**Конформационные энергии супрамолекулярных кластеров органических карбонатов из современных приближений квантовой химии**

***Рыжако А.С.1,2, Отлётов А.А.1, Миненков Ю.В.1***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*1Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва, Россия*

*2Российский химико-технологический университет им Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

*E-mail: shura.ryzhako@bk.ru*

Одним из распространенных вариантов квантово-химического моделирования растворителя является представление последнего в виде нековалентно-связанных молекулярных кластеров общей формулы S*n*, где *n* – число молекул растворителя. Надежность такого подхода определяется, в том числе, идентификацией наиболее низкоэнергетических конформеров кластеров S*n*. В этой связи представляется перспективным применение приближенных полуэмпирических методов и силовых полей для «просеивания» миллионов структур, генерируемых программами конформационного поиска и сэмплинга.

В данной работе с помощью программы Uniconf[1] был сгенерирован набор пространственно разнообразных кластеров, содержащих от 3 до 6 молекул органических карбонатов. Эталонные конформационные энергии кластеров были получены с помощью неэмпирического метода RI-SCS-MP2 с последующей экстраполяцией на бесконечный базисный набор (CBS). Термостатистическая поправка Δ*G*therm для перехода к энергии Гиббса была получена как в рамках классического приближения ЖРГО, так и с использованием его модифицированного варианта, предназначенного для корректировки вкладов низких (менее 100 см–1) колебательных частот. Для расчета сольватационной поправки Δ*G*solv была использована континуумная модель Solv,[2] учитывающая как электростатические, так и неэлектростатические взаимодействия «растворенное вещество - растворитель».

Согласно полученным данным, классические полуэмпирические методы и силовые поля неспособны надежно предсказывать конформационные энергии кластеров S*n*. Большая надежность характерна для современных полуэмпирических методов GFN*n*-xTB. Функционалы DFT, включающие дисперсионные поправки, обеспечивают наилучшее согласие с эталонными конформационными энергиями. Влияние температурных и сольватационных поправок на конформационные энергии кластеров S*n* умеренно, и приводит к сужению диапазона конформационных энергий в рамках рассматриваемых ансамблей конформеров. Совокупность поправок Δ*G*therm и Δ*G*solv оказывает существенное влияние на ранжирование по энергиям конформеров кластеров S*n*. Полученные результаты, составившие основу базы данных ORGCARBCONF907,[3] важны для развития методов моделирования растворов электролитов в аккумуляторах.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда*

*(проект РНФ 24-23-00301)*

**Литература**

1. Minenkov Y. Uniconf: An Alternative Conformer Generator with Broad Applicability // Chem. Phys. Lett. 2025. Vol. 860. P. 141813.

2. Minenkov Y. Solv: An alternative continuum model implementation based on fixed atomic charges, scaled particle theory, and the atom–atom potential method // J. Chem. Theory Comput. 2023. Vol. 19. N 15. P. 5221-5230.

3. Ryzhako A. S., Tuma A. A., Otlyotov A. A., Minenkov Y. An influence of electronic structure theory method, thermodynamic and implicit solvation corrections on the organic carbonates conformational and binding energies // J. Comput. Chem. 2024. Vol. 45. N 32. P. 3004-3016.