

Зависимость энергии взаимодействия в системе трех органических нейтральных молекул от их структуры и взаимной индукции.

В. В. Комаров,¹ А. М. Попова,^{1,а} Л. Шмидт,² Х. Юнгклас^{2,б}

¹ Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова.
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына.
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, к. 19.

² Филиппс-университет, химический факультет. D-06421, Марбург, Германия.

Статья поступила 20.07.2017, подписана в печать 27.11.2017.

Предложен метод анализа энергий взаимодействий трех нейтральных углеводородных молекул, содержащих двойные углерод-углеродные связи. Предполагается, что одна из молекул (пентен) имеет дипольный момент, две другие молекулы (ароматические) не имеют дипольного момента. Молекулы объединены в трехмолекулярный нанокластер дальнедействующими дисперсионным и индукционным взаимодействиями с учетом кулоновского отталкивания на малых расстояниях. В предлагаемом методе получены аналитические выражения для расчета дисперсионной и индукционной энергий. В этих выражениях на единой основе учитывается кулоновское отталкивание на малых расстояниях между каждой парой молекул, что оказалось возможным благодаря особым зарядовым свойствам двойных связей в рассматриваемых молекулах, приводящих к остаточным положительным зарядам на атомах углерода в этих связях. Расчеты показали, что в рассматриваемом трехмолекулярном нанокластере минимум суммарной энергии достигается при относительных расстояниях между каждой парой молекул меньших, чем расстояния в соответствующих изолированных двухмолекулярных нанокластерах.

Ключевые слова: многомолекулярные нанокластеры, межмолекулярные взаимодействия, индукционные процессы.

УДК: 539.19, 539.2. PACS: 34.10.+x, 36.40.+c.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время возрос интерес к экспериментальному и теоретическому исследованиям межмолекулярных взаимодействий, в особенности к энергии взаимодействия двух молекул, образующих нанокластер силами Ван-дер-Ваальса [1–6]. Интерес к этим исследованиям объясняется тем, что такие кластеры являются основными элементами в нанокристаллах и аморфных наночастицах, используемых в современной электронике, медицине, фармакологии и многих других отраслях. Исследования энергии межмолекулярного взаимодействия проводились в основном для систем нейтральных молекул, не имеющих дипольных моментов. Такая постановка задачи означала, что взаимодействие молекул определяется дисперсионными дальнедействующими силами Ван-дер-Ваальса на расстояниях R между молекулами при условии $R \geq R_0$. Здесь R_0 есть сумма радиусов Ван-дер-Ваальса молекул, участвующих во взаимодействии. Кулоновское отталкивание взаимодействующих молекул на малых расстояниях учитывалось умножением рассчитанной энергии дисперсионного взаимодействия на демпфирующую функцию, вид которой подбирался на основании условий ее минимального значения при $R = 0$, и ее равенством единице при $R > R_0$ [5]. Кроме того, требовалось, чтобы произведение функции дисперси-

онной энергии на демпфирующую функцию имело минимум при $R = R_0$.

Ранее мы провели исследование энергии взаимодействия трех молекул, образующих нанокластер [7–12]. В этих работах предполагалось, что молекулы нейтральны и одна из них имеет дипольный момент. Расчетная энергия взаимодействия каждой пары молекул предполагалась дисперсионной с учетом кулоновского отталкивания введением демпфирующей функции. В этих работах были проведены расчеты индукционной энергии молекул. Для этого нами был развит метод определения индуцированных дипольных моментов, учитывающий процесс взаимной индукции молекул. В рамках этого метода были получены аналитические выражения для расчета индуцированных дипольных моментов и индукционных энергий для каждой молекулы. Для учета влияния кулоновского поля каждой молекулы на поле ее дипольного момента был развит метод определения демпфирующей функции, аналогичный методу получения этой функции, учитывающей силы отталкивания при расчете дисперсионной энергии.

