

Trabalho Prático 4b.

Molécula de Hidrogénio

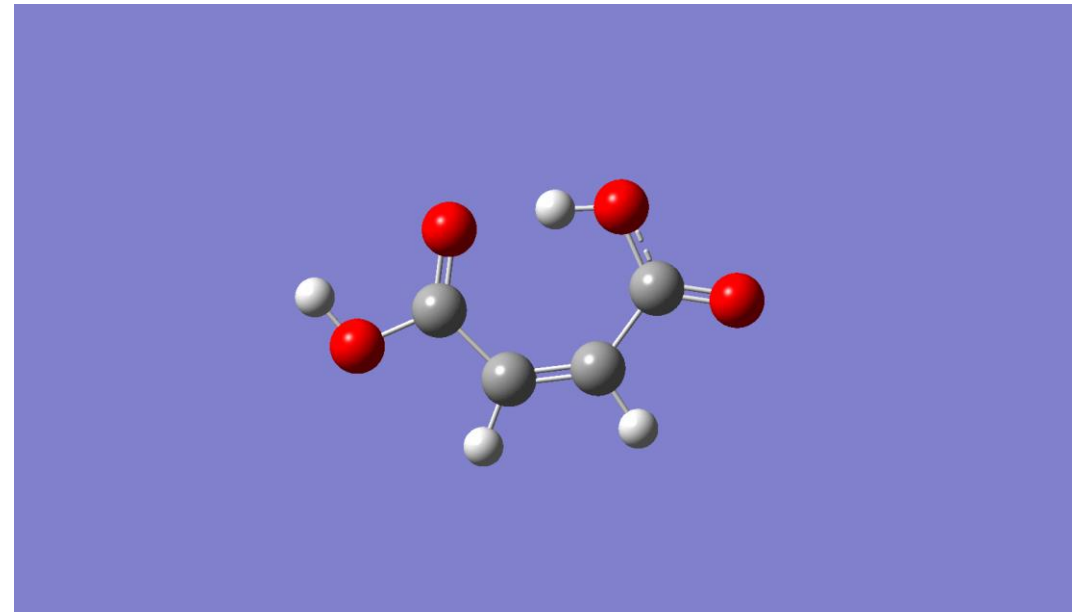
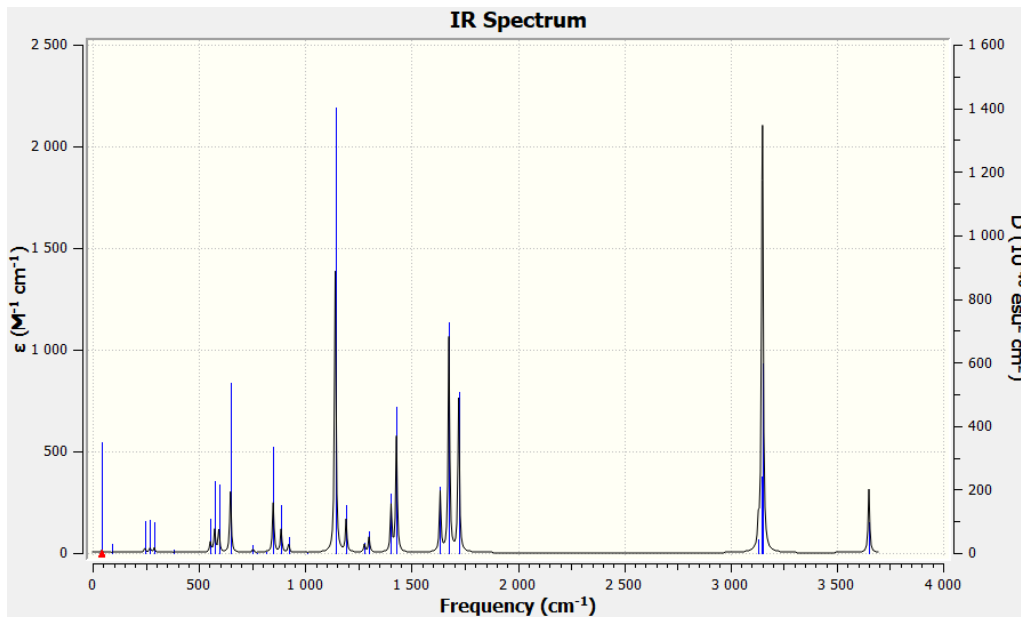
Objetivo: Realizar cálculos de energia utilizando a teoria Hartree-Fock

