

50-я научная конференция МФТИ
Факультет проблем физики и энергетики
Секция прикладной теоретической физики

УДК 539.196.3

Переяславец Л.Б.¹, Дончев А.Г.², Галкин Н.Г.², Тарасов В.И.²

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет)

² Algodign LLC

**Процедура коррекции параметров дисперсионного
взаимодействия для ароматического углерода
в квантово-механических поляризуемых
потенциалах**

Точное описание меж- и внутримолекулярных взаимодействий является залогом успеха численного моделирования биологических систем в таких задачах как моделирование двойной спирали ДНК, сворачивание белков, оценка стабильности наноструктур, предсказание биологической активности низкомолекулярных соединений и т. п. Предложенные в работе [1] квантово-механические поляризуемые потенциалы (QMPFF), принадлежат к классу неаддитивных (поляризуемых) силовых полей. В отличие от эмпирических потенциалов для параметризации QMPFF были использованы только результаты высокоуровневых квантовых расчётов малых и средних органических молекул, их димеров и мультимеров. Основу обучающей выборки при параметризации QMPFF составляют свойства вышеперечисленных систем, рассчитанные в приближении MP2. Данный метод сочетает высокую скорость расчёта, возможность рассмотрения достаточно больших молекул и их комплексов, а так же обеспечивает удовлетворительную точность воспроизведения эффектов электронных корреляций. Однако, как хорошо известно, метод MP2 существенно переоценивает интенсивность дисперсионного притяжения в комплексах ароматических соединений. Наиболее точные на сегодняшний день результаты расчётов подобных комплексов были получены в рамках метода связанных кластеров CCSD (T), который, при этом, требует несравнимо больших вычислительных ресурсов, что не позволяет применить его к системам больше чем димер бензола. Предлагается процедура перепараметризации дисперсионной компоненты ароматического углерода в QMPFF (без изменения функциональной формы) с учётом CCSD (T) поправки к энергии димеризации бензола. Найденные таким образом дисперсионные коэффициенты позволили радикально улучшить согласие с экспериментом рассчитанных плотности и энергии когезии ароматических жидкостей и кристаллов, а так же второго вириального коэффициента паров бензола.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Donchev A.G., Galkin N.G., Pereyaslavets L.B., Tarasov V.I.* Quantum mechanical polarizable force field (QMPFF): Refinement and validation of the dispersion interaction for aromatic carbon // J. Chem. Phys. — 2006. — V. 125. — P. 244107.
 2. *Donchev A.G.* Ab initio: quantum force field for simulation of nanostructures // Phys. Rev. B. — 2006. — V. 74. — P. 235401.
-

Представленная выше версия доклада является ознакомительной.

Версию доклада, предназначенную для печати,
можно найти в факультетском сборнике трудов конференции.
Электронные материалы конференции публикуются по адресу
http://www.mipt.ru/nauka/conf50/plen_sections/