

PRACTICO 3

Realizando cálculos simples con Polyrate: análisis del archivo de salida principal (poly.fu6) y del archivo de salida resumida (poly.fu15) del programa Polyrate 8.0.

Objetivos:

- Llevar a cabo un cálculo simple con el programa Polyrate 8.0
- Analizar e interpretar el contenido de los archivos de salida correspondientes a un cálculo realizado sobre una superficie analítica.

1. Realizando cálculos con Polyrate 8.0: dinámica sobre superficies analíticas

En el práctico anterior se analizó la estructura del archivo de entrada principal generado para el estudio de la reacción $\text{CH}_3 + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$ empleando una superficie analítica. A continuación se ejecutará un cálculo similar y se analizará el contenido de los archivos de salida generados.

Para ejecutar un cálculo con el programa Polyrate, Ud. debe crear un archivo ejecutable (un archivo de comandos que usualmente lleva la extensión .jc) en el que se especifica el nombre del archivo desde el que se obtendrá la información de la unidad **fu5** (note que el programa Polyrate copia el contenido del archivo de datos que Ud. crea como entrada a un archivo fu5 genérico y que vuelca también el resultado de sus cálculos sobre un archivo **fu6** genérico, el cual es copiado al final del cálculo sobre un archivo de salida específico con el nombre por Ud. indicado; esto implica que no es posible realizar dos cálculos Polyrate en paralelo desde la misma ubicación) y las características del ejecutable correspondiente al programa Polyrate a utilizar para realizar el cálculo. En este caso este archivo ya ha sido creado, proceda a editarlo.

- Ubíquese en el directorio *ch5*, bajo *testrun*
- Edite el archivo **ch5j1tr1.jc**, (con **vi** o con **joe**). Con la ayuda de su instructor trate de identificar el significado de las instrucciones contenidas en este archivo.
- Examine ahora rápidamente el archivo de entrada **ch5j1tr1.jc**

Este archivo de entrada realiza el cálculo de constantes de velocidad de la reacción $\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$ a partir de la SEP analítica contenida en el archivo **potch5j1.dat**. Se calculan constantes de velocidad con TST, CVT e ICVT con correcciones del efecto túnel MEPSAG (ZCT), CD-SCSAG (SCT) y LCG3 (LCT). La inclusión del efecto túnel en los cálculos de cinética se discutirá en una clase posterior dentro de este mismo curso. Las constantes de velocidad son evaluadas a 10 temperaturas (200, 250, 298, 300, 400, 500, 600, 800, 1000, 1500) y las energías de activación son predichas para 6 rangos de temperatura (200-298, 200-400, 298-400, 298-600, 298-800, 298-1000).

- Corra el cálculo correspondiente especificando en la línea de comandos linux

./ch5j1tr1.jc &

El signo **&**, le permite realizar el cálculo en modo background, permitiéndole seguir realizando otras tareas dentro de la misma sesión de linux en tanto el proceso avanza. Si olvida incluirlo, observará que hasta que el cálculo concluya la sesión quedará bloqueada.

Como podrá observar, estos cálculos en los que la información se obtiene de una superficie analítica son muy rápidos. Lamentablemente no existen superficies analíticas desarrolladas para un número muy amplio de reacciones. Las mismas están disponibles sólo para reacciones muy simples y requieren un arduo trabajo previo en la creación de la SEP.

2. Analizando archivos de salida.

Observe que al ejecutarse un cálculo con Polyrate se generan tres archivos, con extensiones **.fu6**, **.fu15** y **.time**, respectivamente. El archivo **.fu6** (conocido también como salida extensa, *long output*) contiene toda la información producida al realizar el cálculo, mientras que el archivo **.fu15** contiene únicamente un resumen con el valor de las constantes de velocidad de reacción calculadas con distintos métodos a distintas temperaturas. El archivo **.time** contiene la historia del proceso, la cual incluye la secuencia de archivos que han sido ejecutados e indicaciones relativas a problemas en el cálculo realizado (por tanto si su cálculo aborta sin llegar a generar una salida que pueda analizar, una buena práctica consiste en examinar el contenido del archivo time).

- Proceda a analizar el archivo .time asistido por el instructor del curso.
- Abra ahora el archivo de **fu6** correspondiente al cálculo realizado en la primera parte de esta práctica.