Cálculos com o ORCA



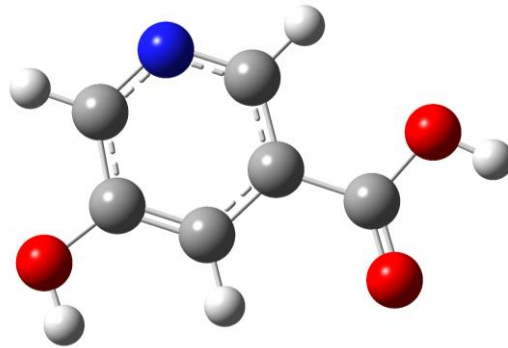
O que se pode fazer com Métodos Quânticos?

- Previsão de espectros (e.g. RMN, IV, ...) →
 - ✓ Propriedades Termodinâmicas
 - ✓ Estudo de estados de transição

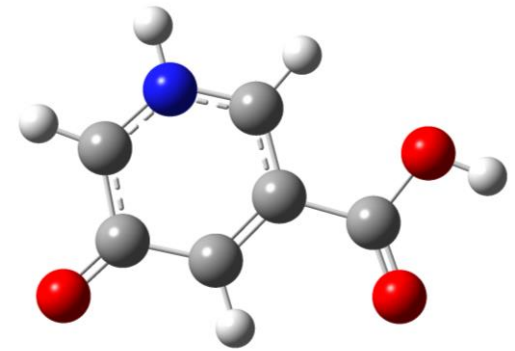


O que se pode fazer com Métodos Quânticos?

- Previsão de espectros (e.g. RMN, IV, ...)
- Compreender a estrutura de moléculas



