

Modern Fizika Laboratórium Fizika Bsc.  
**Molekulamodellezés**

***Készítette:***  
*Albert Andrea*

## 1. A mérés rövid leírása

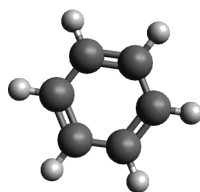
A mérés során az Avogadro program által nyújtott molekulaszimulációs módszerekkel ismerkedtem meg és segítségével következtettem a vizsgálandó molekulák tulajdonságaira.

## 2. A molekulák vizsgálata

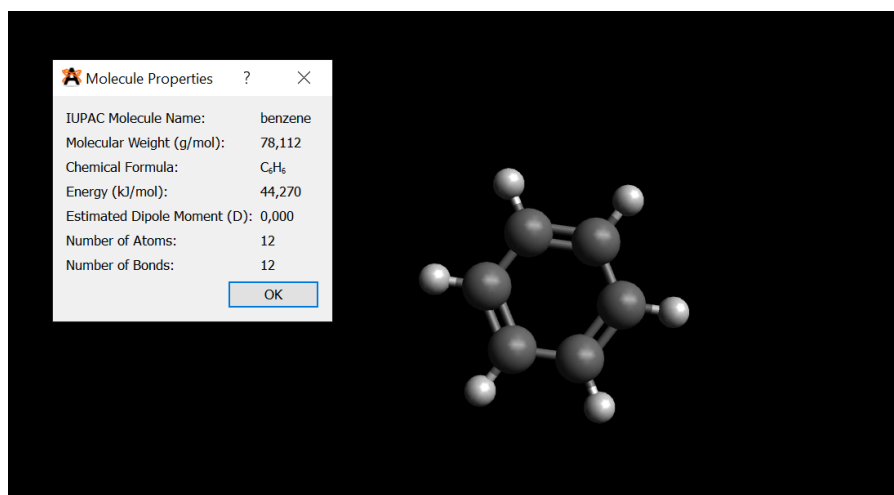
### 2.1. Benzol vizsgálata

Első feladatként egy benzolt kellett kirajzolgatni a programmal. Ezt úgy tettem meg, hogy a ceruzával a megfelelő mennyiségű C atom beszúrása után beállítottam az egyes szomszédok között lévő kötések megfelelő számát. Majd előoptimalálás után a következőt kaptam:

Atomic=4270000000  
Hydrogen=0



A View menü Properties/Molecule Properties menüpontban megnéztem a molekula tulajdonságait:



Ezek táblázatba foglalva:

IUPAC Molekula név	Benzol
Molekulatömeg (g/mol)	78.112
Kémiai formula	$C_6H_6$
Energia (eV)	0.4588263
Dipólmomentum	0

1. táblázat

Látszik, hogy sikeresen megkonstruáltam a benzolomat ugyanis a program is ezt adja vissza.

Vonalzóval lemértem a különböző szögeket meg kötéshosszakat (geometriai paraméterek), meg a programmal megnéztem, hogy hányad rendű kötésekről van szó:

Kötés	Típusa	Hossza [Å]
C-H	1.rendű	1.39904
C-C	2.rendű	1.08234

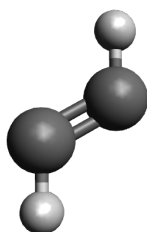
2. táblázat

Továbbá a kötések szöge  $120^\circ$  volt.

## 2.2. Z-mátrix fogalmának megismerése

Itt a  $C_2H_2^{2-}$  molekulaionra kellett meghatároznom a Z-mátrixot. Ehhez először felrajzoltam azt:

AtKcE-0.92811a(E=0)  
RmKcE(0)



Ezután a kért módon, a vonalzóval megszámoztam az atomokat, majd az Extensions/Gaussian menüponra menve megkaptam a Z-mátrixot (Format: Z-matrix (compact)):

Gaussian Input

Title:

Calculation:  Processors:

Theory:  Basis:

Charge:  Multiplicity:

Output:  Checkpoint: ☐

Format:  [Hide Preview](#)

```
#n B3LYP/6-31G(d) Opt
Title
0 1
C
C 1 1.32881
H 2 1.08437 1 120.00755
H 1 1.08437 2 120.00944 3 180.00000
```

$$Z \rightarrow \begin{array}{c} C \\ C \ 1 \ 1.32881 \\ H \ 2 \ 1.08437 \ 1 \ 120.00755 \\ H \ 1 \ 1.08437 \ 2 \ 120.00944 \ 3 \ 180.00000 \end{array}$$