Observe que al comienzo del archivo **fu6** el mismo contiene secciones análogas a las del archivo de entrada, donde se especifican las distintas opciones de cálculo empleadas. Una buena práctica para el trabajo en esta área consiste en verificar que el cálculo solicitado responde efectivamente al tipo de estudio que se desea realizar. Recuerde que el programa Polyrate asigna valores por defecto a los comandos de cada sección aún cuando Ud. no los escriba explícitamente. Esto puede conducir a que no todas las opciones que corresponden a un cálculo estén especificadas en forma correcta.

- El comienzo del informe de resultados se indica con una línea completa de asteriscos. Proceda a analizar los resultados con la ayuda de su instructor.

Los resultados del cálculo de estructura y análisis vibracional están organizados en distintas secciones para reactivos, productos y estado de transición donde se especifica el valor de las coordenadas cartesianas, constantes de fuerza, frecuencias y valores propios del Hessiano obtenidos para cada especie.

```
***** Reactants:

Initial guess for geometry of reactants in space-fixed cartesians (bohrs):

      X      Y      Z
1  0.000000E+00  7.010000E-01  0.000000E+00
2  2.067292E+00  0.000000E+00  0.000000E+00
3 -1.033654E+00  0.000000E+00  1.790395E+00
4 -1.033654E+00  0.000000E+00 -1.790395E+00
5 -1.544000E-05  0.000000E+00  0.000000E+00
6  0.000000E+00 -7.010000E-01  0.000000E+00

***** Reactant 1 *****

For IOP = 1:
Species is a 4-atom polyatomic made up of atoms: 2 3 4 5
Electronic degeneracies and energies (a.u.) = 2 .00000000
      0 .00000000
      0 .00000000

Anharmonicity for mode(i) is: 0 0 0 0 0

New center of mass is at -7.674822E-10 0.000000E+00 8.234044E-18
bohrs with respect to previous origin.
Products of three principal moments of inertia (a.u.) = 3.266855E+12

-----
Harmonic Frequencies
-----
      a.u.      eV      cm**1      kcal
Mode 1  .0144582  .3934  3173.20  9.0726
Mode 2  .0144579  .3934  3173.15  9.0726
Mode 3  .0126010  .3702  2995.04  8.5273
```

Esta información puede haber sido leída de uno de los archivos de entrada (en el caso de IVTST o Dual Level) o calculada a partir de una superficie analítica, como sucede en el

cálculo recién realizado. En caso que se esté realizando una optimización de geometría recurriendo a los métodos internos del programa, conviene controlar en esta sección la naturaleza de los puntos estacionarios encontrados. Resulta crucial para un buen cálculo de las propiedades cinéticas el que no existan valores propios negativos espúreos del Hessiano.

Luego de las propiedades de reactivos y productos, la salida despliega un resumen de la energética de la reacción (energías relativas con inclusión de las ZEP o sin ella), en un formato de tabla como del mostrado en la figura:

```

In this table Ve denotes the potential energy at classical equilibrium,
i.e., the energy of an optimized reactant or product.
Further, E^G denotes the ground-state energy, i.e., E^G = Ve + ZPE.
-----
Reaction energetics
-----

```

	Reactant Ve	Reactant E^G	Product Ve	Product E^G
kcal/mol				
w/re reactants Ve	.0000	29.5250	.6714	34.5958
w/re reactants E^G	-29.5250	.0000	-28.8536	5.0708
w/re products Ve	-.6714	28.8536	.0000	33.9244
w/re products E^G	-34.5958	-5.0708	-33.9244	.0000
eV				
w/re reactants Ve	.0000	1.2803	.0291	1.5002
w/re reactants E^G	-1.2803	.0000	-1.2512	.2199
w/re products Ve	-.0291	1.2512	.0000	1.4711
w/re products E^G	-1.5002	-.2199	-1.4711	.0000
hartree atomic units (a.u.)				
w/re reactants Ve	.0000000	.0470511	.0010700	.0551319
w/re reactants E^G	-.0470511	.0000000	-.0459811	.0080809
w/re products Ve	-.0010700	.0459811	.0000000	.0540619
w/re products E^G	-.0551319	-.0080809	-.0540619	.0000000
cm** -1				
w/re reactants Ve	.0	10326.5	234.8	12100.1
w/re reactants E^G	-10326.5	.0	-10091.7	1773.5
w/re products Ve	-.234.8	10091.7	.0	11865.2
w/re products E^G	-12100.1	-1773.5	-11865.2	.0
Zero of energy				
EZERO =	0.00000E+00	hartree atomic units (a.u.)		
	0.00000E+00	eV		
	0.00000E+00	cm** -1		
	0.00000E+00	kcal/mol		