$$E = -510.681855 \text{ Ha}$$



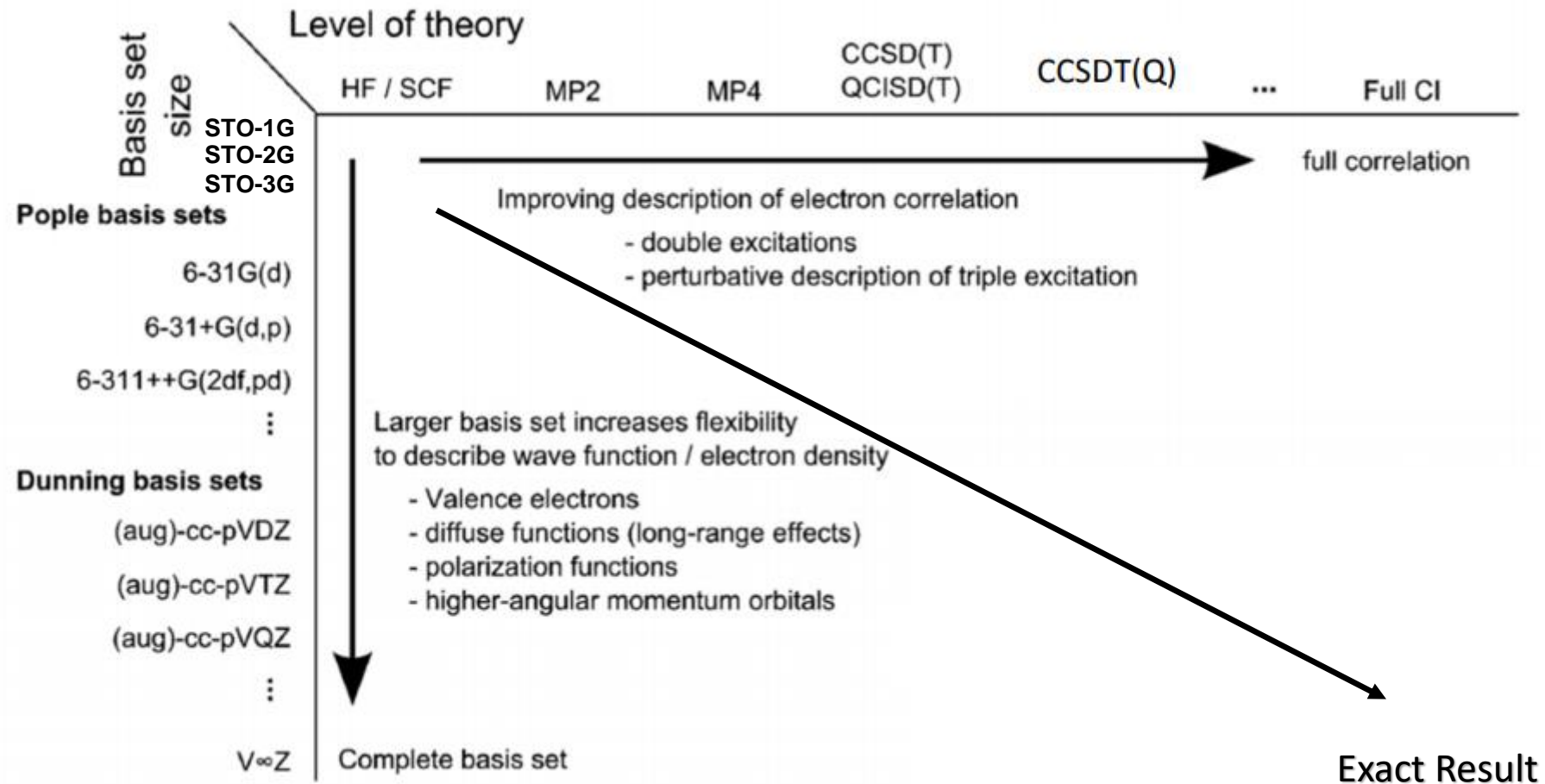
$$E = -510.660614 \text{ Ha}$$

O que se pode fazer com Métodos Quânticos?

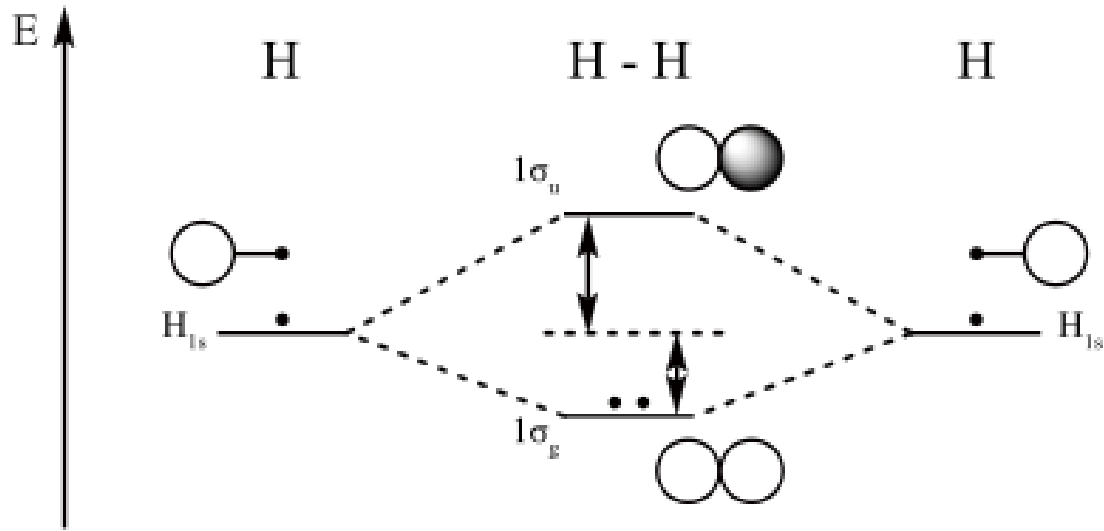
- Previsão de espectros
(e.g. RMN, IV, ...)
- Compreender a estrutura de moléculas
- Estudo de reações químicas, reatividade de moléculas e sua energética
- Estudo de estados excitados

