

*Никулин А.А.,
студент 1 курса магистратуры
Института нефти и газа
Астраханский государственный технический университет
Россия, г. Астрахань
e-mail: 070100saneknikylin@mail.ru*

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ МОЛЕКУЛ РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ

***Аннотация:** Квантовая химия является теоретическим фундаментом современной химической науки, квантово-химические методы широко применяются для исследования структуры и свойств соединений, энергетики и механизмов химических превращений.*

Ключевые слова: метод функционала плотности, энергия ионизации, серосодержащие молекулы, сродство к электрону.

*Nikulin A.A.,
1st year master student
Institute of Oil and Gas
Astrakhan State Technical University
Russia, Astrakhan*

COMPARATIVE ANALYSIS OF SIMULATION RESULT'S GEOMETRIC STRUCTURE AND ELECTRONIC STRUCTURE SULFUR - CONTAINING MOLECULES BY VARIOUS METHODS

***Abstract:** Quantum chemistry is a theoretical foundation of modern chemical science, quantum chemical methods are widely used to study the structure and properties of compounds, energy and mechanisms of chemical transformations.*

Keywords: density functional method, ionization energy, sulfur-containing molecules, electron affinity.

Квантовая химия является теоретическим фундаментом современной химической науки, квантово-химические методы широко применяются для исследования структуры и свойств соединений, энергетики и механизмов химических превращений [1].

Цель настоящей работы состояла в сравнении результатов моделирования геометрического строения и электронной структуры молекул двумя методами – Хартри-Фока и функционала плотности. Указанные методы относятся к числу наиболее широко используемых в настоящее время при проведении квантово-химических расчётов. Химия серосодержащих соединений, обладающих многими практически полезными свойствами, представляет собой перспективную и интенсивно развивающуюся область современной органической химии [2].

Для обоих расчётных методов использовался одинаковый базис атомных орбиталей: 6-31++G (d, p). При расчётах методом функционала плотности использовался функционал B3LYP. Проводилась полная оптимизация геометрии рассчитываемых структур. В качестве моделируемого параметра электронной структуры была выбрана энергия ионизации взята с обратным знаком [3].

Анализ результатов расчётов позволяет сделать следующие выводы. Оба метода в целом удовлетворительно воспроизводят геометрическое строение серосодержащих молекул. Энергию ионизации намного лучше воспроизводит метод Хартри-Фока. Следует отметить, что величины ЭИ для молекул с закрытыми оболочками воспроизводятся намного точнее, чем для радикалов. Кроме того, неудовлетворительно воспроизводятся рассматриваемыми методами энергии ионизации молекул, содержащих фрагмент $-S_n^-$.

Таблица. Результаты расчётов геометрических параметров и энергий ионизации серосодержащих молекул (l – длина связи, Å, \angle – угол между связями, °, ЭИ – энергия ионизации, эВ)

Молекула, параметр	Справочные данные	Метод Хартри-Фока	Метод функционала плотности
1) H ₂ S, $l(S-H)$	1,336	1,328	1,348
H ₂ S, $\angle HSH$	92,1	94,4	92,8

H ₂ S, ЭИ	10,43	10,48	7,27
2) HS□, ЭИ	10,40	10,27	7,19
3) S ₂ , l(S-S)	1,889	1,878	1,929
S ₂ , ЭИ	9,36	8,97	6,06
4) H ₂ S ₂ , l(S-H)	1,327	1,328	1,353
H ₂ S ₂ , l(S-S)	2,055	2,066	2,102
H ₂ S ₂ , ЭИ	10,20	10,53	7,40
5) S ₃ , ЭИ	9,68	9,89	7,50
6) CH ₃ SH, l(S-H)	1,329	1,328	1,349
CH ₃ SH, l(C-S)	1,819	1,818	1,837
CH ₃ SH, ∠CSH	96,5	98,0	97,0
CH ₃ SH, ЭИ	9,44	9,72	6,59
7) CH ₃ S□, ЭИ	7,70	9,44	6,40
8) H ₂ C=S, l(C=S)	1,611	1,598	1,619
H ₂ C=S, ∠HCS	125,0	122,1	122,2
H ₂ C=S, ЭИ	9,40	9,58	6,52
9) CH ₃ SSH, ЭИ	8,46	9,90	6,81
10) CH ₃ SSSH, ЭИ	8,80	9,90	6,96
11) C ₂ H ₅ SH, ЭИ	9,29	9,65	6,56
12) C ₂ H ₅ S□, ЭИ	7,20	9,40	6,38
13) CH ₃ SCH ₃ , l(C-S)	1,802	1,808	1,826
CH ₃ SCH ₃ , ∠CSC	98,9	100,1	99,6
CH ₃ SCH ₃ , ЭИ	8,69	9,13	6,07
14) CH ₃ SSCH ₃ , ЭИ	8,46	9,59	6,60
15) <i>n</i> -C ₃ H ₇ SH, ЭИ	9,20	9,63	6,54
16) <i>n</i> -C ₄ H ₉ SH, ЭИ	9,14	9,61	6,52
17) (CH ₃) ₃ CSH, ЭИ	9,79	9,58	6,49
18) C ₄ H ₄ S (тиофен), l(C-S)	1,714	1,724	1,735

C_4H_4S , $\angle CSC$	92,1	91,4	91,5
C_4H_4S , ЭИ	8,86	9,07	6,62
19) C_6H_5SH , ЭИ	8,33	9,40	6,17
20) $C_6H_5S\square$, ЭИ	8,63	9,55	6,30

Таким образом, анализ полученных результатов позволяет сделать вывод, что оптимизацию геометрии серосодержащих молекул целесообразно проводить методом функционала плотности. Далее, для оптимизированной геометрии следует провести расчёт методом Хартри-Фока с целью нахождения величины энергии ионизации. Перспективой дальнейших исследований является поиск оптимальных методов для расчёта энергии ионизации серосодержащих радикалов и молекул, содержащих фрагменты $-S_n-$, а также моделирование других молекулярных параметров, например, величин сродства к электрону и энергий разрыва химических связей.

Список литературы:

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: Бином, 2010. 496 с.
2. Берберова Н.Т., Шинкарёв Е.В., Смолянинов И.В., Охлобыстина А.В. Сероводород и алкантиолы в синтезе биологически активных органических соединений серы: монография. Ростов-на-Дону: Изд-во ЮНЦ РАН, 2016. 260 с.
4. Кондратьев В.Н. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. М.: Наука, 1974. 351 с.