Análogamente, una vez que concluye la sección de resultados del punto de ensilladura, se despliega un resumen de datos relativos a la energía de activación en términos de energía interna y correcciones de punto cero para la reacción directa e inversa:

```

-----
Saddle point energetics (V = classical energy, ZPE = zero point energy)
-----

```

	hartrees	eV	cm** -1	kcal
V w/re reactants V	.03899	1.06109	8558.19	24.4691
V w/re product V	.03792	1.03197	8323.36	23.7977
V+ZPE w/re reactant V	.09025	2.45576	19806.86	56.6306
V+ZPE w/re product V	.08918	2.42664	19572.02	55.9592
V+ZPE w/re reactant V+ZPE	.04320	1.17542	9480.34	27.1057
V+ZPE w/re product V+ZPE	.03511	.95553	7706.79	22.0348
V+ZPE w/re saddle point V	.05125	1.39467	11248.66	32.1615

Posteriormente aparece una sección que contiene información detallada de las estructuras que corresponden al camino de reacción, indicando su ubicación sobre el mismo en unidades atómicas:

```

***** Detailed reaction path information *****

(s in mass-scaled bohrs)
(V in hartrees)
(X,Y,Z in unscaled bohrs)
(DX,DY,DZ in unscaled hartree/bohr)

INTERATOMIC DISTANCES IN BOHR @ S = .01000 bohr

      1      2      3      4      5
1 .000000E+00
2 .370090E+01 .000000E+00
3 .370090E+01 .343903E+01 .000000E+00
4 .370090E+01 .343903E+01 .343903E+01 .000000E+00
5 .253009E+01 .207222E+01 .207222E+01 .207222E+01 .000000E+00
6 .171353E+01 .522841E+01 .522841E+01 .522841E+01 .424362E+01

```

Como cierre de esta sección, la salida presenta un resumen de otras propiedades de los puntos sobre el camino de reacción, que incluye su energía interna clásica y adiabática, la masa reducida efectiva y las frecuencias vibracionales correspondientes a cada punto:

```

***** Reaction path *****

All s values and step sizes are in mass-scaled bohrs.

For the path of steepest descent:
  Max no. of steps in each direction = 99999
  Hessian grid multiple (INH) = 50
  Path stopped if s > 1.600000 or s < -1.600000

The initial step is in the direction of positive s.

Note: ZPE of imaginary frequencies will be set to
      zero when using the harmonic approximation.

  Classical and adiabatic energies (kcal/mol), effective CD-SC reduced
  mass (mu) (a.u.), and frequencies (cm**(-1)) vs. s
s(bohr)  VMEP    Va^G    mu^CD-SC  frequencies (cm**(-1))
-1.600   4.4632   36.0924  1822.84  5434  3824  3824  3555  1697  1697  788
          400  400  253  253
-1.550   4.4632   36.0924  1822.84  5434  3824  3824  3555  1697  1697  788
          400  400  253  253
-1.500   4.4632   36.0924  1822.84  5434  3824  3824  3555  1697  1697  788
          400  400  253  253
-1.450   4.7911   36.4885  1624.21  5425  3824  3824  3555  1698  1698  804
          413  413  260  260
-1.400   5.1392   36.9062  1659.51  5416  3824  3823  3555  1699  1699  820
          426  426  267  267
-1.350   5.5098   37.3478  1682.79  5405  3823  3823  3555  1700  1700  836
          441  441  274  274
-1.300   5.9024   37.8127  1701.06  5392  3823  3823  3556  1701  1701  853
          456  456  282  282
-1.250   6.3196   38.3031  1716.46  5378  3822  3822  3556  1702  1702  870
          471  471  289  289
-1.200   6.7612   38.8190  1734.65  5361  3821  3821  3556  1703  1703  888
          488  488  297  297
-1.150   7.2285   39.3614  1750.93  5343  3821  3821  3556  1704  1704  906
          505  505  306  305
-1.100   7.7235   39.9320  1764.60  5322  3820  3820  3557  1706  1706  924
          524  524  314  314
-1.050   8.2462   40.5307  1775.01  5298  3820  3820  3557  1707  1707  943
          543  543  323  323

