

Οδηγίες κατανοήσεως και επεξεργασίας υπολογισμών Κβαντικής Χημείας

Σε αυτή την εργαστηριακή άσκηση προβλέπεται η χρήση του υπολογιστικού πακέτου Gaussian για τον υπολογισμό ενεργειών μορίων σε συγκεκριμένες δομές. Οι υπολογισμοί που πραγματοποιούνται στο εργαστήριο διαρκούν λίγα δευτερόλεπτα για το επίπεδο ακρίβειας που είναι προσιτός με προσωπικούς υπολογιστές σε λογικό χρόνο. Εκτελούνται υπολογισμοί για διατομικά μόρια σε διάφορα μήκη δεσμών και καταγράφονται οι τιμές ολικής ενέργειας (σε hartree) και της διπολικής ροπής (σε debye). Οι πληροφορίες αυτές εντοπίζονται στα κατάλληλα σημεία του αρχείου των αποτελεσμάτων κάθε υπολογισμού. Τα δεδομένα που έχουν ενδιαφέρον τοποθετούνται σε καμπύλη δυναμικής ενέργειας την οποία επεξεργάζεσθε στο σπίτι.

Τα δεδομένα που σας διαβιβάζονται για επεξεργασία δεν περιλαμβάνουν τιμές διπολικής ροπής, αλλά, κατά τα άλλα, είναι πλήρη και ακριβή. Δίνονται για επεξεργασία πολύ περισσότερα μόρια από όσα είναι συνήθως προσιτά στην εργαστηριακή άσκηση. Τα περισσότερα προέρχονται από ερευνητικές εργασίες του προσωπικού του Εργαστηρίου Φυσικοχημείας. Προσέξτε ότι σε μερικές περιπτώσεις τα δεδομένα δεν αφορούν μόρια στην θεμελιώδη ηλεκτρονιακή κατάσταση, αλλά σε διεγερμένη. Παρόλα αυτά για την επεξεργασία ακολουθείτε την ίδια πορεία. Σε κάποια μόρια οι διαπυρηνικές αποστάσεις δίνονται σε bohr αντί Å. Λάβετε υπόψη σας ότι $1 \text{ bohr} = 1 \text{ ατομική μονάδα μήκους} = 0.52917721067 \text{ Å}$. Η ταυτότητα των ατόμων του διατομικού μορίου προσδιορίζονται στο όνομα του αρχείου των δεδομένων και στην κορυφή της στήλης ενεργειών. Στο δεύτερο σημείο προσδιορίζεται και η ηλεκτρονιακή κατάσταση του μορίου η οποία περιγράφεται από τα δεδομένα της ενέργειας. Αν προηγείται ένα X πριν το σύμβολο του φασματοσκοπικού όρου της καταστάσεως, πρόκειται για την θεμελιώδη κατάσταση· σε άλλη περίπτωση πρόκειται για κάποια διεγερμένη κατάσταση. Στον υπολογισμό της ανηγμένης μάζας ενός μορίου πρέπει να χρησιμοποιούμε τις μάζες των πιο άφθονων ισotόπων και όχι τις μέσες μάζες των στοιχείων. Για αυτό τον λόγο θα χρησιμοποιήσετε τις ακόλουθες τιμές (σε g/mol): H: 1.007852, Li: 7.016004, Be: 9.012182, B: 11.009306, C: 12.0000, N: 14.00307401, O: 15.99491462, Na: 22.989770, Si: 27.9769265, K: 38.9637069.

Παραδίδετε σύντομη εισαγωγή, πίνακα και διάγραμμα με τις τιμές της ενέργειας, υπολογισμούς και αποτελέσματα για τα ενεργειακά μεγέθη και τις φασματοσκοπικές σταθερές που χαρακτηρίζουν την συγκεκριμένη ηλεκτρονιακή κατάσταση του μορίου τις οποίες συγκρίνετε με τιμές της πειραματικής βιβλιογραφίας.

18,25/5/2020