

Bài 1: Năng lượng và chiều dài liên kết /ndt1

Ngày 23 tháng 9 năm 2020

Email: duythe.276051@gmail.com , if you want to know more details about this report.

1 Vẽ đồ thị và nhận xét

Tìm hiểu phần mềm Gaussian qua đó hiểu thêm lý thuyết và so sánh với kết quả thực nghiệm:

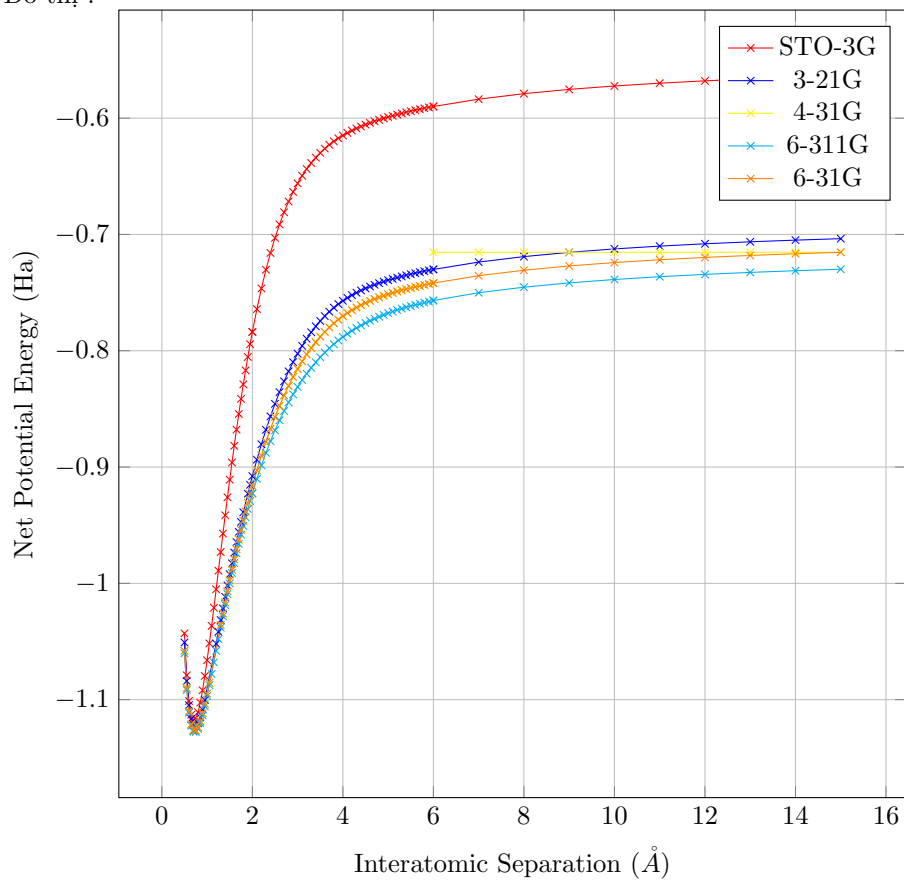
Sử dụng Gaussian để chạy file chứa tọa độ các nguyên tử của phân tử H_2 để tính năng lượng toàn phần (AU) từ 0.05 (Å) độ dài liên kết. Kết quả thu được số liệu:

<https://github.com/nguyenthe123/MaterialCalculation/>

1.1 Đồ thị các cơ sở

Các cơ sở: 3-21G, STO-3G, 3-21G, 4-31G, 6-31G và 6-311G.

Đồ thị :



1.2 Nhận xét đồ thị

1. Đồ thị năng lượng toàn phần này phù hợp với lý thuyết về năng lượng giữa 2 nguyên tử.
2. RHF - Cơ sở STO-3G sử dụng 1 AO cho mỗi nguyên tử Hidro nên 2 MO được tính còn 3-21G sử dụng 2 AO cho mỗi nguyên tử nên 4 MO được tính, tốc độ hội tụ chậm hơn so với cơ sở STO-3G. Tương tự với 3 cơ sở còn lại kết luận cơ sở STO-3G cho kết quả chính xác hơn.
3. Các cơ sở đều cho kết quả gần như nhau (tại khoảng 0.7 Angstrom đều là cực tiểu của năng lượng), đúng với kết quả thực nghiệm, trong đó, ví dụ:

- Năng lượng toàn phần cực tiểu: 30.404627061603eV (STO-3G) 30.531049042752 (3-21G) tại 0.75 Angstrom, còn thực nghiệm là 31.675 eV tại 0.741 Angstrom).
- Khoảng cách: Đồ thị chỉ ra năng lượng cực tiểu ở gần r_0 0.75 Angstrom còn thực nghiệm 0.741 Angstrom, kết luận phù hợp.

