

PRÁCTICA #3 (15%)

Determinación y análisis de potenciales termodinámicos en sistemas moleculares

Abril 28, 2025

Profesor: Carlos Jiménez

Estudiante: _____

Documento: _____

Utilice el código **xTB** para brindar respuestas a lo solicitado para su sistema molecular, el cual es: _____.

Programas necesarios:

xTB: En Anaconda.

Script (*script_thermo_xtb_complete_all.py*) brindado por su profesor.

1) (20%) Para la reacción asignada por su profesor, realice lo solicitado. Cree una carpeta llamada *punto_1* y al interior de esta, cree tres subcarpetas llamadas *opt* y *ir*.

Estudiante	Reacción asignada
Cabrera Emanuel	$\text{H}_2 + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{HCl}$
Cárdenas Miguel	$\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl}$
Marquez Andrea	$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$

a) En la carpeta *opt* cree subcarpetas para cada reactivo y producto asignados y optimice la estructura con *xTB*, tal como lo realizó en su práctica pasada.

b) En la carpeta *ir*, cree subcarpetas para cada reactivo y producto asignados. Use la estructura optimizada del punto anterior (*opt*) como punto de partida. Recuerde usar la línea de comandos vista en clase:
xtb file.xyz --hess > name_hess.out → Explique porqué se debe generar el archivo *name_hess.out* (reemplace *name* por la fórmula de su reactivo o producto respectivo).

2) (40%) Cree una carpeta llamada *punto_2*. Al interior, cree subcarpetas con cada uno de los reactivos y productos asignados en el punto 1.

En cada subcarpeta, copie los siguientes archivos generados en los respectivos cálculos de *ir* (punto 1b): *vibspectrum* y *name_hess.out*. Explique qué contienen estos archivos y porqué se deben tener en cuenta para usar junto con el script, de acuerdo con lo visto en clase y respecto al cálculo de potenciales termodinámicos. En cada subcarpeta, debe tener tres archivos: *vibspectrum*, *name_hess.out* y *script_thermo_xtb_complete_all.py*.

Uso de Script brindado y utilizado en clase, donde *T1*, *T2*, ..., *Tn* son las temperaturas (en unidad K) solicitadas: 300, 350, 400, 500, 800.

python3 script_thermo_xtb_complete_all.py --temps T1 T2 Tn --file vibspectrum --out name_hess.out

3) (40%) Utilice la información y datos obtenidos en el punto 2. Recuerde la expresión general a usar:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

a) Para los potenciales G, H y S, mencione qué son, qué importancia tienen y qué información brindan. Incluya las referencias respectivas. Si hizo uso de una IA, incluya el prompt usado y el link respectivo.

b) Determine ΔG , ΔH y ΔS para cada valor de T (300, 350, 400, 500, 800), recuerde que:

$$\Delta X = \sum x_{\text{productos}} - \sum x_{\text{reactivos}}, X = G, H, S$$

En la expresión anterior, debe incluir los respectivos coeficientes estequiométricos, de forma similar a como lo realizó en su práctica #2 para el cálculo de energías de reacción (ΔE).

c) Organice los datos en una tabla, donde pueda visualizar fácilmente ΔG , ΔH y ΔS .

d) **Interprete** sus resultados obtenidos de ΔG , ΔH y ΔS , incluyendo el significado químico de su reacción química asignada y teniendo en cuenta las definiciones de G, H y S consultadas en el punto 3b.

Bonificación (30%):

En la línea 113 del *script_thermo_xtb_complete_all.py*, se tiene *num_atoms=10*. Note que para la termodinámica, hasta este momento, no se ha hecho uso del archivo *name_opt.xyz* en donde se encuentra la geometría del sistema.

A) (15%) Modifique el script para que opere no con 10 átomos sino que pueda leer cualquier geometría en formato .xyz. Muestre todas las modificaciones que considere pertinentes y brinde explicación de los cambios realizados.

B) (15%) Use su script modificado anterior, para calcular los valores G, H y S de su molécula orgánica asignada en la Práctica #2 (práctica anterior).