В настоящей работе предлагается новый метод анализа энергии взаимодействия в нанокластере, состоящем из трех и более молекул, относящихся к углеводородам с двойными углерод-углеродными связями, в предположении, что все молекулы нейтральны и одна из них имеет дипольный момент. Главной особенностью предлагаемого метода является отказ от построения демпфирующей функции для учета сил

^а E-mail: am.popowa@yandex.ru

^б E-mail: jungclas.staff@uni_marburg.de

отталкивания между молекулами на малых межмолекулярных расстояниях. Вместо этого предлагается рассматривать роль положительных зарядов на атомах углерода в группах (C=C) с двойными связями [4, 6, 7]. Эти заряды обусловлены структурными свойствами указанных двойных связей.

Отметим, что в молекулярном нанокластере при условии, что одна из молекул имеет дипольный момент, а остальные нейтральны, энергия межмолекулярных взаимодействий зависит от числа молекул. В трех- и более молекулярном нанокластере энергии дисперсионного и кулоновского взаимодействий определяются всеми возможными двухмолекулярными взаимодействиями (взаимодействие молекулярных пар), индукционные энергии каждой молекулы в этом нанокластере, в отличие от двухмолекулярного, существенно многочастичны, т.к. каждая молекула индуцируется электростатическими полями окружающих молекул, составляющих нанокластер.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ ТРЕХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ МОЛЕКУЛ С ДВОЙНЫМИ СВЯЗЯМИ ВИДА (–CH=CH–)

Рассматривается система трех углеводородных молекул: M_1 , M_2 и M_3 . Предполагается, что M_1 — молекула пентена C_5H_{10} , относящаяся к этиленовому ряду углеводородных молекул. Эта молекула имеет структурную формулу $(CH_3-CH_2-CH=CH-CH_3)$ с углерод-углеродной двойной связью (–CH=CH–) расположенной на плоскости. Молекула пентена имеет дипольный момент $\mu = 0.6 D$. Молекулы M_2 и M_3 — ароматические молекулы пирена $C_{16}H_{10}$.

Молекула пентена содержит этиленовую группу (–CH=CH–), расположенную на плоскости. Одной из двойных связей является σ -связь, образованная двумя электронами, по одному от каждого углерода, вторая связь, π -связь, образованная двумя электронами, также по одному от каждого углерода. При этом σ -связь в (C=C)-группе этой молекулы лежит в плоскости этиленовой группы, в то время как π -связь, состоящая из двух π -электронов, расположена в плоскости, перпендикулярной к плоскости этиленовой группы. Такое различие в пространственном расположении π -электронов и σ -электронов допускает их независимое рассмотрение при расчете положительных зарядов атомов углерода, образующих двойную связь. Физические свойства π -электронов в этиленовой группе с двойными связями, содержащихся в молекуле пентена, как показано в [3, 13], могут быть рассмотрены на основе квантово-механической модели «плоского потенциального ящика» с основанием, равным длине этиленовой связи L_1 и бесконечно высокими стенками. Рассмотрим группу (C₁=C₂). Поскольку два π -электрона, образующие π -связь в этой группе, тож-

дественны, достаточно рассмотреть свойства одного π -электрона, относящегося к атому C₁, при этом основание этого ящика совпадает с осью x и атом углерода C₁ расположен в точке $x = 0$, а атом C₂ расположен в точке $x = L_1$. В этом потенциальном ящике невозмущенные π -электроны имеют нулевую потенциальную энергию. Волновая функция $\Psi(x)$ свободного движения π -электрона вдоль дна «ящика» определяется уравнением Шрёдингера для нулевого потенциала и имеет вид

$$\Psi(x) = (2/L_1)^{1/2} \cdot \sin(\pi n x / L_1),$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ — квантовое число, x — переменная вдоль длины дна «ящика», измеряемая в долях L_1 . Плотность вероятности $\rho_1(x_1, x_2)$ найти π -электрон на L_1 между точками x_1 и x_2 определяется уравнением

$$\begin{aligned} \rho_1(x_1, x_2) &= (2/L_1) \int_{x_1}^{x_2} \sin(2\pi x / L_1) dx = \\ &= [(x_2 - x_1) / L_1] - \\ &- (2\pi)^{-1} [\sin(2\pi x_2 / L_1) - \sin(2\pi x_1 / L_1)]. \quad (1) \end{aligned}$$