Az Avogadroval kapott mátrix pedig (amikor a számozást rábízta):

Gaussian Input

Title:

Calculation:  Processors:

Theory:  Basis:

Charge:  Multiplicity:

Output:  Checkpoint: ☐

Format:  [Hide Preview](#)

```
#n B3LYP/6-31G(d) Opt
Title
0 1
C
C 1 1.32881
H 2 1.08437 1 120.00755
H 1 1.08437 2 120.00944 3 180.00000
```

Láthatóan a program is ugyanúgy számozott mint én.

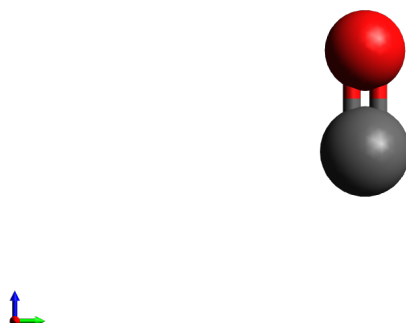
A programmal megkapott jellemzők:

IUPAC Molekula név	Etén	Kötés	Típusa	Hossza [Å]
Molekulatömeg (g/mol)	28.053	C-H	1.rendű	1.08437
Kémiai formula	$C_2H_4$	C-C	2.rendű	1.32880
Energia (eV)	-0.001606462			
Dipólmomentum	0.0			

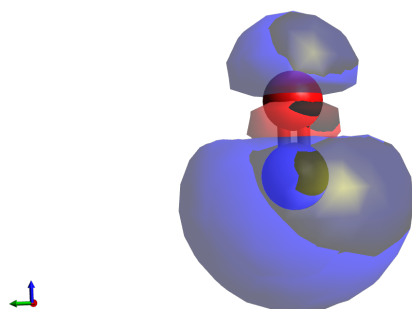
A kötések szöge pedig:  $120^\circ$ .

### 2.3. A CO molekula elektronszerkezetének vizsgálata

A kapott CO molekula a következőképpen nézett ki:



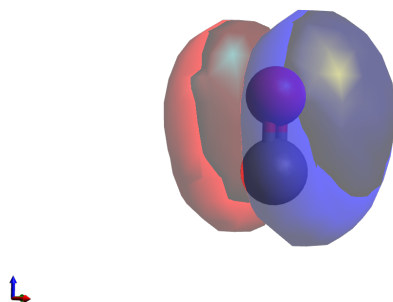
Ki kellett rajzolnom a HOMO-2, HOMO-1, HOMO, LUMO molekulapályákat.



(a) HOMO



(b) HOMO-1



(c) HOMO-2



(d) LUMO

## 2.4. Izotópeektus vizsgálata szimulált IR spektrumokkal

### 2.4.1. C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> molekula

A molekula jellemzői:

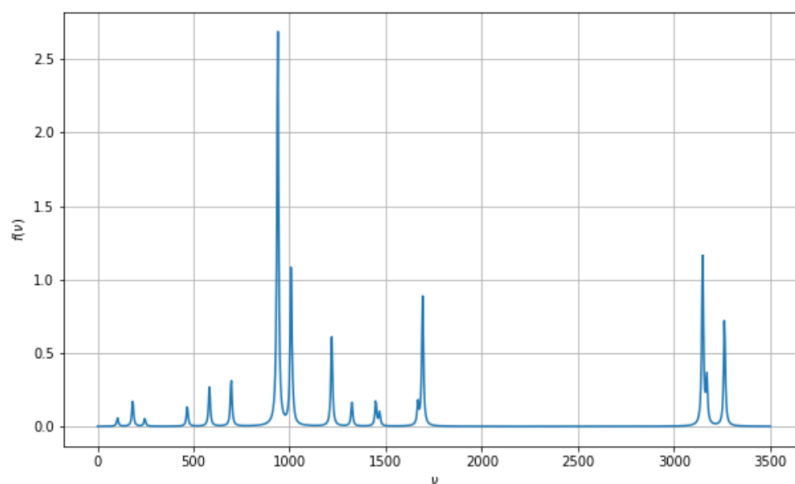
IUPAC Molekula név	-	Kötés	Típusa	Hossza [Å]
Molekulatömeg (g/mol)	78.112	H-C	1.rendű	1.08973
Kémiai formula	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	C-C	1.rendű	1.41890
Energia (eV)	-6320.6945265	C-C	2.rendű	1.34321
Dipólmomentum	0.009	C-C	3.rendű	1.21771
		C-H	1.rendű	1.08494

