

Оптимизация геометрии наноалмазных шаров

Красноярск 2014

Выполнила
Савченко В. В.

Цель работы:

оценить связь между сжатием наноалмазных шаров и оптимизацией их структуры.

Задачи:

1. Оптимизировать геометрию наноалмазов методом молекулярной механики
2. Оптимизировать геометрию наноалмазов полуэмпирическим методом RM1

Оптимизация геометрии

Это поиск точки локального минимума энергии, т.е. точки, где $\frac{\partial E}{\partial r_\alpha} = 0$

неотъемлемая часть всех квантовохимических пакетов, так как если достигнуто самосогласование, то $\frac{\partial E}{\partial P_{\mu\nu}} = 0$

Благодаря этому все формулы сильно упростились, и время вычисления градиента стало намного меньше времени решения задачи ХФ

$P_{\mu\nu}$

матрица плотности. Физический смысл: электронная плотность на атомах и связях.

Метод молекулярной механики

-Е молекулы м. б. представлена суммой вкладов, к-рые м. б. отнесены к длинам связей, валентным углам и двугранным (торсионным) углам.

$E_{\text{вдв}}$ -ван-дер-ваальсово взаимодействие валентно не связанных атомов,

$E_{\text{кул}}$ -электростатич. взаимодействие атомов и обуславливающий наличие эффективных атомных зарядов.

$$E = E_{\text{св}} + E_{\text{вал}} + E_{\text{тор}} + E_{\text{вдв}} + E_{\text{кул}} .$$

Почему можно использовать полуэмпирические методы для этой задачи?

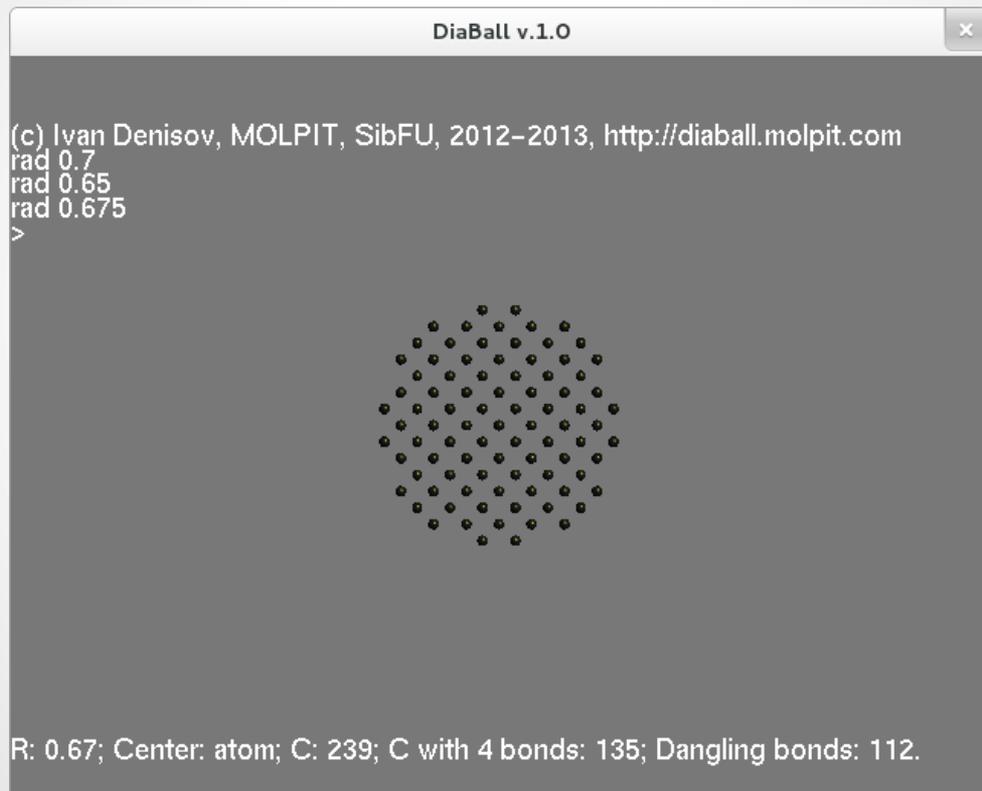
Наша задача - оптимизировать геометрию молекулы в основном состоянии.