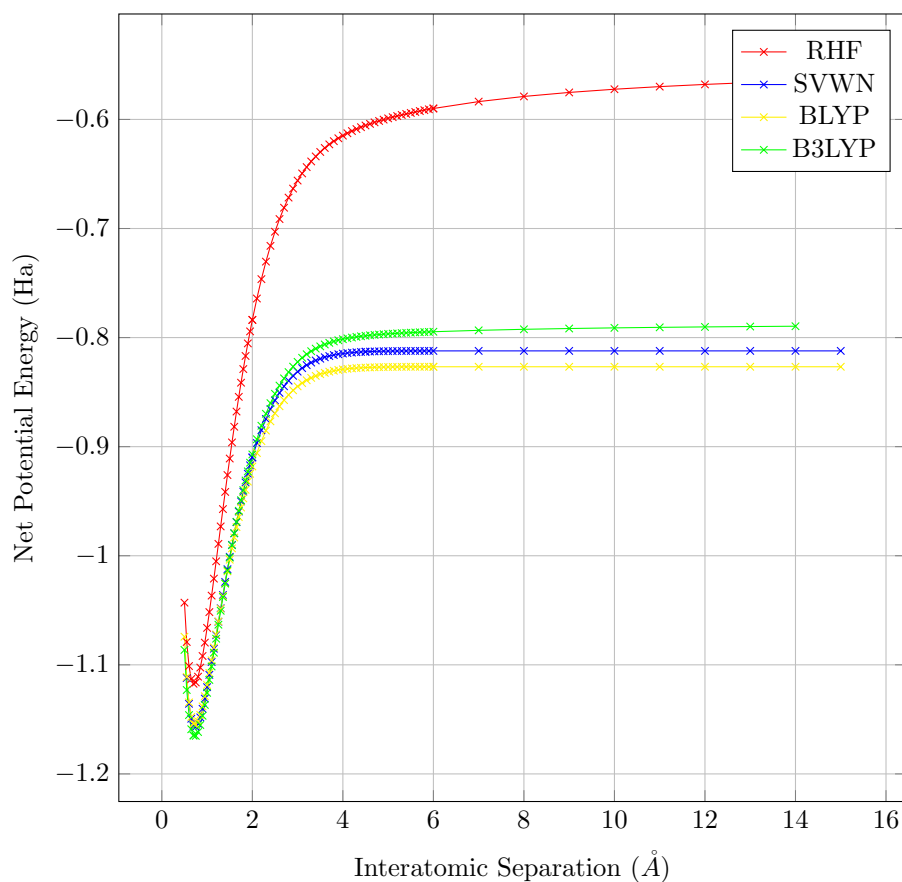
1.3 Thay đổi phiếm hàm

Sử dụng cơ sở *STO-3G* (vì tốt nhất theo phần trên), thay đổi phiếm hàm *RHF* bằng *LDA (SVWN)*, *GGA (BLYP)* và *hybrid (B3LYP)*:

Số liệu:

<https://github.com/nguyenthe123/MaterialCalculation/>

Đồ thị khi thay các phiếm hàm *RHF*, *LDA (SVWN)*, *GGA (BLYP)* và *hybrid (B3LYP)*:



Nhận xét đồ thị:

- Phiếm hàm *RHF* cho khả năng hội tụ cao nhất, ba hàm sau không tốt bằng. Chi tiết thể hiện quá số vòng lặp, tiệm cận về 0 và điểm r_0 .

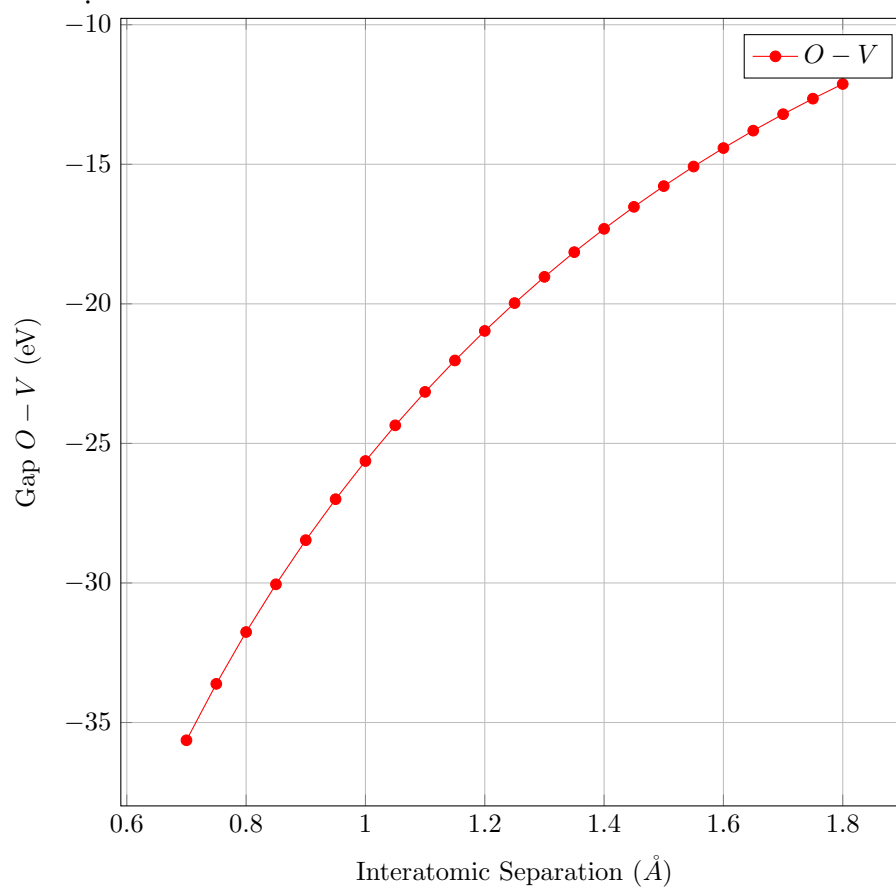
1.4 Đồ thị HOMO-LUMO gap

Từ 1.1 đến 1.3 ta rút ra được kết luận sử dụng phiếm hàm RHF cho cơ sở STO-3G được kết quả tốt nhất. Vậy ta sẽ sử dụng chúng để tìm HOMO-LUMO gap cho phân tử H_2 .

Số liệu:

<https://github.com/nguyenthe123/MaterialCalculation/>

Đồ thị:



???: $O-V < 0$, là số gì ???

2 Nhận xét bài báo

Comparison of DFT Methods for Molecular Orbital Eigenvalue Calculations - *Gang Zhang and Charles B. Musgrave**.