

화학실험 (004): 계산화학실습 결과보고서

제출일 2023.04.

담당 교수님: 이은성 교수님

담당 조교: 백승현 조교

공과대학 컴퓨터공학부

강명석 (2024-10387)

Intro

이 실험에서는 수소, 헬륨, 질소, 불소 분자들에 대한 핵간거리와 결합에너지를 계산하여본다. 계산에는 Avogadro 소프트웨어와 gamess를 사용한다. 또한 분자들의 결합성 오비탈과 반결합성 오비탈에 있는 전자의 수를 계산, 각 분자들의 결합 차수를 알아본다.

Method

1) 동핵 이원자 분자의 구조 최적화

Avogadro 소프트웨어를 실행한 후, 수소 헬륨, 플루오린, 질소 분자를 만든다. 만든 분자에 대해 Gamess입력 파일을 생성한 후, 서버에 옮겨 계산을 실행한다. (&gamess {파일명}.inp). 만들어진 계산결과를 PC로 가져와 정리한 후 저장한다. 저장한 파일은 이후 분석에 활용하난.

2) Dissociation Potential Energy Surface

Avogadro에서 0.2A ~ 2.0A까지의 결합거리를 가지는 H2 분자를 0.2 단위로 생성한다. 앞선 실험과 마찬가지로 Gamess입력 파일을 만들어준 후 서버에 옮겨 계산을 실행하고 그 결과를 가져온다. 결과로써 분자가 가지는 에너지 값을 알 수 있다. 얻은 계산결과를 사용해 에너지가 최소가 되는 지점을 구하고, 이것을 결합거리로 결정한다. 추가적으로 수소 원자의 에너지를 구한 후 이것을 활용해 분자의 결합 에너지를 계산한다. 같은 과정을 헬륨에 대해서도 진행한다. 헬륨의 경우, 0.4A ~ 4.0A까지 0.4 단위로 입력 파일을 생성한다.

Abstract

(1) 결합길이 결합에너지 계산

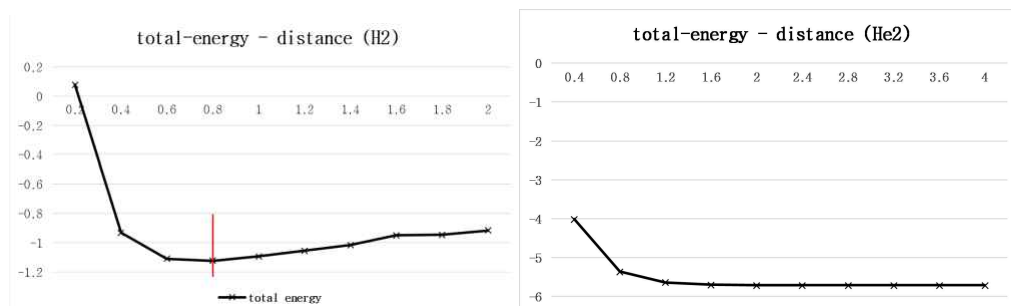
계산화학실습에서 계산한 .log파일의 “EQUILIBRIUM GEOMETRY LOCATED”에서 분자의 원자핵간 거리, 에너지가 최소일때의 에너지값 그리고 에너지가 최소인 지점의 에너지를 알 수 있다. 알아낸 값은 아래 표와 같다.

	핵간거리	분자의 최소 에너지	단일 원자 에너지
H ₂	0.730 Å	-1.1268Ha	-0.4982Ha
He ₂	2.960 Å	-5.7103Ha	-2.8551Ha
F ₂	1.412 Å	-198.7971Ha	-99.3608Ha
N ₂	1.088 Å	-108.8680Ha	-54.3850Ha

또한, (결합에너지) = 2 * (단일 원자 에너지) - 분자의 최소 에너지)에 따라서 각 분자의 결합에너지를 구할 수 있다. 값을 구한 후, kJ로 변환하여 실제 값과 비교하면 아래와 같다.

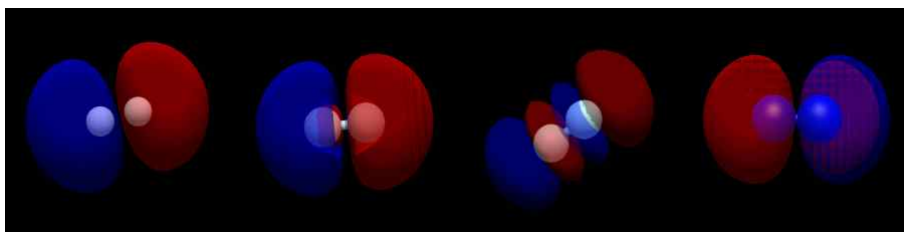
	결합에너지 (Ha)	결합에너지 (kJ/mol)	실제 값 (kJ/mol)
H ₂	0.1304	342.2	436
He ₂	0.0001	0.2625	0
F ₂	0.0755	198.2	159
N ₂	0.0980	257.3	945

추가적으로, 산소와 헬륨 분자에 대해 시행한 분자간 거리 별 에너지는 아래 그래프와 같다. 수소는 대략 0.8 Å 에서 최소의 에너지값을 보이는 것을 확인할 수 있고, He2는 다른 분자와는 다른 양상의 에너지 그래프를 보여주고 있는 것을 확인할 수 있다.



