

TSM

Modelování molekulárních struktur

10. Projekt Ia

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Molekula vody

Dimer molekuly vody

Kvantově-chemické výpočty

Molekula vody

- struktura a energie
 - vliv báze
- vlastnosti

Dimer molekuly vody

- interakční energie
 - vliv báze



K zamyšlení

- Jaký vliv má velikost báze na hodnotu absolutní energie molekuly vody?
- Jaký vliv má velikost báze na hodnotu absolutní energie dimeru molekuly vody?
- Jaký vliv má velikost báze na hodnotu interakční energie dimeru molekuly vodu?

- **Požadavky na zpracování výsledků**
- **Tématické okruhy**
 - Molekula vody
 - Dimer molekuly vody

Požadavky na zpracování výsledků

Výsledky jednotlivých cvičení budou zpracovány do protokolu, který bude mít následující náležitosti:

- Jméno a příjmení, název cvičení a datum
- Pro každý tematický okruh:
 - Stručné shrnutí tématu včetně reakčního schématu, pokud je to vhodné
 - Použitý software včetně verzí
 - Výsledky (tabulky)
 - Tabulky
 - čísla zarovnány doprava
 - energie na 6 platných míst (au) nebo 2 platná místa (kcal/mol)
 - délka na 4 platná místa (A)
 - úhel na 1 platné místo (deg)
 - náboj na 3 platná místa (au)
 - Diskuze výsledků dle zadání
 - Použitá literatura (např. u experimentálních hodnot)

Protokol ve formátu **pdf** je nutné odevzdat do konce semestru.

Molekula vody

(Téměř) Samostatný projekt

Úkoly

- 1) Vytvořte model molekuly vody a jeho geometrii zoptimalizujte pomocí molekulové mechaniky.
- 2) Zoptimalizujte geometrii molekuly vody pomocí metody HF/cc-pVDZ
- 3) Změřte významné geometrické parametry optimalizované geometrie a srovnejte je s výchozím modelem.
- 4) Ověřte pomocí vibrační analýzy, že nalezená geometrie odpovídá lokálnímu minimu na PES.
- 5) Pro optimalizovanou geometrii proveďte výpočet energie včetně výpisu průběhu SCF výpočtu, dipólového momentu a Mullikenových a MK (Merz-Singh-Kollman) atomových nábojů pomocí metody HF/cc-pVDZ
- 6) Na stejné geometrii opakujte výpočet uvedený v bodě 5 pro báze: cc-pVTZ, cc-pVQZ a cc-pV5Z

Štábní kultura

00.input

01.opt

02.freq

03.props

01.cc-pVDZ

02.cc-pVTZ

03.cc-pVQZ

04.cc-pV5Z

1) Počáteční geometrii molekuly vody vytvořte v programu Avogadro nebo Nemesis. Geometrii modelu předoptimalizujeme pomocí molekulové mechaniky (silového pole). Zvolte takové silové pole, které dle vašeho názoru nejlépe vystihne geometrii molekuly vody. Předoptimalizované geometrie uložte ve formátu **xyz** pod názvem **water.xyz** do složky **00.input**

2) Soubor water.xyz přepokopírujte do adresáře 01.opt a přejmenujte jej na **opt.com**. Přejmenovaný soubor otevřete v textovém editoru a změňte jej na vstupní soubor pro **optimalizaci geometrie** v programu Gaussian. Spusťte výpočet.