Как показано в [3, 4], значение функции $\rho_1(x_1, x_2)$ можно рассматривать как значение отрицательного заряда, создаваемого π -электроном и сосредоточенного в некоторой области между точками x_2 и x_1 . Величина заряда измеряется в долях электрона [4].

Анализ функции $\rho_1(x_1, x_2)$ показал, что π -электрон может находиться в середине π -связи на отрезке между точками $x_1 = 0.2 L_1$, $x_2 = 0.8 L_1$ и значение $\rho_1(x_1, x_2) = 0.97 L_1$, что соответствует отрицательному заряду qe , создаваемому π -электроном в указанной области. Отсюда следует, что на ядре углерода C₁ в рассматриваемой двойной связи пентена (C₁=C₂) вместо положительного заряда $Qe^+ = 1e^+$, возникшего после выделения одного электрона на образование π -связи, остается заряд Qe^+ , равный $0.03e^+$. На ядре углерода C₂ в двойной связи пентена также остается заряд $Qe^+ = 0.03e^+$ из-за тождественности π -электронов.

Конденсированные ароматические молекулы пирена M_1 и M_2 содержат замкнутую последовательность сопряженных связей (–CH=CH–CH–). Каждое ядро углерода выделяет два электрона для образования σ -связей с соседними ядрами углеродов и один электрон для образования π -электрона [3], физические свойства которого могут быть рассмотрены на основе квантовой модели потенциального ящика, дно которого равно сумме связей, находящихся слева и справа от ядра, образующего π -электрон. Проводя рассуждения, аналогичные приведенным выше для свойств π -электронов пентена, можно показать, что с наибольшей вероятностью π -электрон пирена находится в окрестности центра дна ящика, т.е. в окрестности ядра углерода. Его заряд равен $qe = 0.97e$, остаточный заряд ядра углерода $Qe^+ = 0.03e^+$.

2. ЭНЕРГИИ ДИСПЕРСИОННОГО И ИНДУКЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ТРЕХМОЛЕКУЛЯРНОМ НАНОКЛАСТЕРЕ, СОДЕРЖАЩЕМ НЕНАСЫЩЕННЫЕ УГЛЕВОДОРОДЫ

Рассматривается трехмолекулярный нанокластер, состоящий из нейтральных углеводородных молекул, одна из которых, пентен (M_1), C_5H_6 , имеет дипольный момент. Две другие молекулы, ароматические молекулы пирена (M_2 и M_3), $C_{16}H_{10}$, не имеют дипольных моментов. В этой геометрии центры масс всех трех молекул расположены на одной оси и постоянный дипольный момент D_1 молекулы (M_1) направлен вдоль этой оси. Расстояние между молекулами M_1 и M_2 и M_2 и M_3 обозначим как R и R_d соответственно. При этом плоскости ароматических молекул параллельны и ось, где расположены центры масс молекул, перпендикулярна плоскости ароматических молекул. Энергия взаимодействия молекул $E(1, 2, 3)$ в таком нанокластере имеет вид [14, 15]

$$E(1, 2, 3) = \sum_{\substack{i,j=1,2,3; \\ i \neq j}} [E_{\text{dis}}(M_i, M_j) + E^c(M_i, M_j)] + \sum_{i=1,2,3} E_{\text{ind}}^c(M_i), \quad (2)$$