A szimulált spektrumok grakonjának elkészítéséhez (Lorentz-görbékkel) az infraaktív rezgési módusokra kellett elvégezni a következő összegezést:

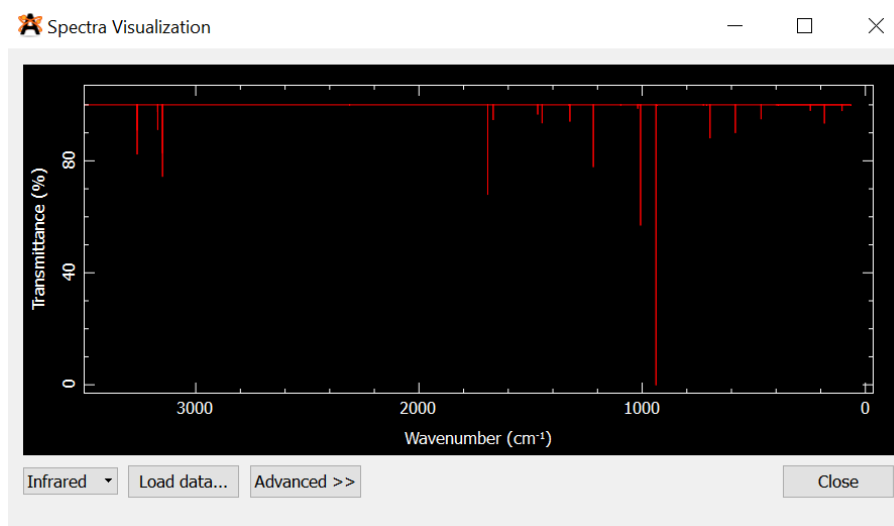
$$f(\nu) = \sum_i \frac{A_i}{(\nu - \nu_i)^2 + \tau^2/4}$$

ahol  $\nu_i$  a rezgési módusok frekvenciája,  $A_i$  pedig az intenzitása. Ezeket a program megadta nekem.

A Lorentz-görbét a spektumok grafikonjához illesztve a következőt kaptam:



Az Avogadroval kapott spektrum pedig:



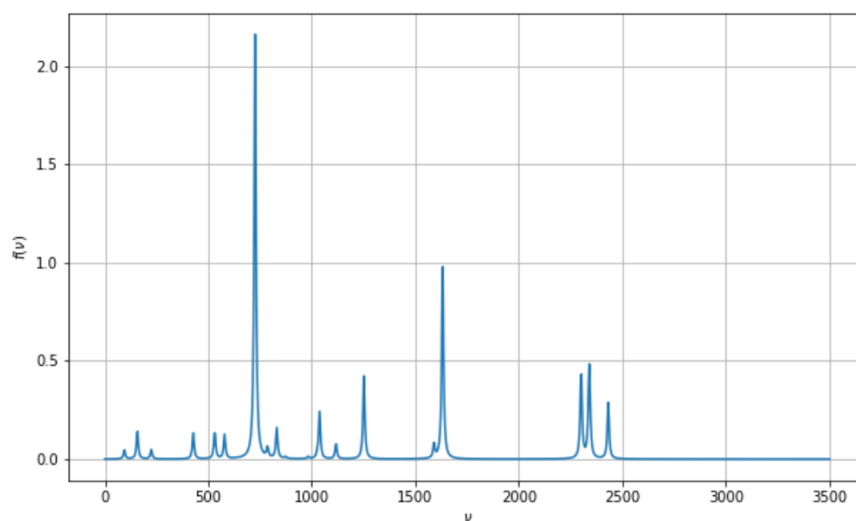
A két spektrumban a csúcsok nagyjából ugyanott helyezkednek el.

