

CALCULE *ab initio* A MOLECULEI DE OXIGEN

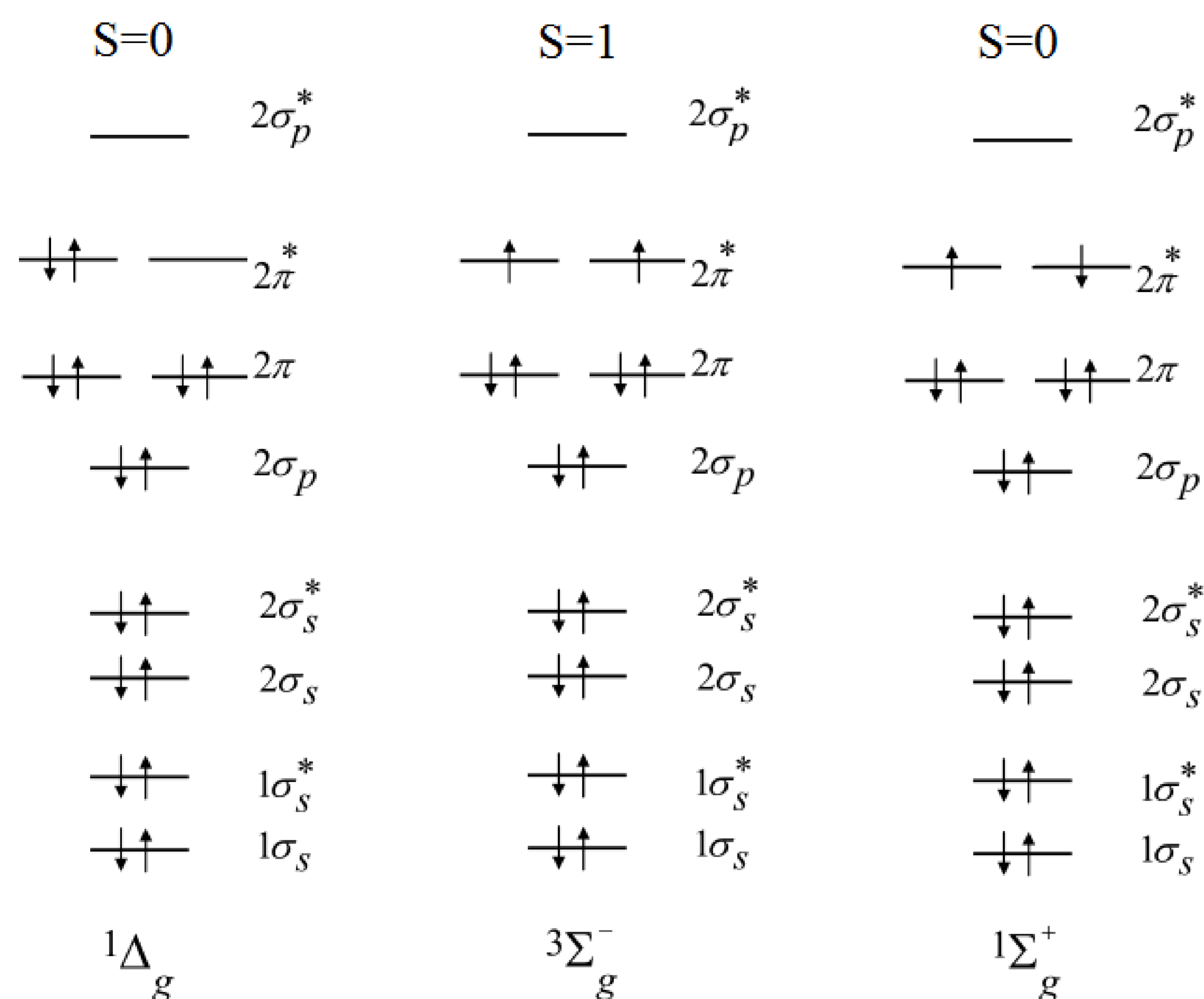
Curnic Victoria, Viorica Mîrzac, Universitatea de Stat de Medicină și Farmacie „Nicolae Testemițanu”, Chișinău, Republica Moldova

Introducere

Oxigenul participă în calitate de catalizator și oxidant în multe procese iar energia de activare mare a reacțiilor se datorează atât energiei legăturii cât și valorii spinului oxigenului.

Cuvinte-cheie

Calculare *ab initio*
Molecula O₂



Configurațiile orbitalilor moleculari de antilegătură 2π* în stările fundamentale triplet ³Σ_g⁻ și excitate singlet ¹Δ_g și ¹Σ_g⁺ a moleculei O₂.

Scopul

Cercetarea structurii moleculei de oxigen prin calcule cuanto-chimice

Material și metode

Calculare *ab initio* MO LCAO Hartree-Fock-Roothaan SCF cu aproximări RHF sau ROHF, baze 6-31G* și TZV, programul GAMESS**

Rezultate

Prezența a doi electroni HOMO pe orbitalul molecular degenerat 2π* permite moleculei O₂ stări de singlet și triplet. Optimizarea structurii electronice a moleculei de oxigen cu M=1 și M=3 a identificat pentru stările excitate singlet ¹Δ_g și ¹Σ_g⁺ o reactivitate sporită în comparație cu starea fundamentală paramagnetică ³Σ_g⁻ (-149,6040 u.a.).

Concluzii

Stările excitate singlet au energii mai înalte și distanțe mai mari dintre atomi în molecula O₂ în comparație cu starea fundamentală triplet (1,21Å). Reactivitatea sporită a stărilor singlet se caracterizează prin o necesitate de energie de disociere mai mică decât în O₂ triplet.

** M.W. Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S.J. Su, T.L. Windus, together with M. Dupuis, J.A. Montgomery // J.Comput. Chem. 1993, v.14, p.1347-1363.