

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.

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

ΔH_{H^+} принять равной +367.2 ккал/моль.

- 1) До начала расчета вывести на экран заряды на атомах.
- 2) Рассчитать ΔH 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 ΔH .
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 ΔH непротонированной и протонированной молекулы, рассчитанное и литературное значение сродства к протону.

Задача 3

Для молекулы формамида 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 ₇ H ₆ O ₂	-70.10	1
3	н-бутан	n-C ₄ H ₁₀	-30.40	1
4	Тetraфторметан	CF ₄	-223.30	1
5	Бромистый водород	HBr	-10.66	2
6	Этан	C ₂ H ₆	-20.24	3
7	Пропан	C ₃ H ₈	-24.82	3
8	изобутан	изо-C ₄ H ₁₀	-32.15	3
9	Ацетилен	C ₂ H ₂	54.19	3
10	Этилен	C ₂ H ₄	12.50	3
11	Вода	H ₂ O _(г)	-57.80	3
12	Ацетальдегид	CH ₃ CHO	-39.76	2
13	Серный ангидрид	SO ₃	-94.45	2
14	Пентан	n-C ₅ H ₁₂	-35.00	2
15	Формальдегид	CH ₂ O	-27.70	2
16	Метанол	CH ₃ OH	-57.02	2
17	Бензол	C ₆ H ₆	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 ₆ H ₆	C ₆ H ₇ ⁺	181.3
Метан	CH ₄	CH ₅ ⁺	132.0
Метиламин	CH ₃ NH ₂	CH ₃ -NH ₃ ⁺	214.1
Фениламин	Ph-NH ₂	Ph-NH ₃ ⁺	209.5
Метилцианид	CH ₃ CN	CH ₃ -CNH ⁺	188.4
Вода	H ₂ O	H ₃ O ⁺	166.5
Ацетальдегид	CH ₃ CHO	CH ₃ CHOH ⁺	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.