

## Задание 7

Все расчеты проводить полуэмпирическим методом AM1 (Polak-Ribiere)

### Задача 1

Для указанной преподавателем молекулы рассчитать дипольный момент и энтальпию образования. Сравнить с экспериментальными данными. Записать рассчитанные и литературные данные.

(Compute – Geometry Optimization; Compute – Properties – Details)

### Задача 2

Для указанной преподавателем молекулы рассчитать сродство к протону (Affinity), равное энтальпии реакции между молекулой и протоном с образованием протонированной молекулы.

$$\text{Aff} = \Delta H_{\text{mol}} + \Delta H_{\text{H}^+} - \Delta H_{\text{molH}^+}$$

$\Delta H_{\text{H}^+}$  принять равной +367.2 ккал/моль.

- 1) До начала расчета вывести на экран заряды на атомах.
- 2) Рассчитать  $\Delta H$  образования непротонированной молекулы.
- 3) Для расчета протонированной молекулы поместить атом водорода на расстоянии ~ 5-6 Å от геометрического центра молекулы, выделить атом и приписать ему заряд +1. (Build – Set Charge). Убрать выделение. Изменить установки в Setup – Options. Провести расчет, выписать  $\Delta H$ .  
Обратить внимание на изменение зарядов на атомах.
- 4) Рассчитать сродство к протону, сравнить с экспериментальным значением.
- 5) Посмотреть 2D и 3D рисунки различных молекулярных орбиталей.  
(Compute – Orbitals)
- 6) Посмотреть 2D и 3D рисунки распределения плотности заряда и 2D и 3D Mapped рисунки распределения электростатического потенциала.  
(Compute – Plot Molecular Graphs...)

В отчете указать  $\Delta H$  непротонированной и протонированной молекулы, рассчитанное и литературное значение сродства к протону.

### Задача 3

Для молекулы формамида  $\text{CHONH}_2$  найти оптимальную геометрию, выписать значения зарядов на атомах кислорода и азота. **Посмотреть распределение (3D Mapped) электростатического потенциала.** Каково значение потенциала вблизи азота и кислорода?

Подумайте, по какому атому пойдет протонирование молекулы формамида.

Поместите протон на примерно равном расстоянии от атомов азота и кислорода (~ 4.5Å); рассчитайте оптимальную геометрию молекулярной системы. По какому пути прошло протонирование молекулы?

**Табл.1 Энтальпии образования некоторых молекул  
(экспериментальные значения)**

№	Молекула	mol	Энтальпия	Лит
1	Хлористый водород	HCl	-22.06	2
2	Бензойная к-та	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	-70.10	1
3	н-бутан	n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	-30.40	1
4	Тetraфторметан	CF <sub>4</sub>	-223.30	1
5	Бромистый водород	HBr	-10.66	2
6	Этан	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	-20.24	3
7	Пропан	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	-24.82	3
8	изобутан	изо-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	-32.15	3
9	Ацетилен	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	54.19	3
10	Этилен	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	12.50	3
11	Вода	H <sub>2</sub> O <sub>(г)</sub>	-57.80	3
12	Ацетальдегид	CH <sub>3</sub> CHO	-39.76	2
13	Серный ангидрид	SO <sub>3</sub>	-94.45	2
14	Пентан	n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	-35.00	2
15	Формальдегид	CH <sub>2</sub> O	-27.70	2
16	Метанол	CH <sub>3</sub> OH	-57.02	2
17	Бензол	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	19.82	2

[1] Stewart J. MOPAC: A Semiempirical Molecular Orbital Program J. Computer-Aided Mol.Design 4,1-105, 1990.

[2] Ф.Даниэльс, Р. Альберти Физическая химия.М.,1967.

[3] М.Ч.Карапетьянц. Введение в теорию химических процессов, М.,1970.

**Табл.2 Энтальпии протонирования некоторых молекул  
(экспериментальные значения)**

	Молекула		Средство к протону, Ккал/моль
	Непротонированная	Протонированная	
Бензол	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> <sup>+</sup>	181.3
Метан	CH <sub>4</sub>	CH <sub>5</sub> <sup>+</sup>	132.0
Метиламин	CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> -NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	214.1
Фениламин	Ph-NH <sub>2</sub>	Ph-NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	209.5
Метилцианид	CH <sub>3</sub> CN	CH <sub>3</sub> -CNH <sup>+</sup>	188.4
Вода	H <sub>2</sub> O	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>	166.5
Ацетальдегид	CH <sub>3</sub> CHO	CH <sub>3</sub> CHOH <sup>+</sup>	186.6

[1] Thiel W. Semiempirical Methods: Current Status and Perspectives. Tetrahedron, 44, 7393, 1988

[2] Dewar J.S., Dieter K.M. J.Am.Chem. Soc., 108, 8075, 1986.