

Вывод. Способ построения гистограмм в программе PYTHIA 8, описанный в данной работе, является универсальным и может быть использован для исследования других элементарных частиц, таких как: W-бозоны, B-мезоны и т. д. В то же время гистограммы могут быть построены для других измеряемых величин: импульса, угла разлета частиц, псевдорapidити, что открывает широкие возможности для исследования струй при генерации протон-протонных столкновений, проводимых на LHC.

Список использованных источников:

1. Гончарова Н.Г., Ишханов Б.С., Курилик А.С. и др. Рождение и распад Z-бозонов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://nuclphys.sinp.msu.ru/zbozon/index.html>.
2. Stefan Ask, MC4BSM-2012 Tutorial: PYTHIA8, 10, 2012 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://home.thep.lu.se/~torbjorn/pythia8/bsmworksheet8162.pdf>.
3. Even Gillies, Pythia8 to HerMC to Rivet, 16, 2012 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://rivet.hepforge.org/rivet-tutorial-18x-gillies.pdf> URSS.

Чуйко В.С.

студент,

*Київський національний університет
імені Тараса Шевченка*

ВИОКРЕМЛЕННЯ ВНЕСКУ КОВАЛЕНТНИХ ЗВ'ЯЗКІВ ІЗ ПОВНОЇ ЕНЕРГІЇ ЕЛЕКТРОННОЇ ПІДСИСТЕМИ МОЛЕКУЛ

Поняття ковалентного зв'язку, сформованого двома електронами, лежить в основі використовуваної у хімії моделі будови молекул. Однак, узгодження такої моделі з фізично коректним описом електронної структури молекул, який дає квантова механіка, стає можливим тільки в рамках одного з численних наближених підходів [1]. Залежно від обраної моделі, у різний спосіб може бути оцінений і внесок того чи іншого міжатомного зв'язку до загальної енергії зв'язування молекули.

Метою даної роботи є оцінка коректності встановлених ковалентних зв'язків за методикою [2] та оцінка внеску таких зв'язків до загальної енергії зв'язування молекули. Енергії ковалентних зв'язків визначалися з умови щонайточнішої апроксимації повної енергії молекули, знайденої з

квантово-хімічних розрахунків методом MP2/def2-TZVPP, лінійною функцією:

$$E_{total} = \sum_i a^i E_j + \sum_j b^j E_{j_0} \quad (1),$$

Де a^i – кількість ковалентних зв'язків певного типу в окремій молекулі, E_j – шукана енергія міжатомного зв'язку i -го типу, b^j – кількість атомів певного виду в окремій молекулі, E_{j_0} – енергія ізольованих атомів j -го типу, а саме: -0,5 Хартрі для Н, -37,70346 Хартрі для С, -74,86895 Хартрі для О, -54,54233 Хартрі для N (1 Хартрі=27,2114 еВ).

На відміну від існуючих робіт [3], кількості ковалентних зв'язків визначалася на основі аналізу електронної структури молекул, який виконувався за методикою [2]. Таким чином, за точністю побудованої апроксимації та співставленням отриманих з неї значень ефективних енергій зв'язків із використовуваними у хімії [4] було перевірено коректність ідентифікації ковалентних зв'язків методикою [2].

Лінійна апроксимація проводилась для молекул, що склалися з атомів С, N, O, H. Дана вибірка включала в себе 1495 файлів, кожен з яких містив інформацію про окрему молекулу, зокрема її геометрію, взяту з бази PubChemQC [5]. Для здійснення апроксимації методом найменших квадратів було побудовано матрицю А, елементами якої є кількість зв'язків окремого типу в кожній молекулі. Також було побудовано матрицю В, елементами якої є кількість атомів окремого виду в кожній молекулі. Тоді, енергія зв'язку розраховувалась за формулою:

$$E_{bound} = (A^T A^{-1}) A^T (E - B a) \quad (2),$$

де E – матриця-стовпець, що містить енергію молекул, а – вектор-стовпець, елементами якого є енергія ізолюваних атомів.

У даній моделі враховано тільки енергію ковалентних зв'язків й ізолюваних атомів, але в ній відсутня енергія взаємодії ковалентно незв'язаних атомів (наприклад, кулонівська, дисперсійна). Тому очікувалося отримати дещо завищенні (за модулем) значення енергії зв'язків.

