### Lab3

Ottimizzazione e calcoli energetici risolvendo l’equazione di Schrödinger, con teoria B3LYP e basis set 6-31+g(d,p) sia per che .

##### 

La ZPE è nulla per un singolo atomo, dato che nessun bond è presente. La ZPE è presente anche a per la sola presenza di un bond, che in questo caso non esiste.

L’energia è così distribuita (dopo 5 cicli):

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Cinetica | Potenziale | Elettronica | **Tot** |
|  |  |  |  |

|  |  |
| --- | --- |
| **Totale** | **0.889** |
| Elettronica | 0.000 |
| **Traslazionale** | **0.889** |
| Rotazionale | 0.000 |
| Vibrazionale | 0.000 |

##### 

L’energia è così distribuita (dopo 6 cicli):

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Cinetica | Potenziale | Elettronica | **Tot** |
|  |  |  |  |

|  |  |
| --- | --- |
| Totale | 7.863 |
| Elettronica | 0.000 |
| **Traslazionale** | **0.889** |
| Rotazionale | 0.592 |
| **Vibrazionale** | **6.381** |

L’energia vibrazionale contribuisce maggiormente all’energia totale, mentre la rotazionale è identica all’idrogeno. La molecola è sottoposta per la maggior parte a **transizioni vibrazionali**, e gli autostati vibrazionali dominano la distribuzione dell’energia.

La qui invece è presente, a causa del bond:

### Energia di reazione

I risultati sperimentali (NIST) riportano valori tra a .

Errore trascurabile, ma sovrastima leggermente l’energia di reazione, assumendo il sistema meno stabile di quanto in realtà sia.

Essendo l’energia di reazione positiva, è un processo endotermico (aumentando la temperatura si sposta l’equilibrio verso i prodotti).

Facendo un’esplorazione del in funzione della distanza , il minimo energetico (equilibrio) è appunto (quello trovato durante l’ottimizzazione geometrica). Possiamo vedere come cambia l’energia in funzione della lunghezza del bond:

Immagine che contiene testo, schermata, Diagramma, linea

Descrizione generata automaticamente

|  |  |
| --- | --- |
| **Distance** | **SCF** |
| 0.5000 | 1.10565 |
| 0.5250 | 1.12391 |
| 0.5500 | 1.13856 |
| 0.5750 | 1.15019 |
| 0.6000 | 1.15928 |
| 0.6250 | 1.16622 |
| 0.6500 | 1.17134 |
| 0.6750 | 1.17491 |
| 0.7000 | 1.17717 |
| 0.7250 | 1.17832 |
| **0.7500** | **1.17850** |
| 0.7750 | 1.17788 |
| 0.8000 | 1.17657 |
| 0.8250 | 1.17466 |
| 0.8500 | 1.17226 |
| 0.8750 | 1.16944 |
| 0.9000 | 1.16626 |
| 0.9250 | 1.16277 |
| 0.9500 | 1.15904 |
| 0.9750 | 1.15511 |
| 1.0000 | 1.15100 |
| 1.0250 | 1.14675 |
| 1.0500 | 1.14240 |
| 1.0750 | 1.13796 |
| 1.1000 | 1.13345 |
| 1.1250 | 1.12890 |
| 1.1500 | 1.12432 |
| 1.1750 | 1.11972 |
| 1.2000 | 1.11513 |
| 1.2250 | 1.11054 |
| 1.2500 | 1.10597 |
| 1.2750 | 1.10142 |
| 1.3000 | 1.09691 |
| 1.3250 | 1.09244 |
| 1.3500 | 1.08802 |
| 1.3750 | 1.08365 |
| 1.4000 | 1.07933 |
| 1.4250 | 1.07507 |
| 1.4500 | 1.07088 |
| 1.4750 | 1.06674 |
| 1.5000 | 1.06268 |

Per distanze molto piccole le nuvole degli elettroni si sovrappongono, e quindi c’è una forza attrattiva dovuta alla formazione del legame covalente. Per questo c’è un decremento iniziale. All’equilibrio c’è un bilanciamento tra forze attrattive e repulsive.

Ci aspettiamo a distanze maggiori che l’energia si stabilizzi verso i prodotti, quindi verso l’energia dell’atomo di idrogeno.

### Molpro

Sono riportati i valori energetici risultanti dai calcoli con molpro:

|  |  |
| --- | --- |
| Molecola | Energia |
|  |  |
|  |  |
| Reazione | 0.16117913\*627.5 = 101.3026144 |

Molpro sottostima l’energia di reazione.