Более того:

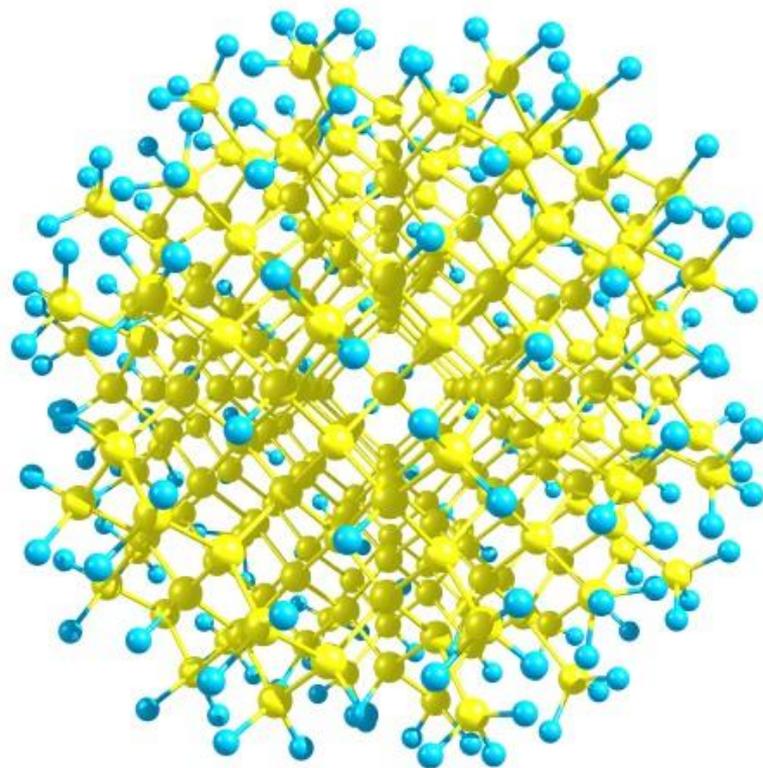
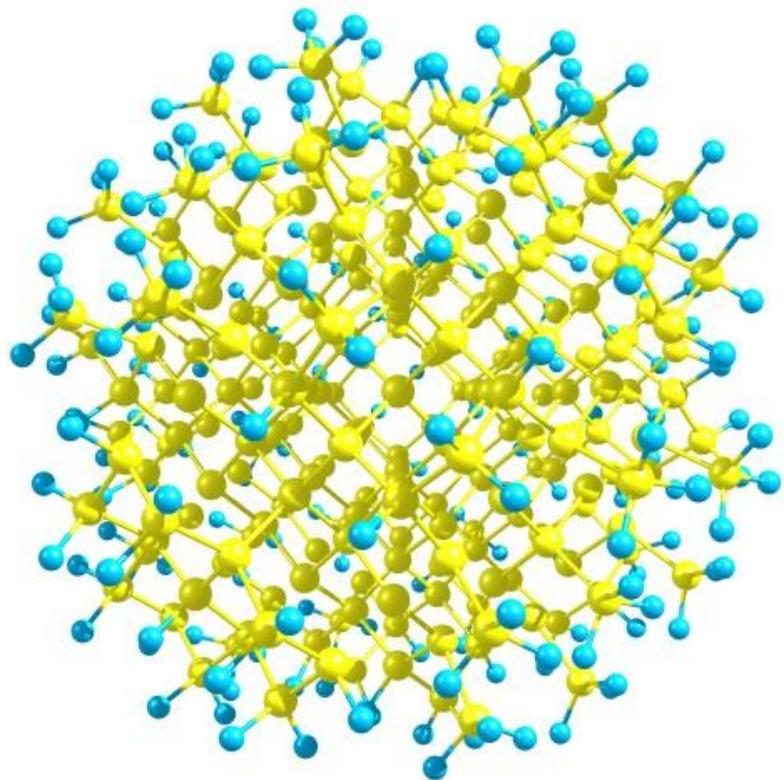
- мы работаем с углеродом, для которого полуэмпирика отлажена
- не рассматриваем возбужденные и переходные состояния
- не рассматриваем радикальные и высокоспиновые состояния

Используем метод RM1- его ошибка минимальна

Создание наноалмаза с 239 атомами углерода



Сжатие наноалмаза с 239 атомами углерода



Зависимость среднеквадратичного отклонения в Ангстремах (В) от количества атомов наноалмаза(А)

