

## ORCA kvantumkémiai program használata a Komondoron

A számítógépes kémia egyik fontos területe a kvantumkémia, amely a kvantummechanikai elméletet alkalmazza az atomok, molekulák, ionok és szupermolekulák szerkezetének és tulajdonságainak vizsgálatára. A kvantumkémiai számításokat segítő szoftverek nagyban hozzájárulnak a kutatók és az ipari szakemberek munkájához, lehetővé téve a molekulák spektrális tulajdonságainak, termodinamikai tulajdonságainak, kémiai reakcióinak, ezek értelmezésének és előrejelzésének modellezését.

A termodinamikai függvények, mint az entalpia, belső energia, entrópia és szabadenergia, meghatározzák egy fizikai-kémiai rendszer termodinamikai egyensúlyát bizonyos körülmények között. Annak érdekében, hogy a prediktív pontosságot biztosítsuk, fontos, hogy ezeknek a függvényeknek a értékei magas pontossággal rendelkezzenek. A potenciálok prediktív becslésére gyakran használt módszer a kvantumkémiai elveken alapuló kompozit modellek. A kurzus keretében bemutatásra kerülnek az ORCA által implementált kompozit modellek, és a bemutatás kiterjed a számítási eredmények alkalmazhatóságára a standard körülményeket túlmutató esetekben is. Ebben a bemutatásban a kvantumkémiai szoftver, az ORCA segítségével gyorsan eljuthatunk az első bemeneti adatok előkészítéséhez és az első kvantumkémiai számításokhoz.

A különböző elméleti szinteken elvégzett számítási eredmények jelentős különbségeket mutatnak a számítási teljesítmény igénye szempontjából. A bemutatás kitér a Komondoron elérhető számítási teljesítmény becslésére és azok optimális felhasználását vezető eljárásokra és teljesítményjellemzőkre.

A kompozit módszerek pontosságát iparilag jelentős példán keresztül mutatjuk be. A Le Chatelier-Braun-elv megmutatja a külső tényezők, mint például a hőmérséklet és a nyomás hatását a kémiai egyensúlyra. A kvantumkémiai számításokból származó molekulaparaméterek lehetővé teszik ezeknek a tényezőknek a hatásának modellezését és az egyensúlyi feltételek előrejelzését a partíciós függvények és a nagyon pontos energiák felhasználásával. Így a kvantumkémia segítségével numerikusan meghatározhatjuk, hogy egy reakció egyensúlya hogyan változik különböző körülmények között. Az alkalmazott kompozit módszerek potenciális problémáiról és azok megoldásáról is szó lesz.

## Introduction to ORCA calculations on Komondor

One important area of computational chemistry is quantum chemistry, which applies quantum mechanical theory to investigate the structure and properties of atoms, molecules, ions, and supramolecules. Software assisting quantum chemical calculations greatly contributes to the work of researchers and industrial professionals, enabling the modeling of molecular spectral properties, thermochemical properties, chemical reactions, their interpretations, and predictive estimation.

Thermodynamic functions, such as enthalpy, internal energy, entropy, and free energy, provide the thermodynamic equilibrium of a physical-chemical system under certain conditions. To ensure predictive accuracy, it is necessary for the values of these functions to be determined with high precision. A commonly used methodology for predictive estimation of potentials is composite models based on quantum chemical principles. Within the course framework, composite models implemented in ORCA are presented, and the presentation extends to the applicability of computational results beyond standard conditions. In this presentation, working with the quantum chemistry software ORCA allows us to quickly proceed to the preparation of the first input and the first quantum chemical calculations.

Computational results obtained at different theoretical levels show significant differences in terms of computational performance requirements. The presentation addresses estimating computational performance available in Komondor and procedures leading to their optimal use and performance characteristics.

The accuracy of the composite methods is demonstrated through an industrially significant example. The Le Chatelier-Braun principle captures the effects of external factors on chemical equilibrium, such as temperature and pressure. Molecular parameters derived from quantum chemical calculations enable modeling of these factors' effects and prediction of equilibrium conditions using partition functions and highly accurate energies. Thus, through quantum chemistry, we can determine numerically how the equilibrium of a reaction changes under different conditions. Potential issues of the applied composite method and their elimination will also be discussed.