

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

Ngày 24 tháng 9 năm 2020

Email: duythe.276051@gmail.com

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:

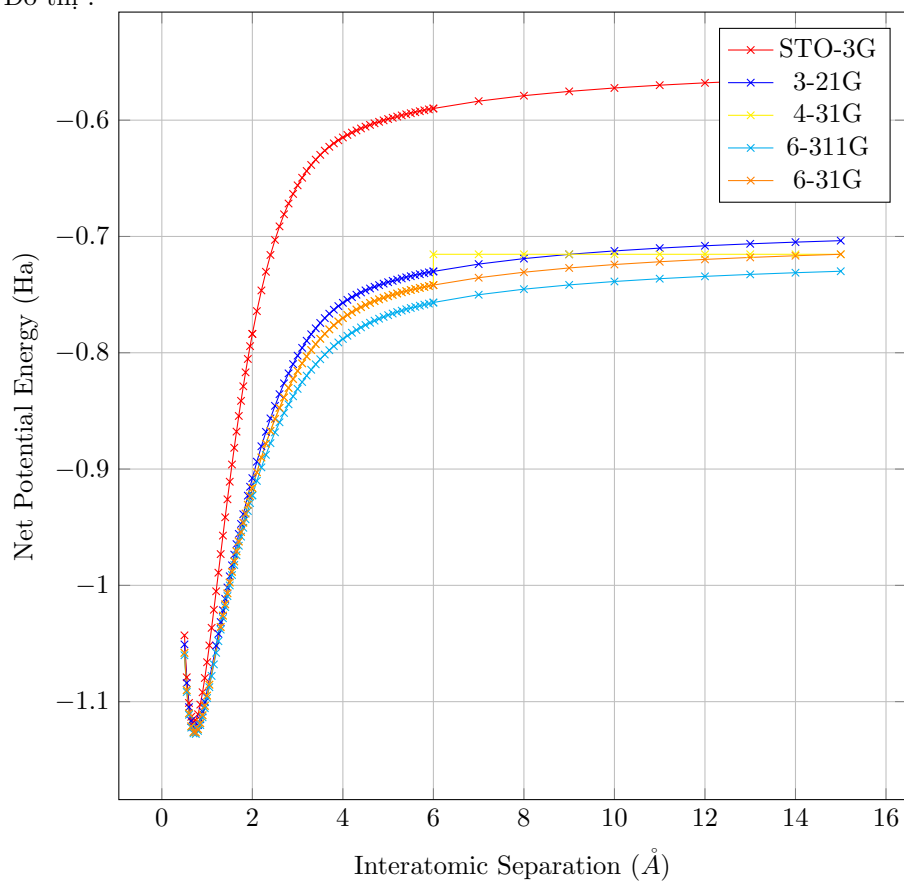
Sử dụng Gaussian để chạy file chứa tọa độ các nguyên tử của phân tử H_2 để tính năng lượng toàn phần (Ha) từ 0.05 (Å) đến 15 (Å) độ dài liên kết. Kết quả thu được số liệu:

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

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 tương tác giữa 2 nguyên tử.
2. Với phiên hàm RHF - Cơ sở STO-3G sử dụng 1 AO cho mỗi nguyên tử Hydro nên 2 MO được tính còn 3-21G sử dụng 2 AO cho mỗi nguyên tử nên 4 MO được tính tương tự cơ sở 6-311G, 3 AO cho mỗi nguyên tử Hydro nên 6 AO được tính, tốc độ hội tụ chậm hơn so với cơ sở STO-3G song chính xác hơn. Tương tự với 3 cơ sở còn lại kết luận **cơ sở 6-311G cho kết quả chính xác hơn.**
3. Các cơ sở đều cho kết quả gần như nhau (tại khoảng 0.75 Angstrom đều là cực tiểu của năng lượng), sát với kết quả thực nghiệm, trong đó, ví dụ:

- Năng lượng toàn phần cực tiểu: -1.12780518536 Ha tại 0.75 Angstrom (cho cơ sở 6-311G) còn thực nghiệm là tại 0.741 Angstrom là -1.164094083 Ha).
- Khoảng cách: Đồ thị chỉ ra **năng lượng cực tiểu năng lượng tại r_0 0.75 Angstrom còn thực nghiệm 0.741 Angstrom** , kết luận phù hợp.