#### 2.4.2. C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> deuterizált

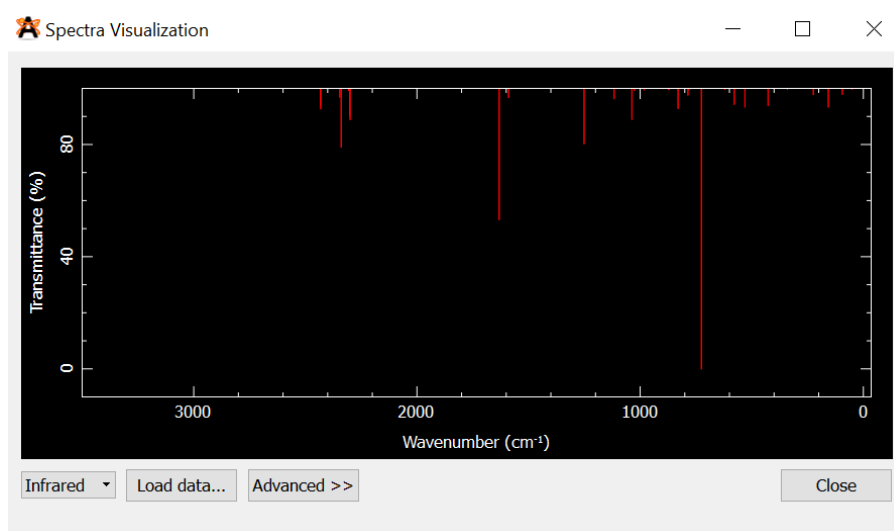
A molekula jellemzői:

IUPAC Molekula név	hexa-1,5-dien-3-yne	Kötés	Típusa	Hossza [Å]
Molekulatömeg (g/mol)	78.112	H-C	1.rendű	1.08973
Kémiai formula	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	C-C	1.rendű	1.41890
Energia (eV)	-6320.6945265	C-C	2.rendű	1.34321
Dipólmomentum	0.009	C-C	3.rendű	1.21771
		C-H	1.rendű	1.08494

Itt Lorenz-görbéket a spektumok grafikonjához illesztve a következőt kaptam:



Az Avogadroval kapott spektrum pedig:

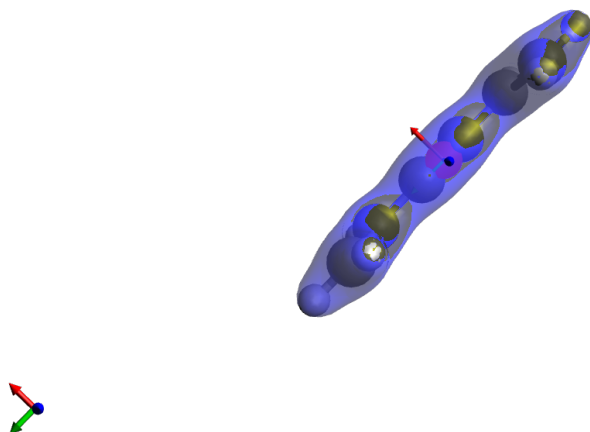


Itt is a két spektrumban a csúcsok szemre ugyanott helyezkednek el.

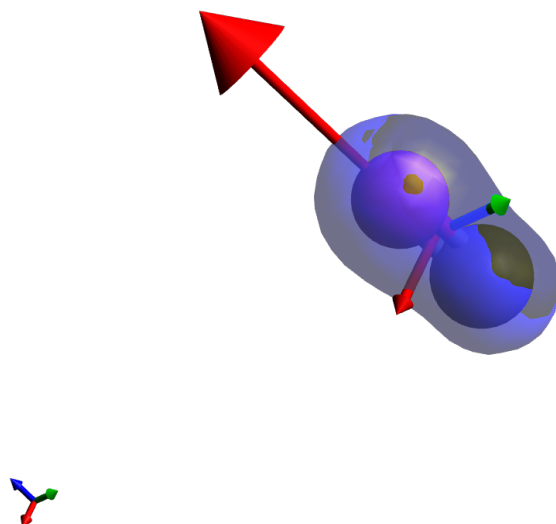


## 2.5. Dipólmomentum

Ennek meghatározására először a  $C_6H_6$  molekulát használtam fel. Az irányának meghatározásához a Dipole opcióban az elektronsűrűség ábrázolását választottam. A következőt kaptam:



Mivel ezzel nem kaptam meg a dipólmomentum vektort a CO molekulára is megnéztem ugyanezt:



Itt már megfigyelhető a dipólmomentum és annak iránya.