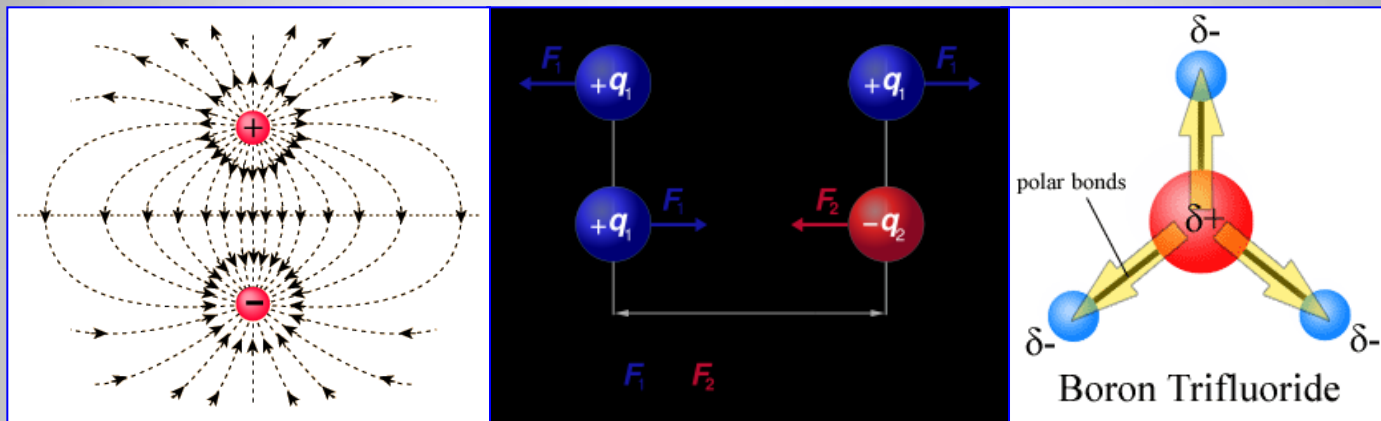


Электрические свойства атомов и малых молекул



Потенциал и напряженность электрического поля

$$E = \frac{q_1 q_2}{R} \rightarrow \varphi = \frac{q}{R}, \quad \Phi = \sum_{i=1}^N \varphi_i = \sum_{i=1}^N \frac{q_i}{R_i}$$

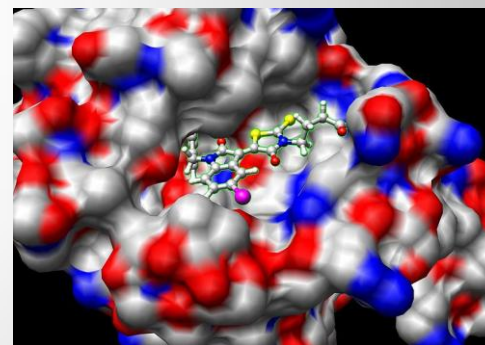
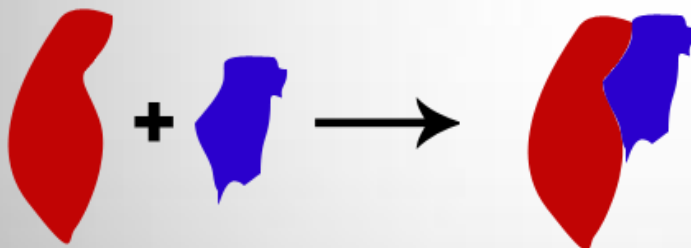
$$|\varepsilon\rangle = -\frac{\partial \varphi}{\partial R} |n\rangle, \quad \left(|n\rangle = \frac{|R\rangle}{R} \right) \rightarrow |\varepsilon\rangle = \frac{q}{R^2} |n\rangle$$

ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ФОРМА МОЛЕКУЛ

Outer Atoms	Lone Pairs	Shape	Ideal Bond Angle	Example	Image
2	0	Linear	180°	BeCl ₂	
3	0	Trigonal Planar	120°	BF ₃	
2	1	Bent	120°	SO ₂	
4	0	Tetrahedral	109.5°	CH ₄	
3	1	Trigonal Pyramidal	107.5°	NH ₃	
2	2	Bent	104.5°	H ₂ O	

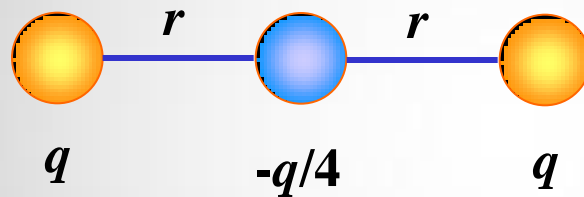
МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ

Молекулярный докинг (или молекулярная стыковка) — это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой.