(2) 결합차수 계산

Avogadro를 통해 시각화한 네 분자들의 분자오비탈은 아래와 같다. (차례대로 H, He, F, N)



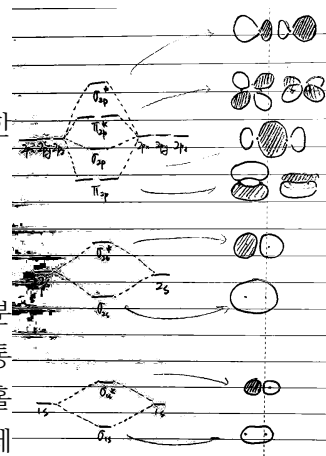
프로그램을 통해 분자의 bonding과 antibonding오비탈에 있는 전자의 개수를 구할 수 있다. 또한 (결합차수)=(bonding) - (antibonding)) / 2에 따라서 결합차수를 계산할 수 있다. 구한 값과 계산결과는 아래 표와 같다.

	bonding 전자	antibonding 전자	bond order
H ₂	2	0	1
He ₂	2	2	0
F ₂	8	6	1
N ₂	8	2	3

Assignment 1

이원자 분자의 오비탈은 중첩되어 우측 그림과 같은 분자 오비탈을 형성한다.

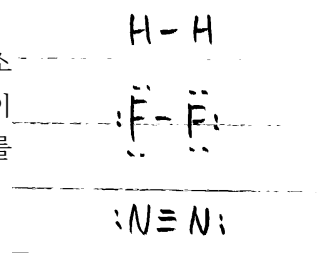
예상되는 분자오비탈 다이어그램과 gamess계산을 통해 얻은 분자오비탈의 모양이 유사한 것을 확인할 수 있다.



Assignment 2

동핵 이원자 분자의 루이스 구조는 우측과 같다. 루이스 구조로 설명하는 화학 결합과 분자 오비탈로 설명하는 화학 결합 모두 구성 원자들의 전자를 통해 결합을 설명한다는 공통점이 있다. 루이스 구조는 전자가 핵 사이에 편재되었다고 가정한 후, 옥텟 규칙에 따른 홀전자들의 전자쌍 결합으로 결합을 설명한다. 그러나 분자 오비탈은 분자에서 전자가 전체 영역에 걸쳐 퍼져 있는 것을 고려해, 양자역학적인 계산을 통해 분자 오비탈을 구하고 이것을 기반으로 결합을 설명한다.

루이스 구조로는 설명할 수 없지만 화학 결합적 관점에서 설명할 수 있는 특징으로는 산소의 상자성과 질소의 반자성이 있다. 루이스 구조로는 이들이 각각 상자성, 반자성을 띄는 이유를 설명할 수 없다. 그러나 분자오비탈로 이들을 나타내보면, 산소 분자는 2개의 홀전자를 가지고, 질소는 홀전자를 가지지 않는다. 이것을 통해 둘의 자성을 설명할 수 있다.



Reference

1) DF Swinehart, 『Journal of chemical education』, ACS Publications, 1962, 333~334p

김희준, 『일반화학실험』, 자유아카데미, 2010, 81~85p

2) GAMESS manual. https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/GAMESS_Manual/input.pdf , 24.04.02

3) Gordon, M. S.; Schmidt, M. W. Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later. In Theory and Applications of Computational Chemistry, Elsevier, 2005; pp 1167-1189.

Lab note

```
st10@master:~$ ls -lhrt *.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 48K Apr 23 13:22 H.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 78K Apr 23 13:30 He.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 70K Apr 23 13:33 N.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 75K Apr 23 13:33 F.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:47 H_0100.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:47 H_0060.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:47 H_0040.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 552 Apr 23 13:50 ls.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:50 H_0160.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:50 H_0200.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:52 H_0020.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:52 H_0080.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:52 H_0120.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:52 H_0140.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 20K Apr 23 13:55 soleH.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 21K Apr 23 13:58 soleHe.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 26K Apr 23 13:58 soleF.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 25K Apr 23 13:58 soleN.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 89K Apr 23 14:02 He_0040.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 81K Apr 23 14:02 He_0080.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 70K Apr 23 14:03 He_0120.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 62K Apr 23 14:03 He_0160.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 59K Apr 23 14:03 He_0200.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 51K Apr 23 14:03 He_0240.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 40K Apr 23 14:03 He_0280.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 25K Apr 23 14:03 He_0320.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 25K Apr 23 14:03 He_0360.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 25K Apr 23 14:03 He_0400.log
-rw-rw-r-- 1 st10 st10 64K Apr 23 14:05 H_0180.log
st10@master:~$
```