Řešení

- 3) V adresáři **01.opt** otevřete soubor **opt.log** v textovém editoru a analyzujte jeho obsah. Ověřte, že výpočet proběhl v pořádku a nalezněte optimalizovanou geometrii. Soubor zavřete. Ze souboru **opt.log** vyextrahujte informace o změně energie, dále odpovídající geometrie a **optimalizovanou geometrii** do souboru s názvem **last.xyz** pomocí skriptů z modulu **qmutil**. Soubor **last.xyz** otevřete v programu vmd, Avogadro, či Nemesis a změřte významné geometrické parametry.
- 4) Soubor **last.xyz** přepokopírujte do adresáře **04.freq** a přejmenujte jej na **freq.com**. Přejmenovaný soubor otevřete v textovém editoru a upravte jeho obsah pro výpočet normálních vibrací na úrovni teorie HF/cc-pVDZ. Spusťte výpočet. Výstupní soubor **freq.log** otevřete v textovém editoru a určete **typ stacionárního bodu**. Normální vibrace zobrazte v programu Avogadro nebo Nemesis.
- 5) Soubor **last.xyz** přepokopírujte do adresáře **03.props/01.cc-pVDZ** a přejmenujte jej na **props.com**. Přejmenovaný soubor otevřete v textovém editoru a upravte jeho obsah pro výpočet energie metodou HF/cc-pVDZ. Zvolte úplný výpis (#P) a výpočet ESP atomových nábojů metodou Merz-Singh-Kollman (Pop=MK). Specifikujte checkpoint. Spusťte výpočet. Výstupní soubor **props.log** otevřete v textovém editoru a vyextrahujte z něj data do dále uvedené tabulky.
- 6) Postupujte analogicky jako v bodě 5, použijte postupně metody: HF/cc-pVTZ, HF/cc-pVQZ, HF/cc-pV5Z

Výsledky

Geometrie molekuly vody

doplňte použité silové pole



Metoda	MM	HF/cc-pVTZ	Rozdíl
d(HO) [Å]			
Θ (HOH) [°]			

Výsledky

Molekula vody – průběh SCF metody HF/cc-pVDZ

SCF Krok	E [au]	ΔE_{prev} [au]
1		---
2		
3		
4		
...		

doplňte podle skutečného počtu
SCF kroků

změna energie vůči předchozímu
kroku


Poznámka: Hodnoty energie vyextrahujte ze souboru manuálně nebo použijte příkaz grep.

Výsledky

Molekula vody

Báze	E [au]	Er [kcal/mol]
cc-pVDZ		0,0
cc-pVTZ		
cc-pVQZ		
cc-pV5Z		
CBS		

výsledek výpočtu
absolutní energie (E(RHF))



relativní energie vůči bázi cc-pVDZ



Dimer molekuly vody

Samostatný projekt

Úkoly

- 1) Vytvořte model dimeru molekuly vody a jeho geometrii zoptimalizujte pomocí molekulové mechaniky.
- 2) Zoptimalizujte geometrii dimeru molekuly vody pomocí metody HF/cc-pVDZ
- 3) Změřte významné geometrické parametry optimalizované geometrie a srovnajte je s výchozím modelem. Pozorované rozdíly se pokuste zdůvodnit.
- 4) Ověřte, že nalezená geometrie odpovídá lokálnímu minimu na PES, pomocí vibrační analýzy.
- 5) Na optimalizované geometrii proveďte výpočet energie pro báze: cc-pVDZ, cc-pVTZ, cc-pVQZ a cc-pV5Z
- 6) Pro každou bázi určete interakční energii mezi molekulami vod.

Štábní kultura

00.input

01.opt

02.freq

03.props

01.cc-pVDZ

02.cc-pVTZ

03.cc-pVQZ


04.cc-pV5Z

Postupuje se analogicky jako v předchozím případě.

Výsledek

Geometrie dimeru molekuly vody

doplňte použité silové pole



Metoda	MM	HF/cc-pVTZ	Rozdíl
d(HO) [Å]			
Θ (HOH) [°]			
d(H...O) [Å]			

vodíková vazba



Dle vlastního uvážení uveďte další geometrické parametry, které nejlépe postihnou rozdíl mezi oběma geometriemi.

Výsledek

Dimer molekuly vody

Báze	E	E_r	E_i
	[au]	[kcal/mol]	[kcal/mol]
cc-pVDZ		0,0	
cc-pVTZ			
cc-pVQZ			
cc-pV5Z			

výsledek výpočtu

relativní energie vůči bázi cc-pVDZ

interakční energie mezi
molekulami vody

$$E_i = E_{\text{dimer}} - 2 * E_{\text{monomer}}$$