

Kvantová chemie

Adam Červenka¹, Ivan Rishko², Karel Balej³

¹Masarykovo gymnázium, Jičínská 528, Příbor

adam.cervenka@gypri.cz

²Základní škola, Nad Vodovodem 81/460, Praha 10

rishko2003@gmail.com

³Gymnázium a SOŠ, Mládežníků 1115, Rokycany

balejk@gasos-ro.cz

Abstrakt

V našem projektu jsme se zabývali teoretickými výpočty vlastností některých molekul za použití zákonů kvantové fyziky a přesností výpočetních metod. Pomocí speciálních programů jsme je napočítali a poté jsme teoretické výsledky porovnali s experimentálně zjištěnými hodnotami.

1 Úvod

Díky znalosti zákonů kvantové chemie se s rostoucím výkonem výpočetních technologií naskytla možnost místo experimentálních postupů počítat vlastnosti sloučenin teoreticky. Hlavním cílem tohoto experimentu je zjistit spolehlivost těchto výpočtů.

K počítání vlastností chemických prvků a sloučenin můžeme použít zákony kvantové fyziky. Konkrétně využíváme (bezčasovou) Schrödingerovu rovnici. Jedná se parciální diferenciální rovnici, jejímž vyřešením získáme vlnovou funkci ψ , která určuje stav systému. Pravděpodobnost výskytu částice v nějakém bodě udává druhá mocnina absolutní hodnoty této funkce v daném bodě. Tuto rovnici lze zapsat:

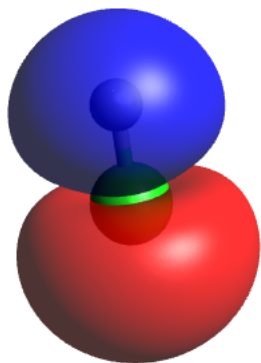
$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Pravděpodobnost výskytu je tedy $\rho = |\psi|^2$.

Řešení této rovnice je obtížné a kromě několika výjimek se vždy řeší numericky pomocí výpočetní techniky. Právě neustálý pokrok v oblasti informačních technologií umožňuje počítat stále složitější sloučeniny. K samotným výpočtům se používá několik metod. V našich výpočtech jsme využívali základní metodu HF ("Hartree-Fock"), která využívá mnoho aproximací, například uvažuje, že jádra atomů jsou zafixovaná (což je snesitelná aproximace, kvůli jejich hmotnosti vzhledem ke elektronovému obalu, ale i tak tato metoda nezjistí všechnu energii vazeb systému). Samotný princip řešení Schrödingerovy rovnice spočívá v uvažování rozkladu vlnové funkce celého atomu či molekuly na dílčí funkce elektronů (formálně $\psi = \phi_1\phi_2\dots$, tyto funkce se označují orbitaly), které dále uvažujeme jako součet funkcí ve tvaru $c_1f_1 + c_2f_2 + \dots$. Tyto funkce (jedná se většinou o Gaussovy funkce) se nazývají *báze* a jsou známé a uloženy přímo ve výpočetním programu v počítači,

který pouze numericky hledá správné konstanty, aby našel stav s nejnižší energií. My jsme používali báze *aug-cc-pVDZ*.

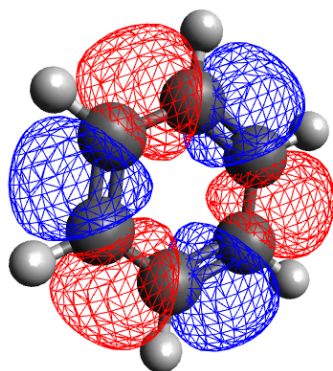
Výsledkem může být geometrie molekuly, rozložení elektronů v obalu, energie či třeba orbitály.



Obrázek 1: Orbital HCl

2 Software

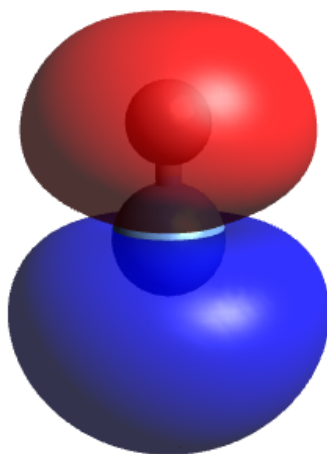
K výpočtům jsme použili specializované programy: *Avogadro* a *PSI4*. Avogadro slouží především ke 3D grafické vizualizaci molekul, ale má i jiné funkce, umí například i zobrazovat orbitály (vizte Obr. 2) nebo generovat vstupy pro PSI4, což jsme při práci využívali. PSI4 je program, který při předložení vstupu (ve formátu konfigurace molekuly a požadavků na výpočet) vygeneruje výstup, kam zapíše požadované informace o molekule (například vibrační módy, vazebné energie a podobné). Umí také vygenerovat soubor formátu *.molden*, který obsahuje mimo jiné informace o orbitalech a který lze zpětně otevřít v Avogadru.



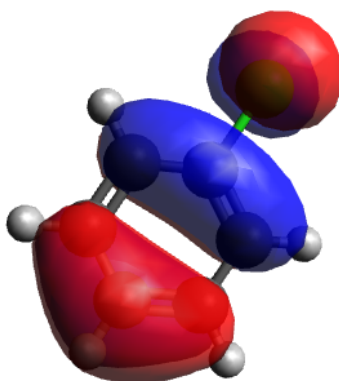
Obrázek 2: Orbital benzenu

3 Výsledky

Při naší práci jsme strávili velké množství času generováním a zkoumáním orbitalů sloučenin. Ukázky můžeme vidět na obrázcích 3 a 4.



Obrázek 3: Orbital HF



Obrázek 4: Orbital chlorbenzenu

Především nám ale šlo o porovnání vypočtených a tabulkových hodnot. Ty můžeme vidět v tabulce 1.

4 Závěr

Porovnáním hodnot v tabulce 1 jsme zjistili, že v některých případech se nám podařilo hodnoty spočítat přesně - přesnost výpočtu reakční energie chlorbenzenu je překvapivě dobrá. Nicméně například zrovna chyba výpočtu reakční energie vody svědčí o tom,

Tabulka 1: Hodnoty

Vlastnost	Teoretická hodnota	Tabulková hodnota
vazebná energie H ₂	338.234 kJ·mol ⁻¹	432.740 kJ·mol ⁻¹
reakční energie chlorbenzenu	131.123 kJ·mol ⁻¹	134.000 kJ·mol ⁻¹
reakční energie H ₂ O	380.580 kJ·mol ⁻¹	241.830 kJ·mol ⁻¹
vibrační frekvence HCl	3094.415 cm ⁻¹	2990.946 cm ⁻¹

že teoretické metody výpočtů nejsou dostatečně přesné a spolehlivé, abychom mohli teoretické hodnoty používat místo těch experimentálních. Nepřesnosti jsou způsobeny tím, že výpočty jsou náročné a že využívají velké množství aproximací, jejichž chyba se sčítá a může nabývat velmi velkých hodnot. Existují sice i přesnější metody než ty, které jsme použili, nicméně ty jsou nesrovnatelně náročnější na výpočetní výkon.

Poděkování

Děkujeme vedoucímu projektu Mikuláši Matouškovi za jeho podporu a pomoc při práci, FJFI ČVUT za umožnění existence projektu a MFF UK za poskytnutí prostor pro práci.

Reference

- [1] Avogadro <https://avogadro.cc/>
- [2] PSI4 <http://www.psicode.org/>
- [3] NIST <https://webbook.nist.gov/>