

Ćwiczenie 1: Podstawowe właściwości molekuł.

Celem ćwiczenia jest zapoznanie się z podstawowymi funkcjami oraz możliwościami programu ORCA. Wykonana zostanie optymalizacja geometrii molekuly wody, dwutlenku węgla oraz tlenku węgla. Zostanie wyznaczony moment dipolowy molekuł oraz rozkład ładunków atomowych. Student wykona obliczenia częstości drgań i wynikające z nich widmo IR. Dodatkowo zostanie wykonana wizualizacja orbitali molekularnych i potencjału elektrostatycznego.

Zadania:

- Optymalizacja geometrii:** Wykonaj optymalizację geometrii molekuly wody, dwutlenku węgla oraz tlenku węgla, korzystając z metody HF w bazie STO-3G. Polecenie Opt. W pliku wynikowym odczytaj energię molekuly. Sprawdź długości wiązań O-H, C-O oraz kąt H-O-H.
- Częstości drgań, widmo IR:** Korzystając ze zoptymalizowanej geometrii molekuly wody oblicz częstości drgań (opcja NumFreq w wierszu poleceń). Wykorzystując oprogramowanie Avogadro zwizualizuj drgania molekuly i określ ich rodzaj. Wyświetl widmo IR.
- Moment dipolowy:** W pliku wynikowym znajdź wartość momentu dipolowego wody, dwutlenku węgla i tlenku węgla. Jakie ładunki cząstkowe znajdują się na poszczególnych atomach? Aby sprawdzić kierunek wektora użyj programu Avogadro. Jak myślisz, czy moment dipolowy wody (lub innych molekuł) jest zależny od stanu skupienia?
- Wizualizacja orbitali molekularnych:** Aby obejrzeć rozkład orbitali molekularnych w programie Avogadro, w pliku wejściowym (tuż pod wierszem poleceń) utwórz sekcję output:

```
%output  
print[p_mos] 1  
print[p_basis] 2  
end
```

Zadanie przeprowadź dla cząsteczki tlenku węgla. Następnie w programie Avogadro możesz obejrzeć wszystkie wygenerowane orbitale molekularne. Zwróć uwagę na orbitale oznaczone numerami 5,6 (orbitale obsadzone) oraz 8,9 (orbitale nieobsadzone). Jakim typom orbitali one odpowiadają?
- Gęstość elektronowa i potencjał elektrostatyczny.**

Gęstość elektronowa jest automatycznie dodawana do pliku wyjściowego po wygenerowaniu orbitali atomowych. Gęstość elektronową można zwizualizować w programie Avogadro korzystając z zakładki Extension / create surfaces. Następnie wybieramy typ powierzchni (electron density). Istotne jest podanie wartości gęstości elektronowej, która będzie wyświetlana (Iso Value, proponowana $0.05 e/\text{\AA}^3$). Dodatkowo można na powierzchni gęstości elektronowej nanieść wartości potencjału elektrostatycznego. Przypomnijmy, potencjał elektrostatyczny to wartość energii potencjalnej danego ładunku próbnego podzielona przez wartość tego ładunku (zwykle +1 lub -1) znajdującego się w określonej odległości od molekuly – u nas będą to punkty na wygenerowanej powierzchni gęstości elektronowej. W zależności od tego czy mamy do czynienia z atomami dodatnio lub ujemnie naładowanymi, potencjał elektrostatyczny będzie przyjmował dodatnie lub ujemne wartości i będzie informował nas o tym w jaki sposób gęstość elektronowa jest spolaryzowana, jakie są potencjalne możliwości oddziaływania molekuly z innymi molekułami oraz jakie są centra nukleofilowe/elektrofilowe.