где $E_{\text{dis}}(M_i, M_j)$ является дисперсионной энергией дальнегодействующего взаимодействия молекул M_i и M_j , $E^c(M_i, M_j)$ — энергия кулоновского отталкивания молекул M_i и (M_j) на малых расстояниях. Следующие три слагаемых в (2) представляют собой индукционные энергии каждой молекулы, полученные как результат действия полей индуцированных дипольных моментов и остаточных зарядов окружающих молекул. Энергия дисперсионного взаимодействия $E_{\text{dis}}(M_i, M_j)$ имеет вид [5]

$$E_{\text{dis}}(M_i, M_j) = C_6(M_i, M_j)/R_{ij}^6, \quad (3)$$

где R_{ij}^6 — расстояние между центрами масс молекул M_i и M_j . $C_6(M_i, M_j) = (3/2)\alpha_i\alpha_j \cdot J_i J_j / (J_i + J_j)$.

Функция $C_6(M_i, M_j)$ зависит от средних значений коэффициентов поляризации молекул α_i и α_j . Параметры поляризации показывают степень сдвига центра масс объема электронного облака молекул под действием электростатического поля. Величина параметров поляризации зависит от числа атомов в молекуле, определяя степень индукции дипольных молекул. В свою очередь, роль индукционных взаимодействий возрастает с числом молекул в нанокластере и с числом атомов в этих молекулах. J_i и J_j , как следует из работы [5], можно выбрать в виде $J_i = 10.4 \cdot (N_i/\alpha_i)^{1/2}$ eV, где N_i — число валентных электронов в молекуле (i). Вклад кулоновской энергии в дисперсионную энергию (1) имеет вид

$$E_{\text{dis}}^c(M_i, M_j) = A_{ij} \exp(-a_{ij} R_{ij}).$$

Параметры A_{ij} и a_{ij} могут быть найдены из условия минимума функции дисперсионной энергии $[E_{\text{dis}}(M_i, M_j) + E^c(M_i, M_j)]$ в системе двух молекул (M_i, M_j) при $R_{ij} = R_{0,ij}$. Математически это условие выражается равенством нулю суммы первых производных $E_{\text{dis}}(M_i, M_j)$ и $E_{\text{dis}}^c(M_i, M_j)$ при $R_{ij} = R_{0,ij}$. Отсюда следует уравнение для A_{ij} вида

$$A_{ij}(R_{ij}) = [6(C_6/R_{0,ij}^7)/a_{ij}] \cdot \exp(a_{ij} R_{0,ij}).$$

Соответственно вклад кулоновской энергии отталкивания в формуле (2) для дисперсионной энергии взаимодействия двух молекул имеет вид

$$E^c(M_i, M_j) = [6(C_6/R_{0,ij}^7)/a_{ij}] \cdot \exp(-a_{ij} R_{0,ij}). \quad (4)$$

Значение параметра a_{ij} может быть найдено из условия равенства энергии кулоновского взаимодействия двух молекул M_i и M_j , найденной на основе уравнения Борна–Майера (4) при $R_{ij} = R_{0,ij}$, и из уравнения электростатики вида $E_{\text{dis}}^c(R_{0,ij}) = Q_i e \cdot Q_j e / R_{0,ij}$, где $Q_i e$ и $Q_j e$ — суммы остаточных зарядов атомов углерода в двойных связях в молекулах M_i и M_j . Отсюда

$$a_{ij} = [6(C_6/R_{0,ij}^7)]/[Q_i e \cdot Q_j e / R_{0,ij}].$$

Как было показано в [10], функции индукционной энергии каждой молекулы — M_1, M_2 и M_3 в рассматриваемом трехмолекулярном нанокластере имеют вид [11, 12]

$$\begin{aligned} E_{\text{ind}}(M_1) &= \alpha_1 [P_2(R) + P_3(R + R_d)]^2, \\ E_{\text{ind}}(M_2) &= \alpha_2 [P_1(R) + P_3(R_d)]^2, \\ E_{\text{ind}}(M_3) &= \alpha_3 [P_2(R) + P_1(R + R_d)]^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь функция P_j — интенсивность электростатического поля в центре масс молекулы (i), $i = 1, 2, 3$, на расстоянии R_{ij} от центра масс молекулы (j). Эти функции имеют вид