Bảng số liệu tóm tắt kết quả $r_0(\text{\AA})$ và Net Energy(Ha) :

STO-3G	0.70	-1.11734903500
3-21G	0.75	-1.12279503573
4-31G	0.75	-1.12654503067
6-311G	0.75	-1.12780518536
6-31G	0.75	-1.12654503067
Exp	0.741	-1.164094083

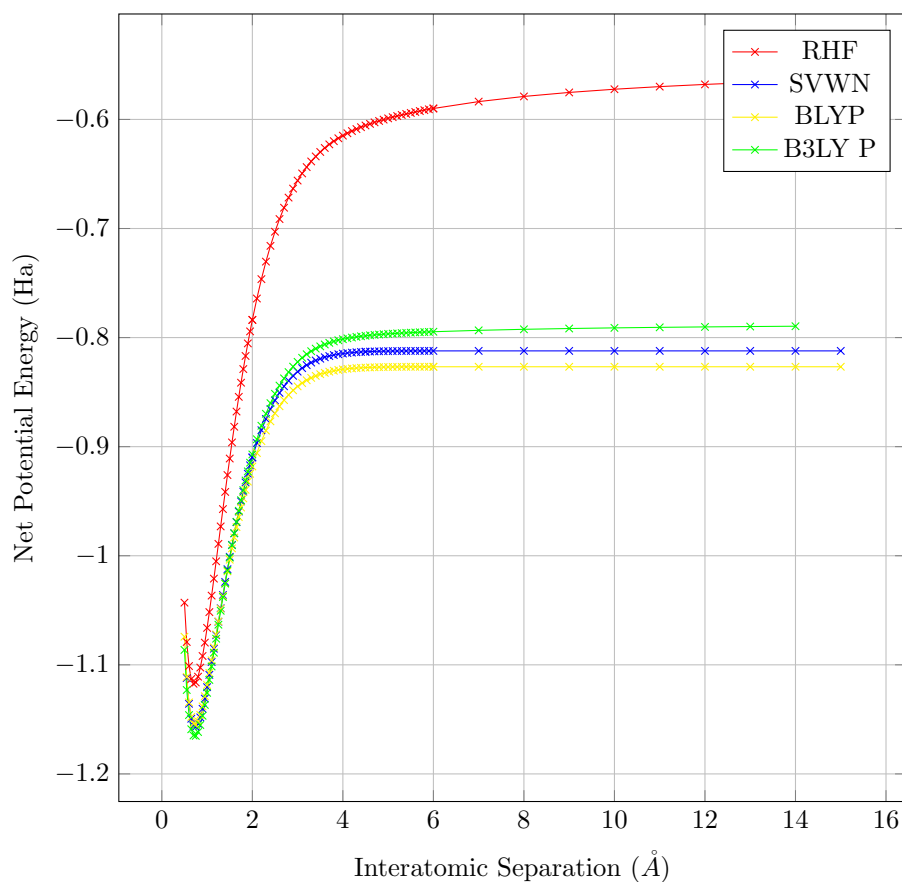
1.3 Thay đổi phiếm hàm

Sử dụng cơ sở *STO-3G* (thử dùng thay vì *6-311G*), thay đổi phiếm hàm *RHF* bằng *LDA (SVWN)*, *GGA (BLYP)* và *hybrid (B3LYP)*:

Số liệu:

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

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



Nhận xét đồ thị:

- **Phiếm hàm B3LYP** cho kết quả gần thực nghiệm nhất, năng lượng cực tiểu gần thực nghiệm nhất tại 0.75 Angstrom, ba phiếm hàm sau không tốt bằng khi xét về năng lượng cực tiểu.

Bảng số liệu tóm tắt kết quả:

RHF	0.70	-1.11734903500
SVWN	0.75	-1.15685286578
BYLP	0.75	-1.15473714597
B3LY P	0.75	-1.16513837666
Exp	0.741	-1.164094083

- **Nhận xét bảng :** Ở đây ta không chạy $r_0 = 0.741$ Amstrong nên kết quả sử dụng 0.75 Angstrom khó để nhận xét. Song tạm kết luận phiên hàm B3LY P cho gần kết quả thực nghiệm nhất.

1.4 Số liệu HOMO-LUMO gap

Chạy Gaussian với tọa độ $r_0 = 0.75$ Angstrom với các phiếm hàm cho kết quả HOMO-LUMO gap như sau:

	HOMO	LUMO	Gap(Ha)	Gap(eV)
B3LY P	-0.435316	0.057284	0.4926	13.4036
RHF	-0.592889	0.167280	0.7602	20.6842
BYLP	-0.382798	0.037594	0.4204	11.4389
SVWN	-0.395792	0.026442	0.4222	11.4890
Exp			0.4336	11.8

Nhận xét số liệu:

- SVWN và BYLP cho kết quả HOMO-LUMO Gap gần số liệu thực nghiệm nhất.

Kết luận sau phần 1 :

1. Cơ sở 6-311G cho năng lượng cực tiểu tại 0.75 Angstrom gần kết quả thực nghiệm nhất.
2. Phiếm hàm B3LY P cho kết quả năng lượng cực tiểu gần thực nghiệm nhất.
3. Phiếm hàm BYLP và SVWN cho kết quả HOMO-LUMO gap gần thực nghiệm nhất.

2 Nhận xét bài báo

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