1. Criar um Ficheiro de Input
2. Correr o Programa
3. Analisar os Resultados

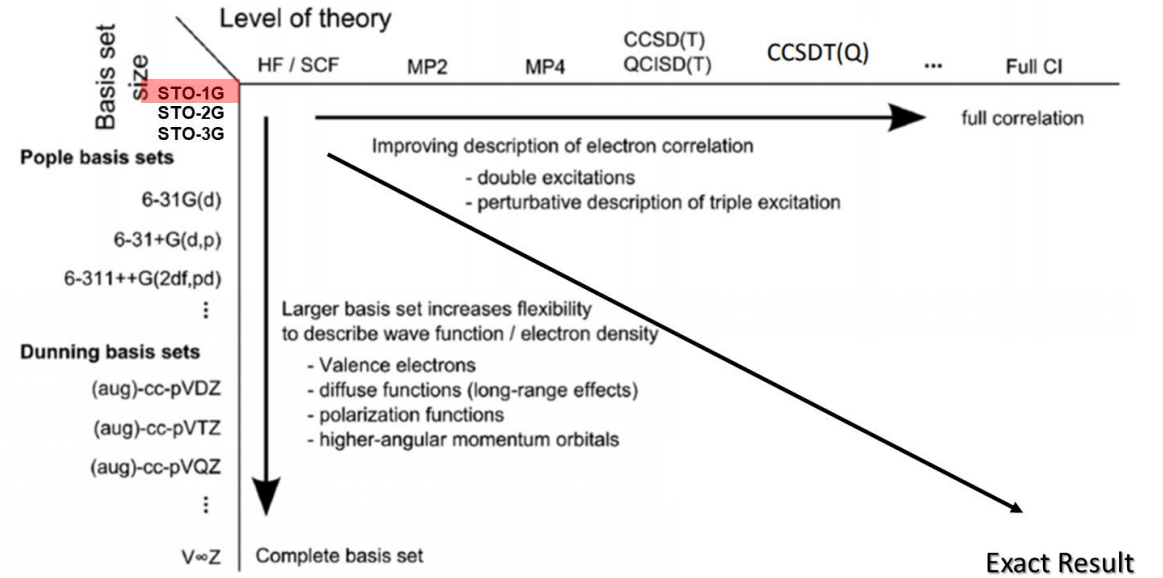
Como Indicar o Tipo de Cálculo que se Pretende?



“Basis-Set” Mínimo



Definir uma única orbital atómica 1s para da cada átomo de Hidrogénio



Vamos utilizar uma orbital de gaussiana do tipo Slater:

$$\phi_{1s}^{GF}(\alpha, \mathbf{r} - \mathbf{R}_A) = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{3/4} e^{-\alpha|\mathbf{r} - \mathbf{R}_A|^2}$$