Одержані результати представлені на рис. 1 та рис. 2.

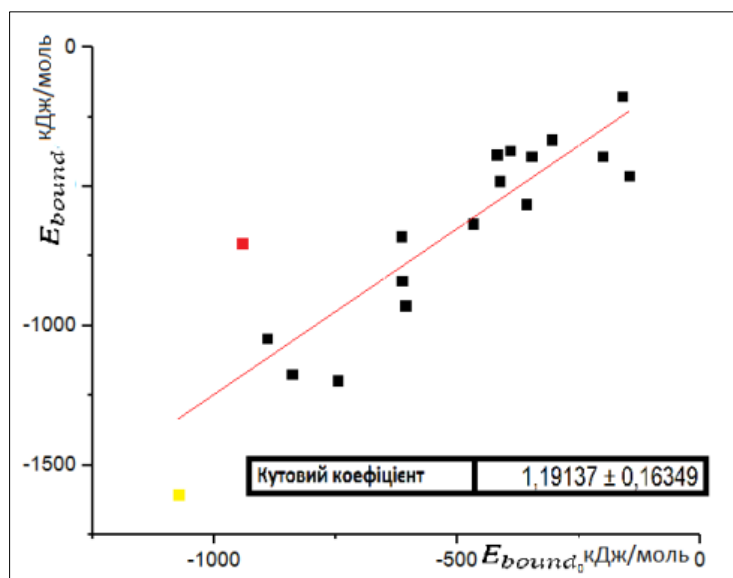


Рис. 1. Порівняння енергій зв'язків: отриманих у даній роботі (E_{bound}) та енергій (E_{bound0}), представленими у [4]

Точка жовтого кольору відповідає зв'язку N=N, а червоного – C≡O

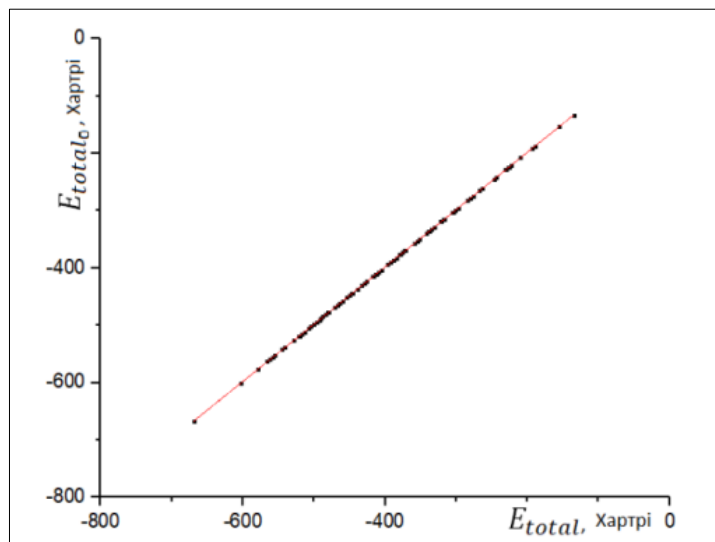


Рис. 2. Порівняння енергій молекул дослідженої вибірки: знайдених з квантово-механічних розрахунків методом MP2/def2-TZVPP (E_{total}), та одержаних з апроксимації (E_{total0}), за виразом (1)

Слід зазначити, що хоча кутовий коефіцієнт прямої, проведеної за методом найменших квадратів на рис. 1, не набуває значень 1, цей факт не означає некоректність отриманих даних, а лише підтверджує, що отримані нами значення енергій зв'язків ковалентних зв'язків дещо завищені, оскільки містять в собі долю потенціальної енергії нековалентної взаємодії атомів.

З аналізу одержаних даних випливає, що ковалентні зв'язки між атомами в початкових даних були ідентифіковані методом [2] коректно.

Список використаних джерел:

1. Gonthier J. F., Stephan N. Steinmann, M. D. Wodrich, C. Corminboeuf Chem. Soc. Rev., 41, 4671 (2012).
2. Т. Yu. Nikolaienko, L. A. Bulavin arXiv:1804.03723 [physics.chem-ph] (2018).
3. D. R. Lide CRC Handbook of Chemistry and Physics (2007).
4. [M. Nakata, T. Shimazaki J. Chem. Inf. Model 57 (6), 1300 (2017).