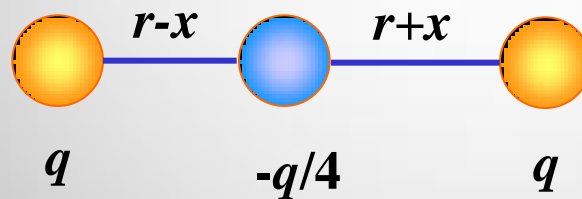


Стыковка часто используется для предсказания активности небольшой молекулы лекарства по отношению к белку-мишени

ГОМЕОПОЛЯРНАЯ ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ



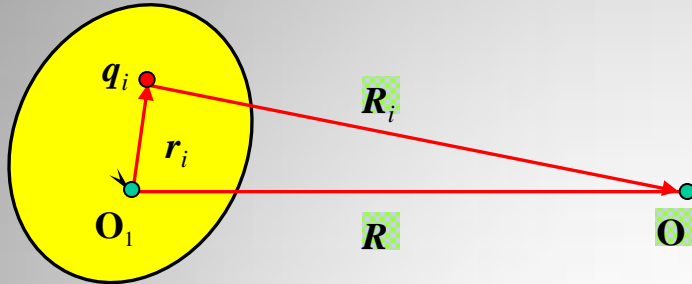
$$E = 0$$



$$E \approx -\frac{q^2 x^2}{2r^3}$$

Классическая электростатика не может правильно описать гомеоплярную химическую связь

МУЛЬТИПОЛЬНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ



$$\Phi = \sum_{i=1}^N \varphi_i = \sum_{i=1}^N \frac{q_i}{R_i}, \quad |n\rangle = \frac{|R\rangle}{R}$$

$$R_i = R \sqrt{1 - \frac{2}{R} \langle r_i | n \rangle + \frac{r_i^2}{R^2}} = R \sqrt{1 - x}$$

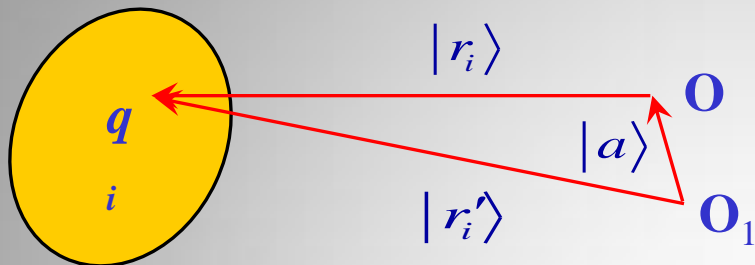
$$x \ll 1 \rightarrow \varphi_i = \frac{q_i}{R \sqrt{1-x}} = \frac{q_i}{R} \left[1 + \frac{x}{2} + \frac{3}{8} x^2 + \dots \right] = \frac{q_i}{R} \left[1 + \frac{\langle r_i | n \rangle}{R} + \frac{1}{2R^2} (3 \langle r_i | n \rangle^2 - r_i^2) + \dots \right]$$

Представление потенциала системы зарядов в виде степенного ряда по параметру $1/R$ называется мультипольным разложением

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \varphi_i = \frac{q_0}{R} + \frac{\langle p | n \rangle}{R^2} + \frac{1}{2R^3} \langle n | Q | n \rangle + \dots$$

$$q_0 = \sum_{i=1}^N q_i, \quad |p\rangle = \sum_{i=1}^N q_i |r_i\rangle, \quad Q = \sum_{i=1}^N q_i (3|r_i\rangle\langle r_i| - r_i^2)$$

Основные свойства дипольного момента



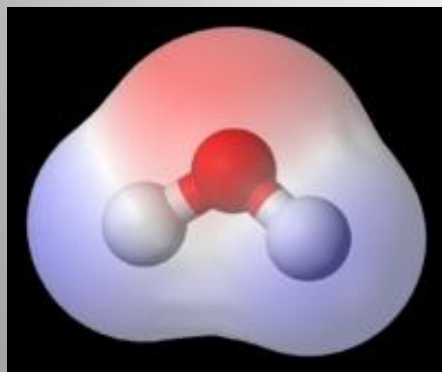
$$|p_1\rangle = \sum_{i=1}^N q_i |r_i\rangle,$$

$$|p_2\rangle = \sum_{i=1}^N q_i |r_i'\rangle = \sum_{i=1}^N q_i (|r_i\rangle + |a\rangle)$$

$$|p_2\rangle = |p_1\rangle + q_0 |a\rangle, \quad q_0 = \sum_{i=1}^N q_i$$

Дипольный момент системы зарядов не зависит от выбора начала координат, если ее полный заряд равен нулю

$$1\text{D} = 10^{-18} \text{ CGS} \approx 3.34 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}$$