$$P_j(R_{ij}) = -2D_j/R_{ij}^3 + P_j^c(R_{ij}), \quad (6)$$

где D_j — сумма индуцированного и перманентного (если имеется) дипольных моментов молекул в трехмолекулярном нанокластере [9, 10]. Второе слагаемое в (6) определяется уравнением

$$P_j^c(R_{ij}) = -B_{ij} \cdot \exp(-b_{ij} R_{ij}). \quad (7)$$

Параметры B_{ij} и b_{ij} в функции Борна–Майера (7) определяют интенсивность поля, создаваемого остаточными зарядами $Q_j e^+$ атомов углерода в двойных связях молекулы M_j на расстоянии R_{ij} от центра масс молекулы M_i , и определяются методом, предложенным в [13]: $B_{ij} = (2Q_i e)^2/a_0^2 + Q_i e/R_{ij}^2 + Q_i e \cdot b_i/R_{ij}$; $b_i = 2Q_i/a_0$, где a_0 — радиус Бора. В окрестностях положительного заряда $Q_i e^+$ появляется электронное облако с плотностью распределенного заряда $\rho_i = (Q_i^3 e/\pi) \cdot \exp(2Q_i/a_0) R_{ij}$. Используя эту

функцию, на основе уравнения Пуассона можно получить значение электростатического потенциала от заряда $Q_i e$ на расстоянии R_{ij} и поля, создаваемого этим зарядом. В предложенном методе демпфирующая функция для дисперсионной энергии [16, 17] может быть получена на основе формул (3), (4) в виде $F = 1 - E^c(M_i, M_j)/E_{\text{dis}}(M_i, M_j)$.

3. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Приведем результаты расчетов величины энергии межмолекулярных взаимодействий $E(1, 2, 3)$ в трехмолекулярном нанокластере, содержащем нейтральную молекулу пентена M_1 с постоянным дипольным моментом $\mu = 0.6 D$ и две нейтральные молекулы пирена M_2 и M_3 , не имеющие дипольных моментов, уравнение (2). Сумма дисперсионных энергий рассчитывается по формуле (3) с использованием уравнения Борна–Майера и формулы Лондона. Были взяты следующие значения параметров: $\alpha_1 = 12 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3$, $\alpha_2 = \alpha_3 = 24 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3$; $J_1 = 10 \text{ эВ}$, $J_2 = J_3 = 8.7 \text{ эВ}$, [5, 12]. Величины зарядов Q^+ для расчетов кулоновских энергий в углеводородных молекулах с двойными углерод-углеродными связями (C=C) взяты из квантовой теории химических реакций [6]. Рассчитанная сумма дисперсионных энергий, включая кулоновские энергии в зависимости от межмолекулярных расстояний R в интервале 2.75 – 4.5 Å, приведена на рисунке (кривая 1). Индукционные энергии рассчитывались по формуле (5), причем значения индуцированных дипольных моментов $D_{\text{ind}}(M_1)$, $D_{\text{ind}}(M_2)$ и $D_{\text{ind}}(M_3)$ в зависимости от R были взяты из работ [10, 11]. Значения зарядов Q_1 , Q_2 и Q_3 рассмотрены в разд. 2 настоящей работы. Суммарные значе-