```

Más adelante se encuentra un bloque que contiene la información relativa al resultado del cálculo de las constantes de velocidad para los métodos utilizados a distintas temperaturas y el resultado del cálculo de las propiedades termodinámicas solicitadas en el archivo de entrada.

```

***** Reaction rate calculations *****

NGSPEC = -1 free energy computed for -.25000 < s < .25000
Temperature loop : NTEMP = 10
For tunneling, NQ12,NQ22 = 10 40
For this run, VMEP has been multiplied by 1.00000

-----
Energetics at adiabatic maximum (VAD)
-----
          hartrees   eV   cm**1   kcal
3 pointfit s = -.0868
VAD w/re reactant V      .0588   1.5997  12902.32  36.8896
VAD w/re product V      .0632   1.7199  13871.79  39.6614
VAD w/re reactant V+ZPE  .0199   .5407   4360.74  12.4680

```

Posteriormente se despliegan una serie de secciones con información relativa a las probabilidades de trasmisión, que analizaremos más adelante, una vez encarado el tema en la clase teórica correspondiente. Avance ahora hasta encontrar la información relativa a las funciones de partición de reactivos, productos y puntos sobre el camino de reacción calculadas a distintas temperaturas:

```

***** Temperature = 200.00 K *****
-----
Reactant and product partition functions w/re classical energy of reactant
-----
          Qelec   Phi_rel   Qrot   Qvib   Phi
Reactant:
  atomic units  2.00000  1.8661E-01  3.3033E+02  2.0930E-27  2.5805E-25
  CGS units    1.2593E+24
Product:
  atomic units  2.00000  7.2727E-02  2.4209E+02  1.8301E-30  6.4443E-29
  CGS units    4.9079E+23
-----
Note: Phi_rel is the relative translational partition function.
      Phi is the product of all the partition functions to its left.
-----
          Individual vibrational partition functions
-----
Reactant 1 :   1.104E-05   1.104E-05   2.166E-05   6.918E-03   6.918E-03
               1.261E-01
Reactant 2 :   1.313E-07
Product 1 :   1.787E-05   1.787E-05   1.787E-05   3.220E-05   4.452E-03
               4.452E-03   7.951E-03   7.952E-03   7.953E-03
-----
          s(bohr) = -.24500   Qelec = 2.00000
-----
          Qrot   Qvib   Q^GT   Q^IGT
7.0406E+02  4.1558E-30  5.8518E-27  5.1565E-27
-----
          Individual GTS qvib:
.1211E-04   .1211E-04   .1609E-04   .2083E-04   .8561E-02
.8561E-02   .3147E-01   .3558E-01   .3558E-01   .1701E+00
.1701E+00

```

Posteriormente encontrará una tabla con las características del estado de transición generalizado:

Canonical Variational Transition State Properties				
	CVT s (T) * (bohr)	G V [s (T)] a * (kcal/mol)	CVT Gmax (T) (kcal/mol)	k(T) (cm**3/molecule-sec)
3-Point fit	-0.0820	36.889	34.237	6.449E-25
5-Point fit	-0.0820	36.889	34.237	6.449E-25

y una tabla que recolecta las distintas constantes de velocidad calculadas con distintos métodos en función de la temperatura, con y sin correcciones cuánticas.

Forward rates (cm**3/molecule-sec)				
T (K)	TST	TST/W	TST/CAG	CVT
200.00	8.4107E-25	2.6126E-24	6.2609E-25	6.4486E-25
250.00	3.0750E-22	7.2202E-22	2.4282E-22	2.5149E-22
298.00	1.3367E-20	2.6049E-20	1.0965E-20	1.1430E-20
300.00	1.5231E-20	2.9489E-20	1.2510E-20	1.3045E-20
400.00	1.9388E-18	2.9598E-18	1.6728E-18	1.7683E-18
500.00	3.5564E-17	4.7550E-17	3.1603E-17	3.3725E-17
600.00	2.5295E-16	3.1215E-16	2.2925E-16	2.4554E-16
800.00	3.1798E-15	3.5984E-15	2.9536E-15	3.1518E-15
1000.00	1.5979E-14	1.7326E-14	1.5063E-14	1.5818E-14
1500.00	1.7853E-13	1.8521E-13	1.7164E-13	1.7853E-13
T (K)	CVT/CAG	ICVT		
200.00	6.4420E-25	6.4486E-25		
250.00	2.5101E-22	2.5149E-22		
298.00	1.1391E-20	1.1430E-20		
300.00	1.2999E-20	1.3045E-20		
400.00	1.7522E-18	1.7683E-18		
500.00	3.3128E-17	3.3724E-17		
600.00	2.3892E-16	2.4554E-16		
800.00	3.0267E-15	3.1517E-15		
1000.00	1.5518E-14	1.5818E-14		
1500.00	1.7163E-13	1.7853E-13		
T (K)	TST/ZCT	CVT/ZCT	ICVT/ZCT	
200.00	3.4055E-24	3.5040E-24	3.5076E-24	
250.00	6.4908E-22	6.7096E-22	6.7226E-22	
298.00	2.1236E-20	2.2062E-20	2.2138E-20	
300.00	2.3996E-20	2.4934E-20	2.5022E-20	
400.00	2.3765E-18	2.4893E-18	2.5123E-18	
500.00	3.9408E-17	4.1309E-17	4.2052E-17	
600.00	2.6683E-16	2.7809E-16	2.8579E-16	
800.00	3.2144E-15	3.2939E-15	3.4300E-15	
1000.00	1.5898E-14	1.6378E-14	1.6694E-14	
1500.00	1.7578E-13	1.7578E-13	1.8284E-13	

