

## Ab initio INVESTIGATION OF OXYGEN MOLECULE

Curnic Victoria, Mirzac Viorica

Department of General Chemistry, *Nicolae Testemitanu* SUMPh

**Background.** The oxygen molecule has specific physical-chemical properties due to the free  $\pi_g$  orbitals. Oxygen participates as a catalyst and oxidant in many processes and the high activation energy of reactions with the participation of O<sub>2</sub> is due to both the bond energy and the spin value. **Objective of the study.** The goal of this study is to investigate the structure of the oxygen molecule using quantum-chemical calculations. **Material and Methods.** Quantum chemical calculations of the oxygen molecule with different spin values were performed using the ab initio MO LCAO HFR SCF method with the RHF and ROHF approximations. The electronic structure was obtained using 6-31G\* and TZV bases. All ab initio calculations were carried out in GAMESS program. **Results.** The optimization of the electronic structure of the oxygen molecule with the multiplicity  $M = 1$  and  $M = 3$  highlighted the stability of the triplet state ( $3E_g^-$ ) compared to the singlet states ( $1\Delta_g$  și  $1E_g^+$ ) with the energies (in a.u.) corresponding to the values -149.5255 ( $3E_g^-$ ) and -149.6040 ( $1\Delta_g$ ). The calculations performed for O<sub>2</sub> molecule indicate the distance between the oxygen atoms equals to 1.207 Å for the ground state ( $3E_g^-$ ), which is paramagnetic; and to 1.211 Å for the singlet state ( $1\Delta_g$ ). **Conclusion.** The calculations of the investigated systems confirm the instability of singlet oxygen compared to triplet. The higher value of the distance between oxygen atoms in singlet O<sub>2</sub> shows an increased reactivity and a smaller dissociation energy compared to triplet O<sub>2</sub>.

**Keywords:** ab initio calculations, oxygen molecule.

## CALCULE ab initio A MOLECULEI DE OXIGEN

Curnic Victoria, Mirzac Viorica

Catedra de chimie generală, USMF „Nicolae Testemițanu”

**Introducere.** Molecula de oxigen posedă proprietăți specifice fizico-chimice datorită orbitalilor liberi  $\pi_g$ . Oxigenul participă în calitate de catalizator și oxidant în multe procese, iar energia de activare mare a lor se datorează atât energiei legăturii, cât și valorii spinului. **Scopul lucrării.** Scopul lucrării este cercetarea structurii moleculei de oxigen prin intermediul calculelor cuantochimice. **Material și Metode.** Au fost efectuate calcule cuantochimice ale moleculei de oxigen cu diferite valori de spin prin metoda ab initio MO LCAO Hartree-Fock-Roothaan SCF cu aproximațiile RHF și ROHF. Structura electronică a fost obținută cu utilizarea bazelor 6-31G\* și TZV. Toate calculele ab initio au fost efectuate cu programa GAMESS. **Rezultate.** Optimizarea structurii electronice a moleculei de oxigen cu multiplicitatea  $M=1$  și  $M=3$  ( $M=2S+1$ ) a evidențiat stabilitatea stării triplet ( $3E_g^-$ ) în comparație cu stările singlet ( $1\Delta_g$  și  $1E_g^+$ ) cu energiile (în u.a.) ce corespund valorilor -149,5255 ( $3E_g^-$ ) și -149,6040 ( $1\Delta_g$ ). Calculele efectuate pentru molecula O<sub>2</sub> indică valoarea distanței dintre atomii de oxigen egală cu 1,207 Å pentru starea fundamentală ( $3E_g^-$ ), care este paramagnetică și 1,211 Å pentru starea singlet ( $1\Delta_g$ ). **Concluzii.** Calculele sistemelor cercetate confirmă instabilitatea oxigenului singlet în comparație cu cel triplet, iar valoarea mai mare a distanței dintre atomii de oxigen în O<sub>2</sub> singlet evidențiază o reactivitate sporită și o energie de disociere mai mică decât în O<sub>2</sub> triplet.

**Cuvinte-cheie:** calcule ab initio, molecula O<sub>2</sub>.