

PRACTICO 5
Camino de reacción.

Objetivos:

- Representar gráficamente el camino de mínima energía potencial para la reacción $\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$
- Estudiar como se ve afectada la constante de velocidad al variar el algoritmo de búsqueda y el tamaño del paso.

1.Representación del camino de mínima energía potencial.

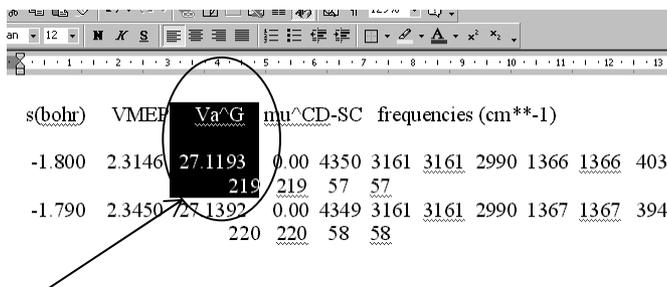
- Empleando el editor de texto de su agrado (joe o vi), abra el archivo de salida ch5j2tr2.fu6 que se encuentra bajo la ruta `/home/usuario/polyrate8.0/testo`.

El archivo ch5j2tr2.fu6 estudia la reacción $\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$. En este calculo no se calculan las constantes de velocidad ni el efecto túnel, por lo cual las secciones RATE y TUNNEL no están incluidas.

- Identifique dentro de la sección **Reaction Path** la tabla de valores que contiene las frecuencias vibracionales y la energía potencial para cada punto del camino de menor energía potencial.
- Seleccione la tabla presente en la pantalla y trasfírela a un archivo de Word. Repita este procedimiento hasta que todos los datos hayan sido transferidos. Su instructor del práctico le ayudará con esta tarea.

Desde el procesador de texto Word, deberá realizar modificaciones en el formato de los datos para que los mismos puedan ser reconocidos por el programa Excel :

- Elimine las columnas que no necesita. Para ello realice una selección con el ratón, manteniendo presionada en forma simultanea la tecla ALT. Esta utilidad la permitirá seleccionar regiones dentro de un archivo de texto .



s(bohr)	VMEP	Va^G	nu^CD-SC	frecuencias (cm**-1)
-1.800	2.3146	27.1193	0.00	4350 3161 3161 2990 1366 1366 403
-1.790	2.3450	27.1392	0.00	4349 3161 3161 2990 1367 1367 394

- Convierta las columnas de su interés [s (bohr) ; VMEP] en una tabla.
- Seleccione todos sus datos. Mediante el comando *Reemplazar* del Menú Edición, sustituya todos los puntos(.) por comas(,).
- Finalmente, transfiera esta tabla a un archivo de Excel y grafíquela. Analice junto a su instructor de práctico el resultado obtenido.

2. La constante de velocidad y el algoritmo de búsqueda.

- Se ejecutarán los siguientes archivos de entrada: ch5j2tr1.dat , ch5j2tr2.dat, ch5j2tr3.dat que se encuentran bajo la ruta polyrate8.0/testrun/ch5 . Estos tres archivos estudian la constante de velocidad de la reacción $\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$, empleando tres algoritmos distintos : el algoritmo de Euler, el algoritmo ES1 y el algoritmo Page – McIver
- Proceda a analizar los archivos de salida correspondientes a los tres cálculos.
- Grafique Energía vs. Coordenada de reacción y discuta con su instructor los resultados obtenidos.

3. La constante de velocidad y el tamaño del paso.

- Trabajaremos con el archivo polyrate8.0/testrun/h3tr1. Se estudia la reacción $\text{H}_2 + \text{H}' \rightarrow \text{HH}' + \text{H}$ empleando el algoritmo Page – McIver para calcular los puntos a lo largo del camino de mínima energía con un tamaño de paso de 0.01 bhor.
- Se ejecutará dicho archivo variando el tamaño del paso SSTEP y asignándole los siguientes valores : 0.1, 0.05 y 0.01
- Grafique Energía vs. Coordenada de reacción y discuta con su instructor los resultados obtenidos.