

Российская академия наук  
Институт проблем химической физики РАН  
Московский государственный университет  
Кабардино-Балкарский научный центр РАН

**ПРОГРАММА И ТЕЗИСЫ**  
**X Национальной кристаллохимической**  
**конференции**

Приэльбрусье, 5-9 июля 2021 г.

Конференция проводится при финансовой поддержке:



Института проблем химической физики РАН



ООО «Брукер», Bruker AXS



TechnoInfo Ltd



Conetech Ltd

Информационный партнер конференции:



Журнал структурной химии

### Организационный комитет

- Алдошин Сергей Михайлович — председатель, ИПХФ РАН, академик
- Хромова Елена Сергеевна — ученый секретарь, ИПХФ РАН
- Антипов Евгений Викторович, МГУ, член-корреспондент РАН
- Асланов Леонид Александрович, МГУ, профессор
- Балагуров Анатолий Михайлович, ОИЯИ, профессор
- Блатов Владислав Анатольевич, Самарский университет, профессор
- Болдырева Елена Владимировна, НГУ, профессор
- Еременко Игорь Леонидович, ИОНХ РАН, академик
- Кривовичев Сергей Владимирович, СПбГУ, член-корреспондент РАН
- Кукушкин Вадим Юрьевич, СПбГУ, академик
- Лысенко Константин Александрович, МГУ, д.х.н., профессор РАН
- Минкин Владимир Исаакович, ЮНЦ, академик
- Сержкин Виктор Николаевич, Самарский университет, профессор
- Федин Владимир Петрович ИИХ СО РАН, член-корреспондент РАН
- Филатов Станислав Константинович, СПбГУ, профессор
- Цирельсон Владимир Григорьевич, РХТУ им. Д.И. Менделеева, профессор

**СТРУКТУРНЫЕ ГРУППЫ ОЛИГОМЕРОВ  
ОРТОКРЕМНИЕВОЙ КИСЛОТЫ. ИССЛЕДОВАНИЕ  
МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

Чапманов В.В. @, Изотова Е.Д. Петрова А.А.,

Рудакова М.А., Акберова Н.И.

*Казанский ( Приволжский ) федеральный университет, г. Казань,  
420008, Россия*

@woornad@gmail.com

Актуальность исследований механизмов олигомеризации кремниевых кислот в водных растворах обусловлена научным интересом к процессу биосилификации. Олигомеризация кремниевых кислот рассматривается на данный момент как один из базовых процессов, определяющих биосилификацию. С другой стороны, понимание механизмов олигомеризации может иметь практическое значение, поскольку предполагается, что данные механизмы могут лечь в основу новой биотехнологии, позволяющей получать упорядоченные кремниевые наноструктуры при условиях близких к нормальным[1]. Для исследования механизмов олигомеризации необходимо, помимо прочего, установить возможные и наиболее вероятные “траектории” образования олигомеров. На данный момент эта задача в основном решается за счет применения методов компьютерного моделирования [2].

Так, в рамках предыдущего исследования [3], проведенного нашей группой, методами молекулярной динамики были получены “траектории” образования и олигомерное разнообразие на примере системы - вода/ортокремниевая кислота. Но определить какие траектории образования олигомеров являются наиболее энергетически выгодными и наиболее вероятными непосредственно на основе данных молекулярной динамики невозможно. Для дальнейших исследований необходимо оценить энергетические параметры каждого из обнаруженных состояний и энергии переходов из одного состояния в другое с учетом установленных траекторий. Такие оценки можно провести при помощи методов квантовой химии, но общее число полученных структур олигомерных состояний составило около 80 000 , а количество траекторий образования олигомеров более 1500, что предполагает существенные временные и расчетные затраты. При этом, например, расчетное время для гексамера составило около 10 часов с использованием параллельных вычислений (частота

процессора 4 МГц, оперативная память 3 Гб). Поэтому было предположено, что оценки могут быть проведены для неких групп олигомеров, характеризующихся близким значением энергии, и, соответственно, особенностями структурной организации.

В данной работе предпринята попытка провести классификацию и разбиение на структурные группы олигомеров кремниевых кислот с учетом координационных чисел атомов кремния в составе олигомера, количества атомов кремния с данным координационным числом и степенью олигомеризации на примере олигомеров ортокремниевой кислоты. Фактически, выбранные параметры групп характеризуют количество атомов кремния и образованных им силоксановых и силанольных связей.

Для проведения расчетов использовался программный пакет «ORCA». Расчеты проводились методами теории функционала плотности (DFT) с гибридным функционалом B3LYP и базисным набором 6-311G, для олигомеров со степенью олигомеризации от 1 до 6, с учетом геометрии внутри каждой группы олигомеров.

В результате установлено, что предложенное разбиение на группы позволяет классифицировать олигомеры по степени олигомеризации, особенностям геометрии и значению энергии. Так, максимальные различие в значениях энергии внутри групп составляет около 10 ккал/моль, а минимальное различие в энергии между группами составляет более 35 ккал/моль. Таким образом, предложенное разбиение на группы позволит сократить расчетные и временные затраты при оценке энергетических характеристик отдельных траекторий образования олигомеров кремниевых кислот.

[1] Wiens M. Bioinspired Fabrication of Bio- Silica- Based Bone-Substitution Materials / M. Wiens, X. Wang, F. Natalio et al. // *Advanced Engineering Materials*. – 2010. – Т. 12. – №. 9. – С. B438-B450.

[2] Langer R. New methods of drug delivery / Langer R. // *Science* – 1990. – Т. 249 – № 4976 – С.1527–1533.

[3] Изотова Е.Д., 2020, Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 162. 5–26. doi: 10.26907/2541-7746.2020.1.5-26