Dado que en este caso se solicita imprimir los resultados de las energías de activación en distintos rangos de temperatura, esta salida también incluye los valores correspondientes obtenidos a partir de las constantes en cada nivel de teoría.

Activation energies (kcal/mol)					
Lower T	Upper T	(Ave T) ^{-1 -1}	TST	TST/W	CVT
200.00	298.00	239.36	11.6911	11.1276	11.8230
200.00	400.00	266.67	11.6456	11.0809	11.7836
298.00	400.00	341.55	11.5583	10.9913	11.7080
298.00	600.00	398.22	11.5867	11.0492	11.7359
298.00	800.00	434.24	11.6829	11.1700	11.8223
298.00	1000.00	459.17	11.8050	11.3104	11.9285
Lower T	Upper T	(Ave T) ^{-1 -1}	TST/CAG	CVI/CAG	ICVT
200.00	298.00	239.36	11.8084	11.8200	11.8230
200.00	400.00	266.67	11.7629	11.7771	11.7836
298.00	400.00	341.55	11.6756	11.6946	11.7080
298.00	600.00	398.22	11.7040	11.7078	11.7359
298.00	800.00	434.24	11.8003	11.7873	11.8223
298.00	1000.00	459.17	11.9223	11.9152	11.9285
Lower T	Upper T	(Ave T) ^{-1 -1}	TST/ZCT	CVI/ZCT	ICVI/ZCT
200.00	298.00	239.36	10.5604	10.5721	10.5750
200.00	400.00	266.67	10.6958	10.7100	10.7165
298.00	400.00	341.55	10.9560	10.9750	10.9884
298.00	600.00	398.22	11.1049	11.1087	11.1368
298.00	800.00	434.24	11.2563	11.2433	11.2783
298.00	1000.00	459.17	11.4102	11.4031	11.4164
Lower T	Upper T	(Ave T) ^{-1 -1}	TST/SCT	CVI/SCT	ICVI/SCT
200.00	298.00	239.36	9.1625	9.1742	9.1771
200.00	400.00	266.67	9.4988	9.5129	9.5194
298.00	400.00	341.55	10.1449	10.1639	10.1773
298.00	600.00	398.22	10.4358	10.4395	10.4676
298.00	800.00	434.24	10.6506	10.6377	10.6727
298.00	1000.00	459.17	10.8408	10.8337	10.8470

Idem para la reacción reversa:

Activation energies (kcal/mol)					
Lower T	Upper T	(Ave T) ^{-1 -1}	TST	TST/W	CVT
200.00	298.00	239.36	12.2052	11.6417	12.3371
200.00	400.00	266.67	12.2538	11.6891	12.3918
298.00	400.00	341.55	12.3471	11.7801	12.4968
298.00	600.00	398.22	12.5337	11.9962	12.6829
298.00	800.00	434.24	12.7109	12.1980	12.8502
298.00	1000.00	459.17	12.8681	12.3736	12.9916

Finalmente se incluye información sobre la ubicación y características generales de la hiperficies divisoria a cada temperatura:

