

Ćwiczenie 2: Zależność konformacja-energia. Skan.

Celem ćwiczenia jest prześledzenie zmian konformacji w cząsteczce 1,2-difluoroetanu oraz określenie najbardziej stabilnej konformacji przy wykorzystaniu metod chemii kwantowej.

Zadania:

1. Wykonaj optymalizację geometrii molekuly difluoroetanu (konformacja anti).
2. Wykonaj skan energii konformacji difluoroetanu przy zmianie kąta dwuściennego F-C-C-F o 5 stopni oraz optymalizacji pozostałych parametrów (jest to tzw. relaxed energy scan). Poniżej podano przykład wykorzystania opcji skan:

! HF STO-3G Opt	Linia komend głównych: Metoda obliczeń HF, baza STO-3G, Opt – optymalizacja geometrii. W przypadku optymalizacji geometrii – wszystkie parametry i położenia atomów będą optymalizowane przy zachowaniu stałej odległości/kąta/kąta dwuściennego pomiędzy danymi atomami zgodnie z tym jak to zdefiniujemy w sekcji geom.
%geom	Otwarcie sekcji geometria
Scan	Otwarcie podsekcji skan
D 3 0 1 2 = 0.00, 15.0, 4	D – skanowany będzie kąt dwuścienny między atomami 3 (Cl) 0 1 i 2 (A – kąt, B – odległość), 0.0 to początkowa wartość kąta torsyjnego, 15 końcowa, zaś 4 to liczba kroków (a zatem zmiana będzie co 5° – proszę pamiętać że należy uwzględnić wartość początkową i końcową).
end	Zakończenie podsekcji skan
end	Zamknięcie sekcji geometria
*xyz 0 1 C 0.26189 0.003851 -0.00000 Br -2.13772 -0.031431 0.00000 H 0.31587 0.53386 0.916529 H 0.33921 -1.05344 -0.000000 H 0.31587 0.53386 -0.916529 Cl 2.661638 0.039141 0.000000 *	Blok położenia atomów (układ kartezjański) W programie ORCA pierwszy atom ma oznaczenie 0, drugi 1 itp.

3. W arkuszu kalkulacyjnym przedstaw wyniki skanu. Określ położenie minimum globalnego i lokalnego, jak również punkty maksimum. Jakim konformacjom molekuly odpowiadają te punkty?