

АНАЛИЗ СОГЛАСОВАННОСТИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОИСКА

Н.А. Коробов, Е.С. Назаренко, К.М. Назаренко, П.Н. Марков, А.Б. Надыкто

Московский Государственный Технологический Университет «СТАНКИН»
Россия, 127055, г. Москва, ул. Вадковский пер. 1,
Тел.: (+7 499)972-95-00; e-mail: cmr.nazy@gmail.com

Исследование процессов формирования молекулярных кластеров требует информации об их термодинамических свойствах. Поскольку изучаемые системы могут иметь различные конфигурации с наперед неизвестной структурой и свойствами, поиск стабильных изомеров позволяет определить компонентный состав их смеси и энергии реакций образования.

Конформационный поиск молекулярных кластеров, представляющий собой процесс многомерной оптимизации их геометрических конфигураций на основе квантово-химических моделей строения, является вычислительно сложной задачей. От его детальности зависит точность получаемых результатов. Одним из важнейших требований к этой, проводимой в несколько этапов, процедуре [1] является одновременное завершение пакета вычислительных заданий, продиктованное необходимостью сравнения свойств получаемой группы изомеров. Число заданий, достигающее нескольких тысяч, определяется многообразием их исходных геометрий. Для выбора параметров алгоритмов, осуществляющих межуровневый переход, а также конвейерной организации конформационного поиска [2] с упреждающей обработкой заданий следующего уровня теории, требуется информация о согласованности применяемых моделей.

В результате исследования кластеров $2C_{20}H_{30}O_{12}$ и $CH_3CH_2CONH_2 \cdot 3H_2SO_4$ получены более стабильные ($\Delta G_1 = -11,81$, $\Delta G_2 = -3,87$ ккал моль⁻¹ на уровне теории PW91PW91/6-311++G(3df,3pd)) изомеры. В работе приводятся статистические данные согласованности квантово-химических методов, использованных при конформационном поиске молекулярных кластеров атмосферного происхождения.

Полученные результаты позволяют повысить эффективность исследования молекулярных кластеров за счет более рационального выполнения межуровневых переходов конформационного поиска.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 18-11-00247 от 20.04.18.

Литература.

1. Назаренко К.М. и др. Эффективные средства автоматизации математического моделирования молекулярных и наносистем. - Тезисы докладов XXIV международной конференции «Математика. Компьютер. Образование», 2017, с. 43.
2. Коробов Н.А. и др. Организация конвейерной обработки вычислительных заданий конформационного поиска. – Тезисы докладов XXVII международной конференции «Математика. Компьютер. Образование», 2020, с. 197.