Bottleneck properties (TST and CVT)							
T (K)	s (bohr)	VMEP (kcal)	Va [^] G (kcal)	I (a.u.)	frequencies (cm ^{**} -1)		
S.P.	.0000	10.233909	36.772271	6.5850E+13	3123	3123	3103
					1720	1379	1379
					1212	1212	1131
					591	591	
.00	-.0868	10.118332	36.889590	6.9173E+13	3137	3137	3080
					2263	1351	1351
					1104	1104	1066
					568	568	
200.00	-.0820	10.129096	36.889186	6.8958E+13	3136	3136	3081
					2234	1352	1352
					1110	1110	1070
					570	570	
250.00	-.0794	10.134783	36.888627	6.8843E+13	3136	3136	3081
					2217	1353	1353
					1113	1113	1072
					571	571	
298.00	-.0761	10.141951	36.887554	6.8695E+13	3135	3135	3082
					2197	1354	1354
					1117	1117	1074
					572	572	
300.00	-.0760	10.142283	36.887494	6.8688E+13	3135	3135	3082
					2196	1354	1354
					1117	1117	1074
					572	572	
400.00	-.0666	10.161419	36.882279	6.8280E+13	3134	3134	3085
					2136	1356	1356
					1129	1129	1081
					575	575	
500.00	-.0552	10.182246	36.871857	6.7805E+13	3133	3133	3087
					2062	1360	1360
					1143	1143	1090
					579	579	
600.00	-.0436	10.200398	36.856992	6.7345E+13	3131	3131	3090
					1987	1364	1364
					1158	1158	1098
					583	583	

Análisis de un archivo fu15

- Abra ahora el archivo **.fu15** correspondiente al cálculo realizado.

Como ya se ha comentado previamente, el archivo fu15 es un resumen de las constantes de velocidad a las distintas temperaturas especificadas en el archivo de entrada.

```
-----  
CH3 + H-H -> CH4 + H J1 PES-Harmonic-Page-McIver with lcg3,  
Test run ch5j1tr1  
-----
```

Summary of forward rate constants (cm³/molecule-1 s-1) :

T (K)	TST	CVT	CVT/2CT	CVT/ CD-SCSAG	CVT/LCG3	ICVT	ICVT/ CD-SCSAG	ICVT/ LCG3
200.00	8.41E-25	6.45E-25	3.50E-24	2.32E-23	3.83E-23	6.45E-25	2.32E-23	3.84E-23
250.00	3.07E-22	2.51E-22	6.71E-22	2.02E-21	2.56E-21	2.51E-22	2.02E-21	2.56E-21
298.00	1.34E-20	1.14E-20	2.21E-20	4.59E-20	4.89E-20	1.14E-20	4.61E-20	4.90E-20
300.00	1.52E-20	1.30E-20	2.49E-20	5.13E-20	5.44E-20	1.30E-20	5.15E-20	5.45E-20
400.00	1.94E-18	1.77E-18	2.49E-18	3.65E-18	3.46E-18	1.77E-18	3.69E-18	3.49E-18
500.00	3.56E-17	3.37E-17	4.13E-17	5.25E-17	4.93E-17	3.37E-17	5.34E-17	5.02E-17
600.00	2.53E-16	2.46E-16	2.78E-16	3.28E-16	3.11E-16	2.46E-16	3.37E-16	3.19E-16
800.00	3.18E-15	3.15E-15	3.29E-15	3.61E-15	3.48E-15	3.15E-15	3.76E-15	3.63E-15
1000.00	1.60E-14	1.58E-14	1.64E-14	1.74E-14	1.69E-14	1.58E-14	1.77E-14	1.73E-14
1500.00	1.79E-13	1.79E-13	1.76E-13	1.80E-13	1.78E-13	1.79E-13	1.88E-13	1.85E-13

T (K)	CVT/COMT	CVT/mOMT	ICVT/COMT	ICVT/mOMT
200.00	3.83E-23	4.03E-23	3.84E-23	4.04E-23
250.00	2.56E-21	2.85E-21	2.56E-21	2.86E-21
298.00	4.89E-20	5.62E-20	4.90E-20	5.64E-20
300.00	5.44E-20	6.25E-20	5.45E-20	6.27E-20
400.00	3.65E-18	3.93E-18	3.69E-18	3.97E-18
500.00	5.25E-17	5.44E-17	5.34E-17	5.53E-17
600.00	3.28E-16	3.34E-16	3.37E-16	3.44E-16
800.00	3.61E-15	3.64E-15	3.76E-15	3.79E-15
1000.00	1.74E-14	1.74E-14	1.77E-14	1.78E-14
1500.00	1.80E-13	1.81E-13	1.88E-13	1.88E-13

A partir del mismo se puede obtener una visión rápida de las diferencias existentes entre la evaluación TST y CVT de la constante directa en función de la temperatura, Note que en general las diferencias mayores se observan a bajas temperaturas, en las que la TST tiende a dar valores de velocidad mayor que la VTST. A partir de esta salida también es posible determinar el tipo de efecto túnel, aspecto que será discutido más adelante en el curso.