“Basis-Set” Mínimo

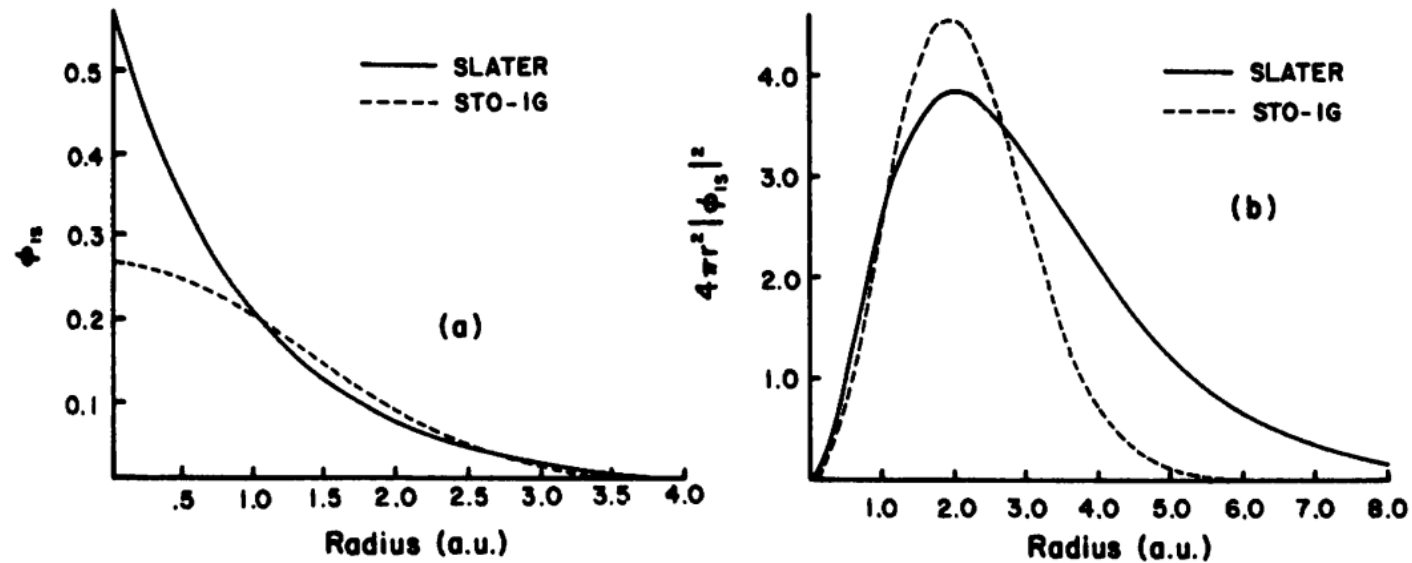
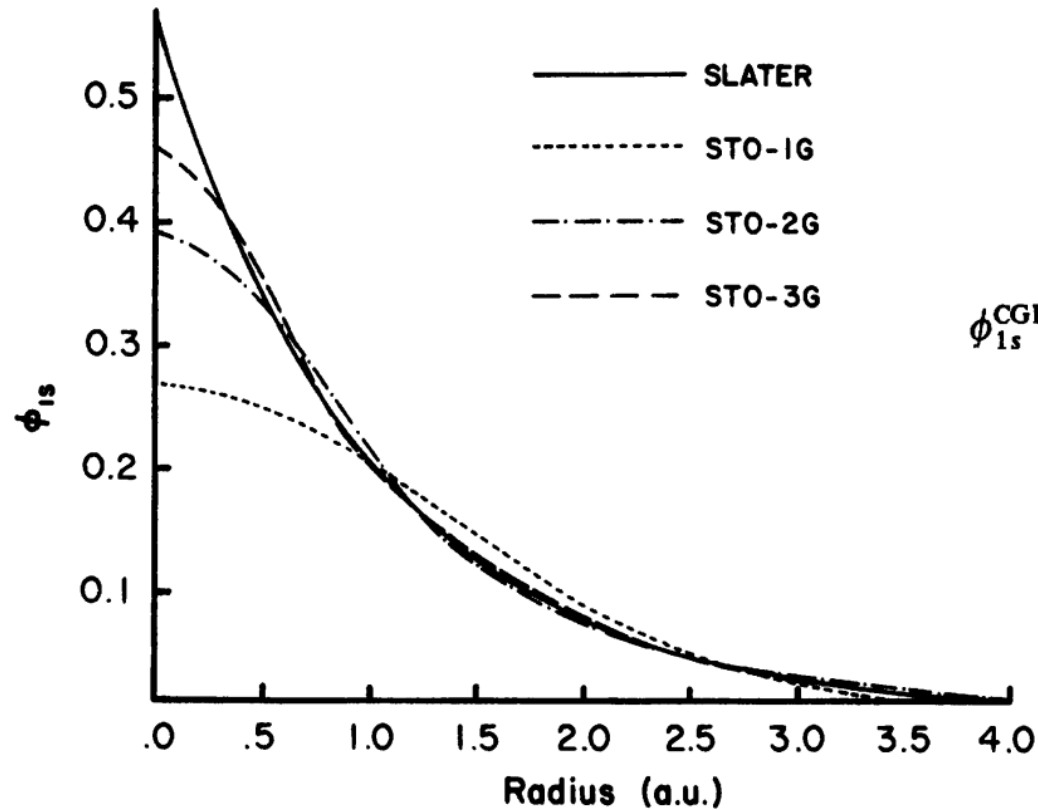


