

# 화학실험 (004): 계산화학실험 예비보고서

제출일: 2023.03.30

담당 교수님: 이은성 교수님

담당 조교: 백승현 조교

공과대학 컴퓨터공학부

강명석 (2024-10387)

## 실험목표

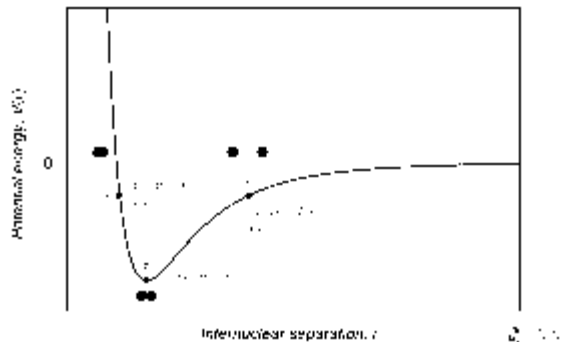
실험에서는 동핵 이원자 분자의 분자오비탈 구조를 알아본다. 수소, 헬륨, 플루오린, 질소 총 네 분자에 대해 분석을 진행하며, GAMESS라는 프로그램에서 Hartree-Fock 방법을 사용하여 구조를 계산한다. 얻은 결과값을 분석하여 분자들의 결합길이, 결합에너지 그리고 결합차수를 알아보고 구한 값들의 화학적 의미를 해석해본다.

## 실험배경

### 1) 분자 오비탈

MO Theory (Molecular Orbital Theory)에 따르면 분자에서 전자는 분자 전체에 걸쳐져 있는 파동함수로 표현가능하고, 이것을 분자오비탈이라고 부르고, 각 원자오비탈을 조합하여 형성할 수 있다. 이때, 전체 에너지가 이전에 비해 낮아졌다면 그것을 결합성 오비탈(bonding orbital), 전체 에너지가 이전에 비해 높아졌다면 반결합성 오비탈(antibonding orbital)이라고 부른다.

### 2) 결합에너지



결합을 끊을 때 필요한 최소의 에너지를 결합에너지라고 부른다. 두 원자가 점점 가까워짐에 따라 그것의 퍼텐셜에너지는 감소하다가, 반발력에 의해 증가하는 모습을 보인다. 이때, 퍼텐셜에너지가 가장 낮아지는 시점에서의 거리를 결합길이라고 부르고, 이때의 -퍼텐셜에너지가 결합에너지가 된다.

## 실험 준비물

Avogadro 프로그램이 설치된 컴퓨터, 계산을 위한 서버

## 실험과정

### 1) 동핵 이원자 분자의 구조 최적화

Avogadro 소프트웨어를 실행후, GAMESS 입력 파일을 생성한다. Element를 Hydrogen(1)으로 선택한 후 화면에 놓아 수소 분자를 만든다. Avogadro 프로그램 기능(Ixtensions\GAMESS\Input Generator)을 사용하여 GAMESS 입력 파일을 만들어 준 후 서버에서 실행한다. 만들어진 계산결과는 윈도우 pc로 전송하도록 하여 이후 분석에 활용한다. 같은 과정을 헬륨, 플루오린, 질소에 대해서도 진행한다.

### 2) Dissociation Potential Energy Surface 계산

Avogadro에서 다양한 결합길이를 가지는  $H_2$ 를 생성한다. 마찬가지로 GAMESS인풋 파일을 만든 뒤, 서버에서 실행하여 해당 분자의 에너지를 구한다. 단일원자 H에 대해서도 같은 과정을 거쳐준다. 단, 이때는 Calculate 옵션을 "Single point enery"로 바꾸고, Advanced Setup 또한 수정해야 한다. basis-set:"6-31G", control\SCF-type:"UHF", multiplicity:2로 설정을 바꾸어 진행한다. 얻은 계산결과를 사용하여 에너지가 최소가 되는 지점을 구하고, 이것에 근거해 결합에너지와 결합길이를 결정한다. 같은 과정을  $He_2$ 에 대해서도 진행한다. 이 경우, 단일 원자의 에너지를 계산할 때 multiplicity: 1로 설정을 바꾸어준다.

## 유의사항

실험2에서 서로 다른 결합길이를 가지는 분자 10가지를 생성한다. 이때 생성한 파일들이 서로 혼동되지 않게 주의한다.

## 참고문헌

GAMESS manual, [www.msg.chem.iastate.edu/gamess/GAMESS\\_Manual/input.pdf](http://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/GAMESS_Manual/input.pdf), 2024.04.20

Gordon, M. S., Schmidt, M. W. 「Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later」. 『In Theory and Applications of Computational Chemistry』, Elsevier, 2005, 1167~1189p

Peter Atkins, Loretta Jones, Leroy Laveman 『화학의 원리(제7판)』, 김관, 김병문, 이상엽, 정두수, 정영근, 자유아카데미, 2018, 74~77p, 133~142p

김희준, 『일반화학실험』, 자유아카데미, 2010, 213~217p

양혁, 이수민, 박강은, 문건기, 「계산화학실험」, 2024