Modern Fizika Labor

Fizika BSC

A mérés dátuma: **2010.03.30.**	A mérés száma és címe: **13. Molekula modellezés**	Értékelés:
A beadás dátuma:	A mérést végezte: **Kozics György, Rudolf Ádám**	

1. A mérés célja és elve

A mérés célja, hogy demostrációs jelleggel bevezessen minket a számítógépes molekula-modellezésbe, így a mérés nem tekinthető a klasszikus értelemben vett mérésnek.

A mérés során a Spartan nevű számítógépes programot használtuk, ami numerikusan oldja meg a Schrödinger-egyenletet, megfelelő közelítéseket használva. Itt néhány szóban közlöm a közelítések lényegét, a részletes leírás megtalálható a *http://wigner.elte.hu/koltai/labor/parts/13molmod.pdf* címen, így a részletekre nem térek ki.

A molekulákban az atommagok és elektronok nagy tömegaránya miatt az atommagok terét stacionáriusnak tekintjük, és úgy tekintjük, hogy az elektronok ebben az állandó térben mozognak. Az elektronok hullámfüggvényeit felbontjuk úgy, mintha individuális elektronok hullámfüggvényeinek szorzata lenne, így egy-egy elektron mozgását vizsgálhatjuk szimplán a többi függvényében. A hullámfüggvényeket a számítógép Gauss függvények lineárkombinációjával állítja elő. Részleteiben a bázist nem ismertük meg, de a mérések során mindig leírom majd a használt bázis nevét.

2. A mérés kivitelezése

2.1. Kétatomos molekulák adatainak meghatározása.

A mérés során az H_2, N_2, O_2, és F_2 molekulák optimális geometriáját és alapállapoti energiáját határoztuk meg szinglett, és triplett spinállapotban. Mivel kétatomos molekulákról van szó, a geometria a két atom távolságát jelenti. A számolást Hartree-Fock közelítésben végeztettük, ami az elektronok hullámfüggvényének szorzattal való előállításának valamivel fejlettebb változata, ami abban több, hogy figyelembe veszi a Pauli-elvet. A szorzat helyett az úgynevezett Slater-determinánst használja. A mérést a *6-311+G*** bázison számoltattuk. A következő értékeket kaptuk:

	H2 sing	H2 trip	N2 sing	N2 trip	O2 sing	O2 trip	F2 sing	F2 trip
E (au)	-1,13	-1	-108,97	-108,7	-149,58	-149,66	-198,74	-198,67
E (eV)	-0,04	-0,04	-4	-3,99	-5,5	-5,5	-7,3	-7,3
D (Å)	0,74	2,8	1,07	1,19	1,15	1,16	1,33	1,64

Az energiákat atomi egységben kaptuk, amit átszámoltam elektronvoltba. Az energiák azért negatívak, mert a molekulák kötött rendszerek. Látszik az is, hogy a triplett állapotoknak mindig nagyobb valamivel az energiája, és az atomok távolsága is.

2.2. Vízmolekula számolása

Második feladatként a vízmolekula (H_2O) optimális geometriájának, alapállapoti energiájának, majd rezgési módusainak meghatározását kaptuk. Szintén Hartree-Fock közelítésben, és *6-311+G*** bázison dolgoztunk. A következő adatokat kaptuk:

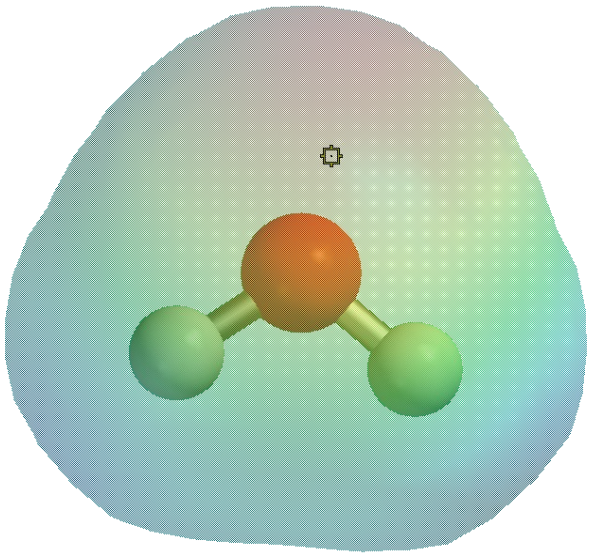
E (au)	-76,05
E (eV)	-2,79
Dipol (debye)	2,2
d(O-H)	0,94
d(H-H)	1,51
szög(fok)	106,19

Módus	**Frek (1/cm)**	**Intensity**
A1	1727	85,87
A1	4141	25,86
B1	4243	88,5

A táblázat tartalmazza a molekula elektromos dipólmomentumát is. A d(O-H) az oxigén-hidrogén atom távolságát, a d(H-H) pedig a hidrogén atomok távolságát jelenti Angströmben. A szög a hidrogén-oxigén-hidrogén szög fokban.