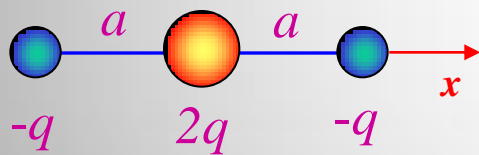
Молекула	p , (D)	Молекула	p , (D)
H_2O	1.84	H_2S	1.7
NH_3	1.48	CH_3OH	1.7
H_2O_2	2.25	CH_3CN	3.51
NO_2	0.29	$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	1.67

Основные свойства квадрупольного момента

$$Q^{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N q_i (3r_i^\alpha r_i^\beta - \delta_{\alpha\beta} r_i^2), \quad \alpha, \beta = x, y, z$$

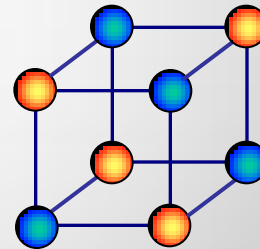
$$Q^{xx} = \sum_{i=1}^N q_i (2x_i^2 - y_i^2 - z_i^2), \quad Q^{xy} = 3 \sum_{i=1}^N q_i x_i y_i, \quad Q^{xx} + Q^{yy} + Q^{zz} = 0$$

Квадрупольный момент системы зарядов не зависит от выбора начала координат, если ее полный заряд и дипольный момент одновременно равны нулю

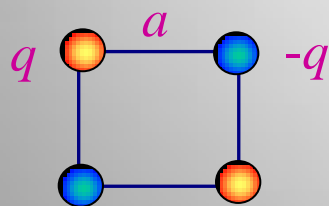


$$Q^{xx} = -4qa^2$$

$$Q^{xy} = Q^{xz} = 0$$

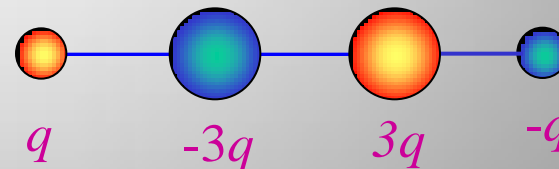


$$Q^{\alpha\beta} = 0$$



$$Q^{xx} = Q^{yy} = 0$$

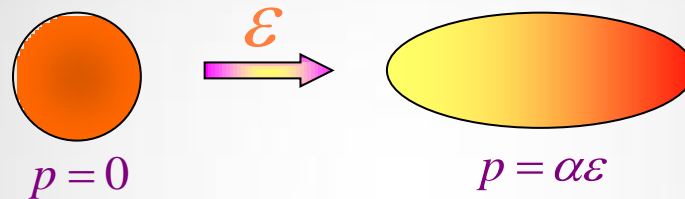
$$Q^{xy} = -3qa^2$$



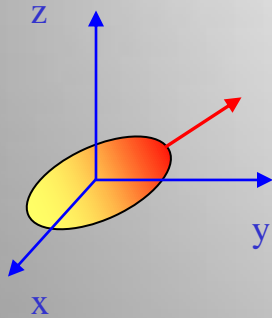
Поляризуемость

$$E = E_0 + \left(\frac{dE}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=0} \varepsilon + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2E}{d\varepsilon^2} \right)_{\varepsilon=0} \varepsilon^2 + \dots = E_0 - p\varepsilon - \frac{1}{2} \alpha \varepsilon^2 + \dots$$

Деформационная поляризуемость



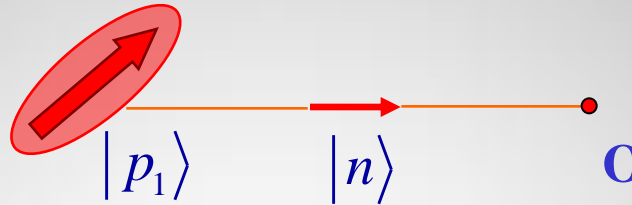
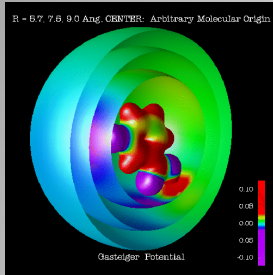
Ориентационная поляризуемость



$$\langle P \rangle = \frac{pN_p - pN_{-p}}{N_p + N_{-p}} \quad \longrightarrow \quad \langle p \rangle = \frac{\exp\left(\frac{p\varepsilon}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{p\varepsilon}{kT}\right)}{\exp\left(\frac{p\varepsilon}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{p\varepsilon}{kT}\right)} p,$$

$$p\varepsilon \ll kT \quad \longrightarrow \quad \langle p \rangle = \frac{p^2}{kT} \varepsilon \quad \langle p \rangle = \frac{p^2}{3kT} \varepsilon = \alpha_{or} \varepsilon$$

