Ligação Química

1º Semestre de 2019

2ª Prática – Aplicação da teoria de ligação de valência à molécula de H_2.

26 de março

- Objetivos

Determinação do peso das estruturas de ressonância, da energia de dissociação e da energia de ressonância para esta molécula, dentro de vários métodos dessa teoria.

- Antes da prática:

- Quais serão as estruturas de ressonância de uma molécula diatômica homonuclear?
- O que é a energia de ressonância, RE, para uma molécula diatômica?
- Comparando-se os métodos L-VBSCF, L-BOVB ou D-BOVB, qual deve produzir melhores resultados? Por quê?

Desenvolvimento

a) Cálculo L-VBSCF para o H_2.

- prepare as integrais para a molécula de H_2:

preint h2-int.inp

- Examine o arquivo *h2-lvbscf.xmi*
- Faça o cálculo L-VBSCF:

xmvb h2-lvbscf.xmi

- A partir do arquivo *h2-lvbscf.xmo*, obtenha a energia total, o peso das estruturas de ressonância e o recobrimento entre as estruturas de ressonância covalente e iônica.

b) Cálculo L-BOVB.

- Copie os orbitais otimizados pelo cálculo VBSCF para orbitais tentativa para o cálculo BOVB:

cp h2-lvbscf.orb h2-lbovb.gus

- Examine o arquivo *h2-lbovb.xmi* e note as diferenças com o arquivo *h2-lvbscf.xmi.*
- Faça o cálculo L-BOVB:

xmvb h2-lbovb.xmi

- - A partir do arquivo *h2-lbovb.xmo*, obtenha a energia total, o peso das estruturas de ressonância e o recobrimento entre as estruturas de ressonância covalente e iônica.

c) Cálculo da energia de ressonância do H_2.

- - Examine o arquivo que contém a estrutura de ressonância covalente, *h2-lvbscf-1str.xmi*

- Faça o cálculo L-VBSCF:

xmvb h2-lvbscf-1str.xmi

- Copie os orbitais otimizados pelo cálculo VBSCF para orbitais tentativa para o cálculo BOVB:

cp h2-lvbscf-1str.orb h2-lbovb-1str.gus

- Faça o cálculo L-BOVB:

xmvb h2-lbovb-1str.xmi

- Para os arquivos *h2-lvbscf-1str.xmo* e *h2-lbovb-1str.xmo* calcule as energias de ressonância.

d) Cálculo da energia do H.

- Calcule a energia ROHF/cc-pVDZ para o átomo de H:

preint h-preint.inp

- Anote a energia eletrônica, obtida do arquivo *h-preint.log.*

Data para a entrega dos relatórios: Duas semanas após o final da prática.