Российская Академия Наук
Институт Общей и Неорганической химии им. Н.С. Курнакова
Воронежский Государственный Университет
Физико-технический институт Уральского Отделения РАН
Удмуртский государственный университет
Вузовско-академический отдел физико-химии и механики
полимеров ИжГТУ, УдГУ и ИПМ УрО РАН

XVI научная школа-семинар

"РЕНТГЕНОВСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ"

15-18 декабря 1998г.
(г.Ижевск, Удмуртская республика)

ПРОГРАММА И ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

При поддержке Федеральной целевой программы "Интеграция"

Москва-Воронеж-Ижевск
1998

СРАВНЕНИЕ ПРИМЕНИМОСТИ МЕТОДА CNDO/2 И АНАЛИТИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ РАСЧЕТА МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ПРИМЕРЕ ВОДЫ

ШИРОБОКОВ И.Б

Удмуртский государственный университет, г. Ижевск

В статистических методах моделирования обычно применяются модельные аналитические потенциалы взаимодействия молекул типа потенциала Леннарда-Джонса. В тех же случаях, когда для изучаемой системы неизвестен вид межмолекулярного взаимодействия можно воспользоваться квантово-механическими методами, при этом структура и свойства жидкости выводятся из электронных свойств составляющих ее молекул.

Целью данной работы является изучение применимости полуэмпирического метода CNDO/2 для расчета межмолекулярного взаимодействия при моделировании воды методом Монте-Карло и сравнении результатов расчета с экспериментальными, а также вычисленными с применением аналитического потенциала.

Работа состоит из трех частей. В первой части производится расчет изолированной молекулы воды методом CNDO/2, во - второй - димера, в третьей - ММК ансамбля из 1000 молекул воды. По результатам расчета строились функции радиального распределения (ФРР), которые сравнивались с аналогичными функциями из литературы и полученными ранее аналогичными методами для 216 молекул воды с применением аналитического потенциала.

Полученные результаты показывают, что использование данного подхода правильно передает строение одиночной молекулы воды и строение димера. Проведенные модельные расчеты структуры жидкой воды с использованием потенциала Маленкова-Полтева и расчеты, когда в качестве потенциала межмолекулярного взаимодействия использовали значение энергии взаимодействия двух молекул воды, рассчитанное методом CNDO/2 показывают, что в данной параметризации использование метода CNDO/2 в качестве потенциала межмолекулярного взаимодействия приводит к согласию с экспериментальной функцией радиального распределении, хотя и наблюдается некоторое расхождение (положение 1 максимума, координационное число).

Таким образом метод CNDO/2 в используемой параметризации удовлетворительно передает свойства изолированных молекул и может использоваться в качестве потенциала межмолекулярного взаимодействия особенно для систем, для которых неизвестен аналитический потенциал.