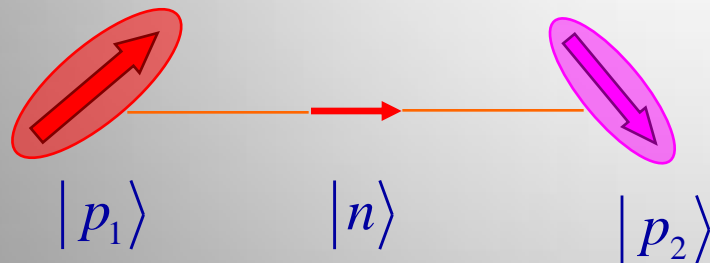
Взаимодействие точечных диполей



$$|\epsilon\rangle = -\text{grad} \left(\frac{\langle p|n\rangle}{R^2} \right) = -\text{grad} \left(\frac{\langle p|R\rangle}{R^3} \right) \rightarrow |\epsilon\rangle = -\frac{|p\rangle}{R^3} + 3\langle p|n\rangle \left(\frac{1}{R^3} \right) |n\rangle$$

$$\text{grad}(f) = \frac{\partial f}{\partial x} |i\rangle + \frac{\partial f}{\partial y} |j\rangle + \frac{\partial f}{\partial z} |k\rangle = \frac{df}{dR} |n\rangle$$

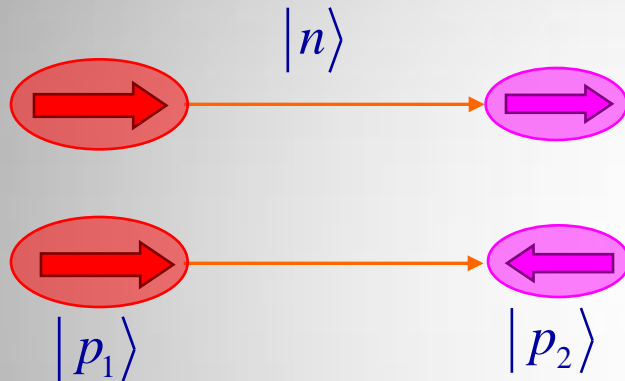
Энергия второго диполя в поле первого диполя $E = -\langle p_2 | \epsilon_1 \rangle$



$$E = \frac{\langle p_1 | p_2 \rangle - 3\langle p_1 | n \rangle \langle p_2 | n \rangle}{R^3}$$

Ориентационное взаимодействие полярных молекул

$$E = \frac{\langle p_1 | p_2 \rangle - 3 \langle p_1 | n \rangle \langle p_2 | n \rangle}{R^3}$$



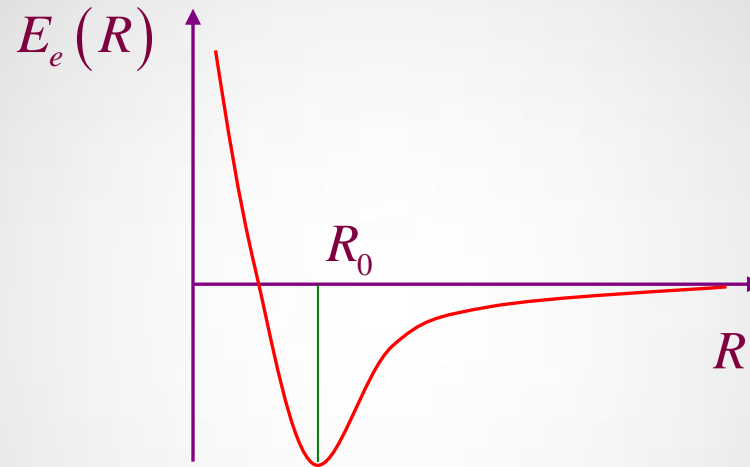
$$E_{1,2} = \pm \frac{2p_1 p_2}{R^3}$$

$$\langle E \rangle = \frac{E_1 N_1 + E_2 N_2}{N_1 + N_2}$$

$$\langle E \rangle = -E_1 \frac{\exp(\frac{E_1}{kT}) - \exp(-\frac{E_1}{kT})}{\exp(\frac{E_1}{kT}) + \exp(-\frac{E_1}{kT})} \quad \rightarrow \quad \langle E \rangle = -\frac{4p_1^2 p_2^2}{kT} \times \frac{1}{R^6}$$

Межмолекулярные взаимодействия

Потенциал Леннарда-Джонса



$$E = \frac{A}{R^{12}} - \frac{B}{R^6} = 4\Delta \left(\left(\frac{r}{R} \right)^{12} - \left(\frac{r}{R} \right)^6 \right)$$

$$R = r \rightarrow E = 0, \quad E_{\min} = -\Delta$$