

Ligação Química
1º Semestre de 2019

3ª Prática – Aplicação da teoria de ligação de valência à molécula de F₂.
2 de abril

- 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 as principais características da “charge shift bond”?

Desenvolvimento

a) Cálculo L-VBSCF para o HF.

- prepare as integrais para a molécula de HF:

```
preint hf-int.inp
```

- Examine o arquivo *hf-lvbscf.xmi*

- Faça o cálculo L-VBSCF:

```
xmvp hf-lvbscf.xmi
```

- A partir do arquivo *hf-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 hf-lvbscf.orb hf-lbovb.gus
```

- Examine o arquivo *f2-lbovb.xmi* e note as diferenças com o arquivo *h2-lvbscf.xmi*.

- Faça o cálculo L-BOVB:

```
xmvp hf-lbovb.xmi
```

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

b) Cálculo D-BOVB.

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

```
cp hf-lbovb.orb hf-dbovb.gus
```

- Examine o arquivo *hf-dbovb.xmi* e note as diferenças com o arquivo *h2-lvbscf.xmi*.

- Faça o cálculo D-BOVB:

xm vb hf-dbovb.xmi

- - A partir do arquivo *hf-dbovb.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 HF.

- - Examine o arquivo que contém a estrutura de ressonância covalente, *hf-lvb scf-1str.xmi*

- Faça o cálculo L-VBSCF:

xm vb hf-lvb scf-1str.xmi

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

cp hf-lvb scf-1str. orb hf-dvb scf-1str.gus

- Faça o cálculo D-VBSCF:

xm vb hf-dvb scf-1str.xmi

- Para os arquivos *hf-lvb scf-1str.xmo* e *hf-dvb scf-1str.xmo* calcule as energias de ressonância, pela diferença entre as energias obtidas pelo cálculo D-BOVB do item b) e as calculadas pelos métodos LVBSCF e D-VBSCF.

d) Cálculo da energia de dissociação do HF.

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

preint h-preint.inp

- Anote a energia eletrônica, obtida do arquivo *f-preint.log*.
- Calcule a energia de dissociação do HF, pela diferença entre a energia calculada nesse item e as energias D-VBSCF e L-BOVB, calculadas nos itens c) e d), respectivamente.

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