# Kvantově chemické výpočty molekul

Tomáš Urban, Jan Matěj Višňák, Jan Zrůst

Střední průmyslová škola chemická, Brno, Vranovská 65

ttomas.urban@gmail.com

Gymnázium Mimoň, Mimoň, Letná 263

visnamat@gymi.cz

Gymnázium Botičská, Praha, Botičská 424

jan.zrust@gybot.cz

21. června 2022

**Abstrakt**

Naším cílem bylo pochopit a přinaučit se kvantové chemii a mechanice. Zjistit jak kvantová fyzika funguje a jak se s ní dá pracovat. Napočítali jsme různorodé příklady a vytvořili modely různých molekul, my se podělíme o pár z nich.

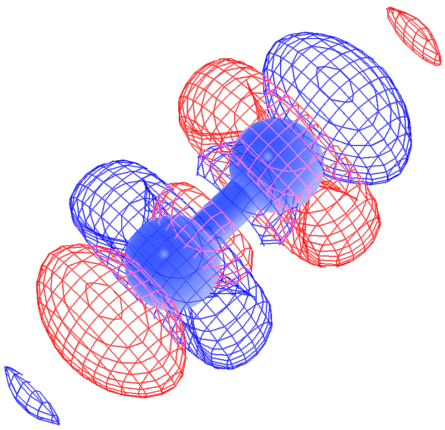
## 1 Úvod

V posledních letech se kvantová chemie a fyzika stala nepostradatelnou součástí našich vědomostí. S pomocí znalostí kvantové fyziky a výpočetních technologií dokážeme teoreticky zpracovat podobu atomů a molekul, společně i s jejich elektronovými orbitaly. Základní teorií je Schrödingerova rovnice, která vyjadřuje jak prostorový, tak časový vývoj vlnové funkce molekuly $\psi$ v poli. Rovnici můžeme zapsat jako:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Jelikož je složité jen s kusem papíru a tužky vytvořit model molekul, natož orbitalů, používáme specifické počítačové programy. Pro vypočítávání mají počítače metod spoustu, ale tu základní, kterou jsme my používali, se nazývá HF (Hartree-Fock). Ovšem tato metoda není úplně přesná, ale i když se dokážeme dostat k nějakým solidním výsledkům, pořád dochází k aproximaci. Jedna z aproximací jest například to, že metoda HF řeší pohyb každého elektronu zvlášť v průměrném poli ostatních elektronů, než aby zobrazovala kružnici okolo molekuly či atomu. Zároveň nezahrnuje koordinaci pohybů elektronů. Ale proč to vlastně dělá? Teorie HF není výpočetně náročná - proto je také základní metodou, ne-li nejzákladnější. Můžeme si to představit jednoduše - pokud momentálně potřebujeme na metro (řekněme že jsme v centru Prahy), prochází okolo nás spousta lidí. Nám je jedno přesně kudy jdou a moc nám nezáleží na jednotlivcích, soustředíme se jen na tu samotnou hromadu lidí, abychom se mohli skrz ten dav protlačit. A to samé dělá každý jiný člověk z toho davu. Abychom se přesunuli zpátky k procesu vytvoření modelu: po nám vytvořeném trojprostorovém modelu molekuly ve specializovaném programu dáme

polohy molekul a atomů do aplikace, která nám to všechno zpracuje a vyhodí celkovou energii i vlnovou funkci $\psi$ ve formě orbitalů.



