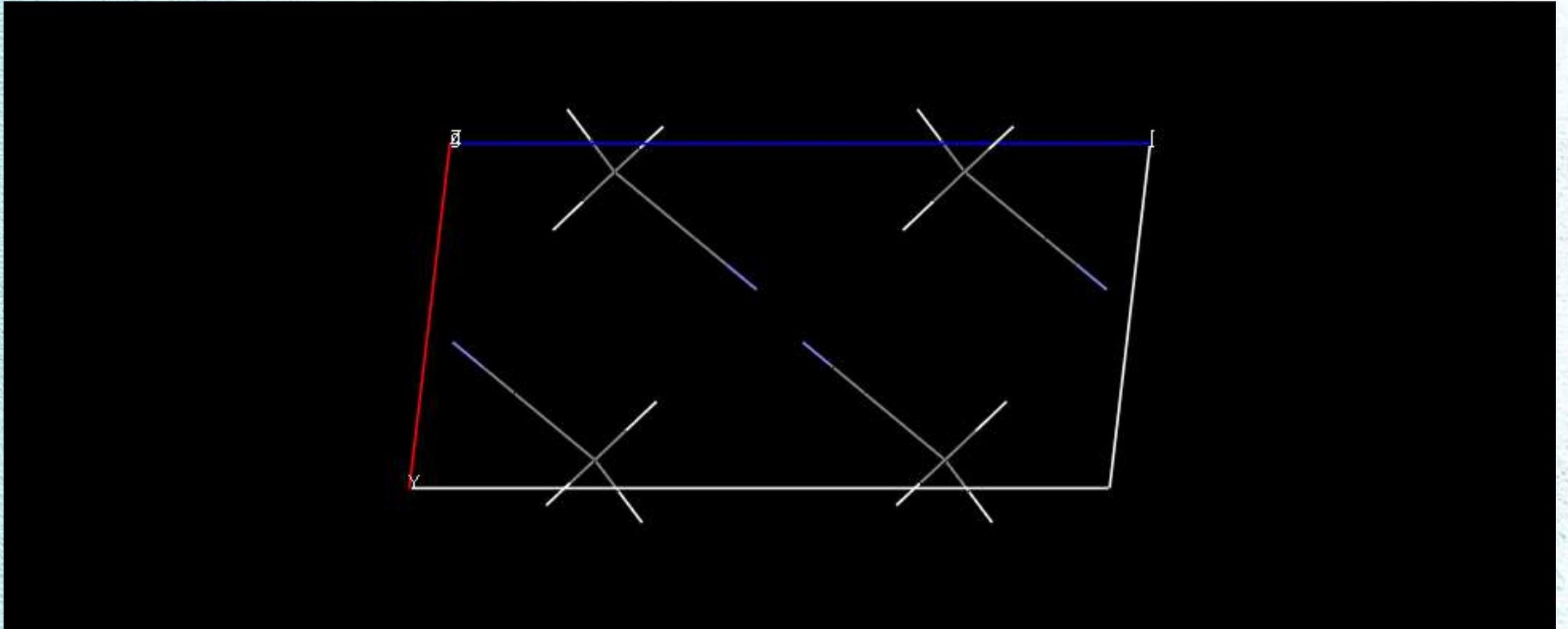
# PMC

Model BSC



# PMC

Model CSD



# Выводы

1. Установлено, что наиболее точной является модель вспомогательных заряженных центров BSC.
2. Её использование позволит предсказывать структуры ещё не исследованных экспериментально веществ.
3. Предсказание кристаллических структур с использованием модели BSC - наиболее точный способ проверки модельных теорий межмолекулярных взаимодействий путем сравнения расчета с экспериментом.

**СПАСИБО ЗА  
ВНИМАНИЕ!**