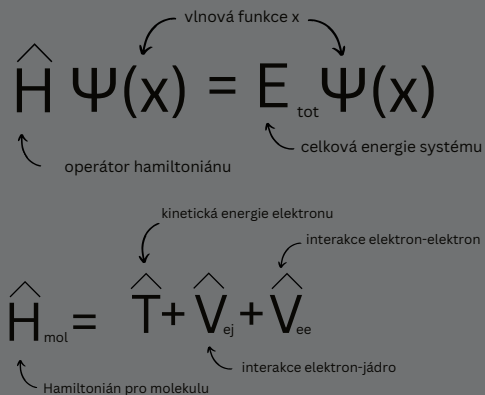


KVANTOVÉ VÝPOČTY MOLEKUL

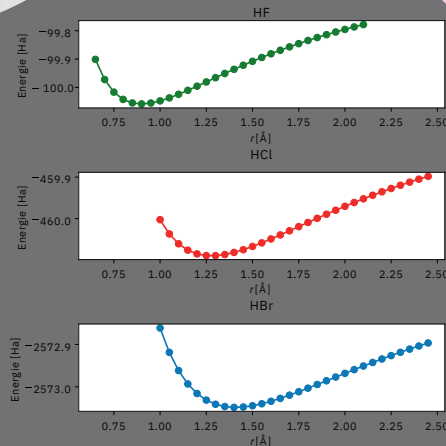
O naší práci

- V našem projektu jsme studovali fyzikálně-chemické vlastnosti molekul řešením Schrödingerovy rovnice, především Hartree-Fockovou metodou.
- Pomocí výpočtů v programu Psi4 jsme ověřili základní poučky platné v chemii jako je například tvar disociačních křivek u halogenovodíků, nebo tranzitní křivku.
- Poster obsahuje závěry naší práce na Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského doplněné o teorii.



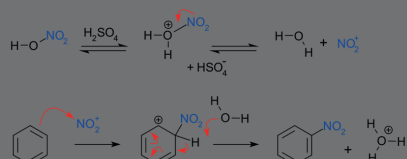
Disociační křivka

- Disociační křivka vyjadřuje vazebnou energii E [$H_a = 27,21 \text{ eV}$] ve vazbě mezi částicemi vzhledem k vzdálenosti r [$\text{Å} = 100 \text{ pm}$].
- Většina křivek diatomických molekul mají podobný průběh, odlišný v poloze, hloubce a šířce minima (odpovídající délce, energii a tuhosti vazby).
- My jsme se to snažili dokázat výpočty hned na několik molekulách (viz. grafy).
- proložení křivky v okolí minima parabolou jsme určili $r(\text{H-Cl}) = 1,26 \text{ Å}$

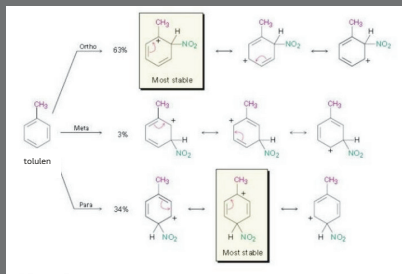


Nitrace toluenu

- V našem projektu jsme se také rozhodli ověřit základní pravidla pro elektrofilní aromatickou substituci. Jako příklad nám posloužila aromatická nitrace toluenu v prvním a pak i v druhém stupni.
- Nitrace probíhá podle obecného schématu:



- Přítomnost různých skupin na aromatickém jádře významně ovlivňuje divergenci dalších skupin na něm.
- Rozlišujeme zde skupiny první třídy, které se divergují do poloh ortho- a para- (-OH, -SH, -CH3, -OCH3, -X...), a druhé třídy, které divergují do polohy meta (-NO2...)
- Alkylóvá skupina na toluenu bude tedy divergovat NO2 do polohy ortho a para.
- Ortho- poloha je stabilnější v důsledku více stabilních rezonančních struktur. (viz obrázek)



- Pro výpočet jsme použili programy Psi4 a ORCA, společně s teoriemi HF a DFT (báze B3LYP-D).
- V tabulkách jsme spočítali energii produktů a odhadli jsme energii tranzitního stavu (TS). (viz. tabulka)
- Spočítali jsme, že zdaleka nejnižší energii produktů i aktivační energie reakce má para-produkt.
- Program ovšem nezapočítává rezonanční struktury, pouze optimalizuje nejstabilnější produkty
- Daná skutečnost mohla zkreslit data, vzhledem k tomu, že u para- produktu je menší sterické bránění.
- Meta-produkt má velmi nízkou energii, ovšem energie tranzitního stavu je natolik vysoká, že tento produkt prakticky nevzniká (3-5% zastoupení).
- Tuto hypotézu se nám povedlo pomocí programu ORCA numericky ověřit.

	Energie	Energie [kJ/mol]	Tranzitní stav [kJ/mol]	Aktivační energie [kJ/mol]	Enthalpie [kJ/mol]
ortho	-476.1147193	-1200096.06	-476.1089101	842.256241	-199434
meta	-476.1162885	-1200653.118	-476.1133576	854.149923	-199440
para	-476.1167933	-1200044.483	-476.1149236	830.112846	-199441

	Energie [Ha]	Energie [kJ/mol]	Tranzitní stav [kJ/mol]	Aktivační energie [kJ/mol]	Enthalpie [kJ/mol]
2,4-dinitrotoluen	-476.111816	-1278212.254	-476.87794	1777393.659	-1778112.254
2,6-dinitrotoluen	-498.8124	-1282525.466	-476.87794	3897.260778	-207171
3,4-dinitrotoluen	-476.7181546	-1278218.161	-476.8782126	-1777398.421	-1778218.161
3,5-dinitrotoluen	-476.7281913	-1278219.493	-477.0302205	-1777542.844	-1778219.493
2,4,6-trinitrotoluen	-476.7197824	-1278127.789	-476.8837091	1777429.864	-1778127.789

	Energie	Energie [kJ/mol]	Tranzitní stav [kJ/mol]	Aktivační energie [kJ/mol]	Enthalpie [kJ/mol]
2,4-dinitrotoluen	-488.8114	-1282525.466	-476.87794	3897.260778	-207171
3,4-dinitrotoluen	-476.7181546	-1278218.161	-476.8782126	-1777398.421	-1778218.161
3,5-dinitrotoluen	-477.0242916	-1277927.283	-477.0302205	-1777542.844	-1778219.493
4,6-dinitrotoluen	-476.7308423	-1278127.827	-477.0275489	-1777356.81	-1778127.827

Výpočet

Důkaz Markovnikova pravidla na adici bromovodíku na propen

- Markovnikovo pravidlo říká, že při přidání protické kyseliny HX k alkenu se vodík kyseliny naváže na atom uhlíku s méně alkylovými substituenty, kdežto halogenidová skupina (X) na uhlík s více substituenty.
- Nám se ho podařilo ověřit určením aktivační energie u obou konformací. Vzhledem k tomu, že 2-bromopropan má nižší aktivační energii, bude primárně vznikat v reakci.

látka	celková energie [Ha]
propen+bromovodík	-2689.3792
TS-1	-2689.3108
TS-2	-2689.3243
1-bromopropan	-2689.4042
2-bromopropan	-2689.4071

látka	aktivační energie [kJ/mol]
(Propen+HBr)1	179.5583
(Propen+HBr)2	144.2041