Obrázek 1: Molekulový orbital $N_2$

# 2 Praktické výpočty

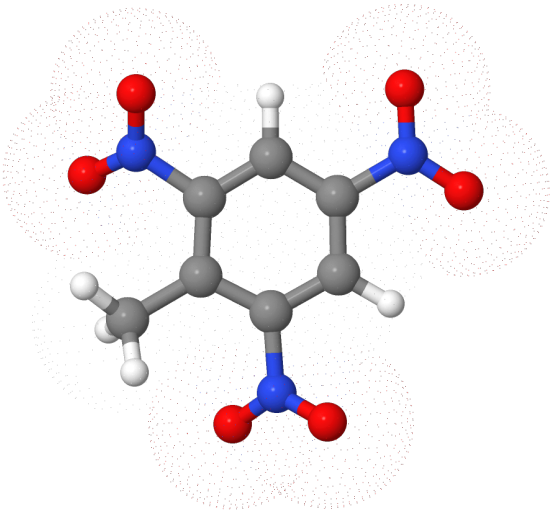
## 2.1 Reakce TNT

Pracovali jsme s už dříve zmíněnou metodou Hartree-Fock. K tomu jsme k vytváření 3D modelů používali Avogadro a Avogadro 2. Bez omezení jsme mohli postavit model jakékoli molekule. Pochopitelně se ale dostáváme do větších potíží pokud je molekula komplikovanější. Po tom co jsme si vytvořili model, jsme si našli souřadnice molekul a nechali ty data zpracovat aplikací Psi4. Sice by se dali informace zase otevřít Avogadrem, ale shledali jsme Jmol lepším programem. Jedna z prvních molekul, kterou jsme vytvořila je molekula dusíku na Obrázku 1. Přišli jsme ale také k složitějším příkladům, jako je například výbuch trinitrotoluenu neboli TNT. Vytvořili jsme si model TNT a zapřemýšleli, pokud bychom mohli vypočítat vytvořenou energii při reakci. Reakce vypadá asi takto:

$$4TNT \rightarrow 6N_2 + 10H_2O + 7CO_2 + 21C$$

| látka | Energie [Ha] | mol | celkový součin molů s energií [Ha] | Rozdíl součinů [Ha] |
|---|---|---|---|---|
| tnt | -884,3760311 | 4 | -3537,504124 | -5,577367195 |
| n2 | -109,4369616 | 6 | | |
| h2o | -76,35738386 | 10 | | |
| co2 | -188,4400068 | 7 | | |
| c | -37,74529054 | 21 | -3531,926757 | |
| kkca/mol | -874,9494787 | | | |
| kJ/mol | -3660,844393 | | | |

Tabulka 1: Vypočítání energie

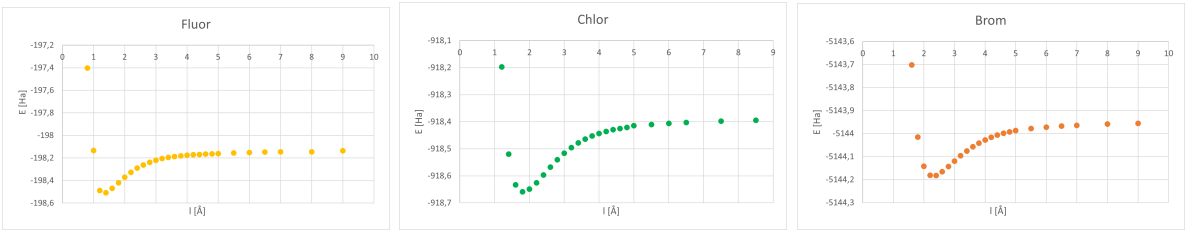


Obrázek 2: TNT

Po delší práci a podpoře našeho vedoucího práce jsme vypočítali kolik energie po reakci přebyde (Tabulka 1).

## 2.2 Disociační křivky

Po našem skoku z tématu formování molekul na reakce TNT jsme ihned skákali do dalšího tématu, a to byly disociační křivky. Na grafech [Obrázek 3] na ose y můžeme vidět potencionální energii atomů v jednotkách [Ha] a na ose x vzdálenost jader v jednotkách [Å].




Obrázek 3: Grafy disociačních křivek halogenů

# 3 Shrnutí

Naučili jsme se pracovat s programem psí čtyřka, jež nám pomohl zjišťování všelijakých informací o molekulách (energie molekuly, dipólový moment a celkové rozložení jader a elektronů v prostoru). Pomocí výpočtu jsem zjistili energetický výtěžek rozkladu molekuly TNT. Dále jsme propočítali disociační křivky prvních tří halogenů (F, Cl, Br), a hlavně tvary možných i nemožných molekul.

## Poděkování

Děkujeme našemu vedoucímu projektu Mgr. Mikuláši Matouškovi za odbornou pomoc a podporu, fakultě FJFI i ČVUT za vůbec uskutečnění projektu a organizaci Týdne vědy. Také děkujeme ÚFCH-JH za poskytnutí prostoru a restauraci Slovanka za skvělou stravu.

## Reference

[1] H. J. Greenberg. *A Simplified Introduction to LaTeX*. https://mirrors.nic.cz/tex-archive/info/simplified-latex/simplified-intro.pdf. 2010.

[2] Avogadro: https://avogadro.cc/

[3] Psi4: https://psicode.org/

[4] Jmol: http://jmol.sourceforge.net/

[5] NIST: https://www.nist.gov/