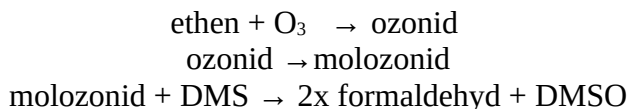


C9540
SEMINÁRNÍ ÚLOHA č. 1
Analýza mechanismu ozonolýzy

ZADÁNÍ

1. Vytvořte si modely následujících reakčních kroků ozonolýzy ethenu, zoptimalizujte jejich geometrie a zkontrolujte existenci lokálních minim pomocí frekvenční analýzy. Použijte software Orca na úrovni teorie **B3LYP/D4 def2-TZVPP** a implicitní model methanolu (CPCM)



2. Pro každý krok reakční cesty se pokuste najít a zoptimalizovat tranzitní stav. K tomuto účelu použijte **NEB-TS** nástroj společně s **FREQ** výpočtem, přičemž jednotlivé trajektorie budou vymezeny vámi zoptimalizovanými intermediáty. Před výpočtem si ověřte shodné číslování atomů reaktant versus produkt.

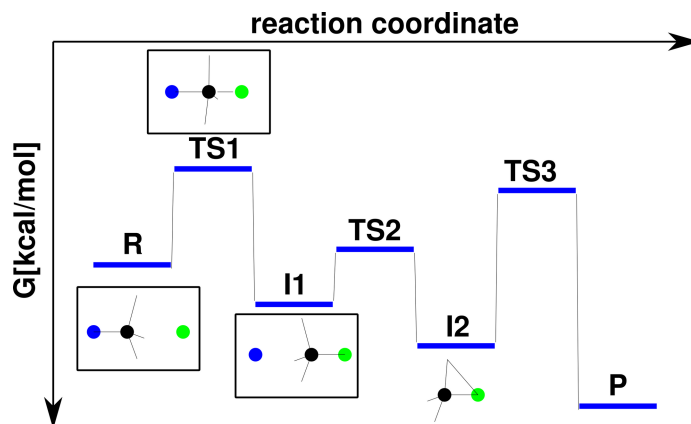
```
%NEB
  NEB_END_XYZFILE "product.xyz"
END
* XYZFILE 0 1 reactant.xyz
```

Zaznamenejte, podél jaké interní koordináty se realizuje jediná imaginární frekvence n . Pro zobrazení použijte nástroj:

```
orca_pltvib inp.orca.hess n
```

3. Vyplotujte graf závislosti energie na reakční koordinátě (inp.orca.final.interp). Označte strukturami počáteční a koncový stav, TS a případná další lokální minima (doplňte obrázky struktur). Pro všechny intermediáty zaznamenejte podobu a energii hraničních orbitalů (zejména HOMO, LUMO, jejich indexy najdete v inp.orca.stdout souboru, pro generování *cube souborů použijte interaktivní příkaz **orca_plot inp.orca.gbw -i**). Pokuste se vyhodnotit změny energie a rozložení těchto MO.

4. Zobrazte v podobě grafu celkovou volnou energii všech reakčních intermediátů s jejich vyobrazením, porovnejte stabilitu a označte rychlost určující krok reakce. Ilustrační obrázek uveden níže:



Řešení v podobě dokumentu obsahujícího komentáře a schémata zašlete na e-mail novotnyjan@mail.muni.cz ideálně do 30. 10.

