

Bevezetés ORCA kvantumkémiai program használatába

A számítógépes kémia egyik fontos területe a kvantumkémia, amely a kvantummechanikai elméletet alkalmazza az atomok, molekulák, ionok és szupermolekulák szerkezetének és tulajdonságainak vizsgálatára. Kvantumkémiai számításokat segítő szoftverek nagyban hozzájárulnak a kutatók és az ipari szakemberek munkájához, lehetővé téve molekulák spektrális tulajdonságainak és reakcióinak modellezését, kísérleti eredmények értelmezését és predikcióját. A bemutató ezen eszköztár teljesítőképességének és használatának bemutatására szolgál az alábbi kisebb projekteken keresztül:

Az első projekt a lángfestés kvantumkémiai értelmezése és az atomok elektronegativitásának számítása. Relatív egyszerű kvantumkémiai rendszerek az atomok, amelyek kiválóan alkalmasak arra, hogy tulajdonságaikat vizsgálva könnyen bevezethessük a kvantumkémiai számítások rejtelmeibe az az iránt érdeklődőket. Jelen előadásban az ORCA nevű kvantumkémiai szoftverrel dolgozva gyorsan eljuthatunk az első input elkészítéséhez és az első kvantumkémiai számításokhoz. Az atomok atomi pályáinak vizuális megjelenítése és kategorizálása lehetőséget teremt olyan fogalmak egyszerű bevezetésére, amelyek fontos szerepet töltenek be a spektrális viselkedés tanulmányozásában. A pontosság növelése érdekében az atomok gerjesztett állapotainak különböző módszerekkel történő számítása is része a projekteknek. Az ionizációs energia, elektronaffinitás és elektronegativitás számítása szintén közelebb viszi ezen fogalmak valódi jelentéséhez a felhasználót.

A második projekt során egyszerű molekulákra végzett kvantumkémiai számításokból származó szerkezeti adatok és a mikrohullámú (MW) és infravörös (IR) spektrumok értelmezését és összevetését végezzük el. Bemutatásra kerül a potenciális energiafelület és a molekula definíciója közötti kapcsolat és a molekulaszervezet meghatározásának gyakorlati vonatkozásai, illetve a geometriai optimalizáció során felvetődő problémák és kiküszöbölésük, valamint a potenciális felület letapogatására alkalmas eljárás ismertetése. A molekula normálrezgéseinek számításának egyszerűsített elméleti háttere és gyakorlati alkalmazása szintén része a projekteknek. A kvantumkémiai számítási eredmények ellenőrzése fontos lépés a megbízhatóságuk és pontosságuk biztosítása érdekében. Az MO-elmélet pályaosztályzásán túl, szemléletes kötéselméleti kitérőt teszünk az alkalmazott „atomok a molekulában” (AIM) elmélet irányába is.

A harmadik projekt témája az iparilag is jelentős ammóniaszintézisre alkalmazott "Le Chatelier-Braun-elv" vizsgálata. A Le Chatelier-Braun-elv a kémiai egyensúlyra gyakorolt külső tényezők, mint például a hőmérséklet és a nyomás hatását tanulmányozza. A kvantumkémiai számításokból származó molekulaparaméterek lehetővé teszik ezeknek a tényezők hatásának modellezését és az egyensúlyi viszonyok előrejelzését az állapotösszegek segítségével. Ezáltal a kvantumkémia segítségével számokkal is meghatározhatjuk, hogyan változik a reakció egyensúlya a különböző körülmények között.

Introduction to ORCA Quantum Chemistry Program

One important area of computational chemistry is quantum chemistry, which applies quantum mechanical theory to investigate the structure and properties of atoms, molecules, ions, and supermolecules. Software tools that assist in quantum chemical calculations greatly contribute to the work of researchers and industrial professionals, enabling the modeling of spectral properties and reactions of molecules, interpretation of experimental results, and prediction. The presentation aims to showcase the performance and usage of this toolkit through the following smaller projects:

The first project focuses on the quantum chemical interpretation of excitations in flame and the calculation of atom electronegativity. Relatively simple quantum chemical systems involving atoms are ideal for introducing interested individuals to the intricacies of quantum chemical calculations. In this presentation, working with the ORCA quantum chemistry software, we can quickly reach the preparation of the first input and perform initial quantum chemical calculations. The visual representation and categorization of atomic orbitals provide an opportunity to introduce concepts, which play an important role in studying spectral behavior. Calculating the excited states of atoms using various methods is also part of the projects to increase accuracy. Calculation of ionization energy, electron affinity, and electronegativity brings the user closer to understanding the true meaning of these concepts.

The second project involves the interpretation and comparison of structural data derived from quantum chemical calculations on simple molecules and the microwave (MW) and infrared (IR) spectra. The relationship between the potential energy surface and the definition of a molecule, as well as the practical implications of determining molecular structure and addressing problems during geometry optimization, will be presented. The procedure for scanning the potential energy surface will also be discussed. The simplified theoretical background and practical application of calculating molecular normal vibrations are also part of the projects. Verification of quantum chemical computation results is an important step to ensure their reliability and accuracy. In addition to the MO theory, we will also provide an illustrative overview of the applied "Atoms in a Molecules" (AIM) theory.

The third project focuses on the investigation of the "Le Chatelier-Braun principle" applied to industrially relevant ammonia synthesis. The Le Chatelier-Braun principle examines mainly the temperature and pressure effects on the chemical equilibrium. Quantum chemical calculations enable the modeling of these effects via generating such molecular properties which necessary for obtaining the partition functions. Given the values of the partition functions, the prediction of equilibrium conditions can be done. Thus, with the help of quantum chemistry, we can quantitatively determine how the equilibrium of a reaction changes under different conditions.