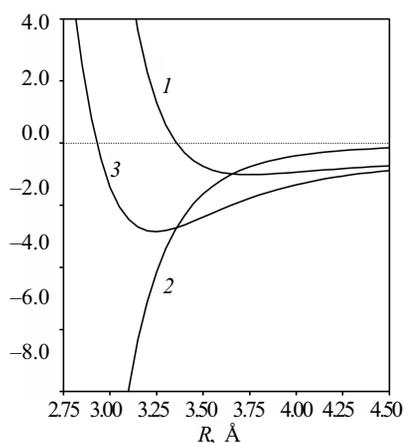


Рисунок. Расчитанные энергии молекулярных взаимодействий (эВ) в трехмолекулярном нанокластере, состоящем из молекулы пентена и двух молекул пирена, в зависимости от межмолекулярных расстояний $R(\text{Å})$. Сумма дисперсионной и кулоновской энергий — кривая 1, индукционная энергия — кривая 2 и суммарная энергия всех возможных взаимодействий — кривая 3.

ния индукционных энергий представлены на рисунке (кривая 2). Суммарная энергия межмолекулярного взаимодействия в рассматриваемом трехмолекулярном нанокластере в зависимости от межмолекулярного расстояния представлена на рисунке кривой 3. Численный анализ показал, что в рассматриваемом трехмолекулярном нанокластере заданной конфигурации минимум суммарной энергии достигается при расстоянии между пиреном M_2 и пентеном M_1 , равным 3.24 Å. В то время как соответствующее расстояние в изолированном двухмолекулярном нанокластере, содержащем пентен и пирен, равно 3.75 Å.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложен метод анализа энергии взаимодействия трех нейтральных углеводородных молекул, объединенных в нанокластер дальнедействующими двухчастичными силами Ван-дер-Ваальса с учетом кулоновских сил отталкивания взаимодействия на больших и на малых расстояниях. Энергия взаимодействия двух молекул в рассматриваемом нанокластере на больших расстояниях является дисперсионной, рассчитываемой во втором приближении теории возмущений. Для учета кулоновского взаимодействия применяется метод демпфирующей функции, вид которой подбирается феноменологически. В нашем методе к энергии дисперсионного взаимодействия предлагается добавлять энергию кулоновского взаимодействия рассматриваемых молекул, расчет которой основан на особых зарядовых свойствах атомов углерода в двойных связях (C=C). Одна из этих связей образована π -электронами. Эти свойства состоят в том, что на атомах углерода в указанных связях возникают остаточные заряды, величины которых составляют сотые доли величины электронного заряда. Это позволило рассчитывать кулоновскую энергию, которая в сумме с дисперсионной энергией составляет межмолекулярную энергию взаимодействия. Предложенный метод позволяет рассчитать интенсивности кулоновских полей для каждой молекулы исследуемого нанокластера. Таким образом определяется интенсивность электростатического поля каждой молекулы, являющегося суммой интенсивностей поля индуцированного дипольного момента и указанного выше кулоновского поля. Для каждой молекулы на основании полученных аналитических выражений возможен расчет индукционных энергий этих молекул. Полная энергия межмолекулярного взаимодействия в рассматриваемом нанокластере является суммой, полученной на единой основе дисперсионной и кулоновской энергии, для всех пар молекул, и суммой индукционной энергии всех молекул. В рассматриваемых кластерах индуцированные дипольные моменты, как было показано в наших работах, играют важную роль в индукционных процессах, давая существенный вклад в индукционную энер-