A másik táblázatban a módus a rezgési módus elnevezését jelenti, tartalmazza még a frekvenciát, és a rezgés amplitúdóját.

Kirajzoltattuk a programmal az elektronsűrűségre vetített potenciális energiát. A kapott kép:



A képen látszik, hogy az oxigén molekula körül nagyobb az elektronsűrűség, és távolabb is van a felhő. Ez az oxigén nagyonn elektronegativitása miatt van, és ez okozza a molekula eredő elektromos dipólmomentumát.

Tájékozódás céljával kiszámoltuk ugyanennek a molekulának néhány értékét különböző bázisokban.

	3-21G	6-31g*	6-31g**	6-31+g*	6-311g*
E (au)	-75,59	-76,02	-76,02	-76,02	-76,03
E (eV)	-2,78	-2,79	-2,79	-2,79	-2,79
d(O-H)	0,97	0,95	0,94	0,95	0,94
d(H-H)	1,56	1,51	1,51	1,52	1,16
dipol(debye)	2,39	2,2	2,15	2,28	2,32
szög(fok)	107,7	105,48	105,97	106,53	107,53

A variációs elv szerint az a legelfogadhatóbb érték, ami a legkisebb energiával rendelkezik, vagyis az előző számításokat a helyes bázison végezgtük el. Azonkívül az is látszik, hogy más értékek, pl. dipól momentum változik valamennyit a bázis változtatásával, de látszólag össze-vissza, vagyis helyes az energia alapján kiválasztanunk a helyes bázist.

2.3. Benzolmolekula vizsgálata

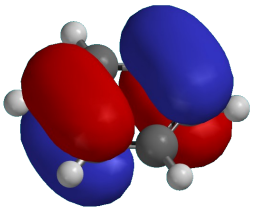
A mérés ezen szakaszában benzolmolekulát vizsgáltunk Hartree-Fock közelítésben, *3-21G** bázison számolva.

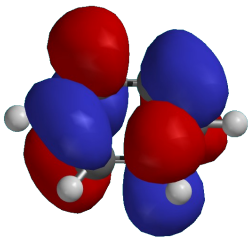
E (au)	-229,42
E (eV)	-8,43
d(C-C)	1,39
d(C-H)	1,07
d(H-H)	2,46
szog(HCC)	120

Módus	Frek
A1G	1078
A1G	3387

A szokásos adatok vannak megadva: energia, atomtávolságok Angströmben, valamint szög fokban. Két radiális rezgési módust találtunk, amiknek frekvenciája is fel van tüntetve. Animációt is láttunk, de azt sajnos nem áll módomban csatolni a jegyzőkönyvhöz.

Ellenben kirajzoltattuk a programmal a legmagasabb betöltött (HOMO), és a legalacsonyabb nem betöltött (LUMO) molekulapályákat, amik jelentősége, hogy energiáik különbsége az első gerejsztés energiája. A képek a következő odlalon láthatók.





A baloldali képen a HOMO, a jobboldalin a LUMO pálya látszik.

2.4. Fullerén

A mérés utolsó feladatában a buckminsterfullerén-molekulát építettük fel, és vizsgáltuk meg *AM1* módszerrel. A molekulát úgy építettük fel, hogy egy benzolgyűrűből indultunk ki, amiből eltávolítottunk egy atomot, így egy ötszöget kaptunk. Ezt az ötszöget másoltuk, és kapcsoltuk a többihez, így kaptuk meg a focilabda alakot, amiben az ötszögeken belül a benzoléhoz hasonló delokalizált elektronok vannak, míg az ötszögeket összekötő kötések rendes kötések. Ennélfogva a C_{60} molekulát kettő geometriai paraméterrel jellemezni lehet: a delokalizált, és a nem delokalizált kötések hosszával. Az, hogy egy ilyen sokatomos molekulát két adattal jellemezhetünk, a sok szimmetriatulajdonsága miatt van. A program segítségével meghatároztuk az optimális geometriát, valamit a képződéshőt (ami az alapállapoti energia). A kapott adatokat a következő táblázat tartalmazza:

Delok	1,46
Nem delok	1,39
E (au)	4072,44
E (eV)	149,66