Figure 3.2 Comparison of a Slater function with a Gaussian function: a) least squares fit of a 1s Slater function ($\zeta = 1.0$) by a single STO-1G 1s Gaussian function ($\alpha = 0.270950$); b) comparison of the corresponding radial distribution functions ($4\pi r^2 |\phi_{1s}(r)|^2$).

Função do tipo Slater:
$$\phi_{1s}^{\text{SF}}(\zeta, r - R_A) = \left(\zeta^3 / \pi\right)^{1/2} e^{-\zeta|r-R_A|}$$

Gaussiana do tipo :
$$\phi_{1s}^{\text{GF}}(\alpha, r - R_A) = \left(2\alpha / \pi\right)^{3/4} e^{-\alpha|r-R_A|^2}$$

Basis-Set Mınimo



$$\phi_{1s}^{\text{CGF}}(\zeta = 1.24, \text{STO-3G}) = 0.444635\phi_{1s}^{\text{GF}}(0.168856) + 0.535328\phi_{1s}^{\text{GF}}(0.623913) + 0.154329\phi_{1s}^{\text{GF}}(3.42525) \quad (3.225)$$

Figure 3.3 Comparison of the quality of the least-squares fit of a 1s Slater function ($\zeta = 1.0$) obtained at the STO-1G, STO-2G, and STO-3G levels.

Ficheiro de Input

(i) Indicar o nível de teoria do cálculo

 RHF STO-3G

(ii) Indicar opções adicionais

- Otimizar a estrutura
- Calcular potenciais de varrimento de energia
- Cálculo de espectro de infravermelho
- Cálculo de espectro de NMR
-

(iii) Especificar a molécula

- Indicar a carga e multiplicidade
- Utilizar coordenadas cartesianas
- Matriz-Z
-

Ficheiro de Input

! RHF STO-3G

%paras

r [5.0 4.5 4.0 3.5 3.0 2.5 2.0 1.8 1.6 1.4 1.2 1.0 0.8 0.7 0.6 0.5 0.4 0.3 0.2 0.18]

end

***xyz 0 1**

#coordenadas xyz; carga e multiplicidade 2S+1; S=spin total

H 0.0 0.0 0.0

H 0.0 0.0 {r}

SPIN	Multiplicidade
Camada Fechada (S=0)	1
1e ⁻ Desemparelhado (S=1/2)	2
2e ⁻ Desemparelhados (S=1)	3
....

EXEMPLO DE CÁLCULO COM O ORCA

1. Criar um ficheiro de input para a molécula de água.
2. Otimizar a estrutura da molécula.