гию молекул, сравнимую с дисперсионной энергией. В результате показано, что суммарная потенциальная энергия в трехмолекулярном нанокластере уменьшает межмолекулярные расстояния в сравнении с подобными расстояниями в двухмолекулярных системах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kaplan G.* Intermolecular Interactions: Physical Pictures, Computational Methods and Model Potentials. Wiley, New York, 2006.
2. *Laage D., Stirnemann G., Sterpone F.* et al. // *Annu. Rev. Phys. Chem.* 2011. **62**. P. 395
3. *Волькенштейн М.В.* Строение и физические свойства молекул. Изд. АН СССР, 1955.
4. *Цирельсон В.Г.* Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Изд. БИНОМ, 2010.
5. *Stone A.J.* The Theory of Intermolecular Forces. Clarendon Press, London, 1996.
6. *Рейтов О.А.* Теоретические проблемы органической химии. Изд. МГУ, 1956.
7. *Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Jungclas H.Z.* // *Naturf.* 2013. **68a**. P. 310.
8. *Комаров В.В., Попова А.М., Стурейко И.О.* и др. // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* 2013. № 5. С. 3. (*Komarov V.V., Popova A.M., Stureiko O.* et al. // *Moscow Univ. Phys. Bull.* 2013. **68**, N 5. P. 339.)
9. *Комаров В.В., Попова А.М., Шмидт Л., Юнглас Х.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* 2015. № 2. С. 38. (*Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Jungclas H.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* 2015. **70**, N 2. P. 113.)
10. *Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Jungclas H.* // *Z. Naturf.* 2015. **70a**. P. 995.
11. *Комаров В.В., Попова А.М., Шмидт Л., Юнглас Х.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* 2016. № 5. С. 14. (*Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Jungclas H.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* 2016. **71**, N 5. P. 476.)
12. *Komarov V.V., Popova A.M., Schmidt L., Jungclas H.* // *Z. Naturf.* 2017. **72a**. P. 17.
13. *Atkins P.W.* Molecular Quantum Mechanics. Oxford University Press, 1982.
14. *Angyan J.G., Jansen G., Loos M.* et al. // *Chem. Phys. Lett.* 1994. **219**. P. 267.
15. *Jeziorski B., Moszynski R., Szalewicz K.* // *Chem. Rev.* 1994. **94**. P. 1887.
16. *Knowles P.J., Meath W.J.* // *Molec. Phys.* **60**. P. 1143.
17. *Le Sueur C.R., Stone A.J.* // *Molec. Phys.* 1994. **83**. P. 293.

Interaction Energies in Systems of Three Organic Molecules versus their Structures and Mutual Induction

V. V. Komarov¹, A. M. Popova^{1,a}, L. Schmidt², H. Jungclas^{2,b}

¹*Lomonosov Moscow State University, Skobeltzin Institute of Nuclear Physics. Moscow 119992, Russia.*

²*Chemistry Department Philipps Universit. Marburg, D-35032, Germany.*

E-mail: ^aam.popowa@yandex.ru, ^bjungclas.staff@uni_marburg.de.

A method of analysis interaction energies in three-molecular nanocluster containing hydrocarbon molecules with double carbon-carbon bonds is presented. One of the molecule (pentene) has dipole moment, others (aromatic molecules) has no dipole moments. The molecules in the considered nanocluster are bounded by long-range dispersion and induction forces with Coulomb repulsive forces at short intermolecular distances. Analytical expressions for calculations of intermolecular forces versus intermolecular distances were obtained in the frame of the presented method with Coulomb repulsive taking into account. By this, specific charge properties of the double bonds, which leads to the rest positive charges of the carbon atoms, were considered. It was shown, that the summing interaction energies reached their minimum by smaller intermolecular distances in the considered three-molecular hydrocarbon nanocluster comparing to the two-molecular isolated nanocluster consisted from the same molecules

Keywords: multimolecular nanoclusters, intermolecular interactions, induction processes

PACS: 34.10.+x, 36.40.+c.

Received 20 July 2017.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2018. **73**, No. 4. Pp. 372–376.

Сведения об авторах

1. Комаров Вячеслав Викторович — доктор физ-мат. наук, профессор, вед. науч. сотрудник; e-mail: am.popowa@yandex.ru.
2. Попова Анна Михайловна — доктор физ-мат. наук, профессор, вед. науч. сотрудник; e-mail: am.popowa@yandex.ru.
3. Шмидт Лотар — доктор, сотрудник химического факультета Филиппс-университета; e-mail: jungclas.staff@uni_marburg.de.
4. Юнглас Хартмут — доктор, профессор, сотрудник химического факультета Филиппс-университета; e-mail: jungclas.staff@uni_marburg.de.