

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

12. Projekt I

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 vody?

Požadavky na zpracování výsledků

Výsledky doporučuji zpracovat ve formě stručného protokolu, který by měl 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)

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

Řešení – Varianta A

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 Nemesis (Projekt: **Build Structure**). Geometrii modelu předoptimalizujeme pomocí molekulové mechaniky. Zvolte takové silové pole (Geometry->Optimizer Setup), které dle vašeho názoru nejlépe vystihne její geometrii.
- 2) Předoptimalizovanou geometrii modelu uložte ve formátu **xyz** pod názvem **water.xyz** do složky **00.input** (File->Export Structure as ...->OpenBabel). Dále uložte vstupní soubor pro program Gaussian (HF/cc-pVDZ, Geometry Optimization) s názvem **opt.com** do složku **01:opt** (File->Export Structure as ...->Gaussian).
- 3) V adresáři **01.opt** spusťte výpočet v programu Gaussian pomocí prostředí Infinity.

Řešení

- 4) V adresáři **01.opt** otevřete soubor **opt.log** v programu Nemesis (Projekt: **Trajectory**, File->Import Trajectory from ...->Gaussian->Geometry Optimization File). Analyzujte průběh optimalizace a geometrii optimalizovaného modelu.
- 5) Optimalizovanou geometrii uložte jako vstupní soubor pro Gaussian (HF/cc-pVDZ, Frequencies) s názvem **freq.com** do složku **02.freq** (File->Export Structure as ...->Gaussian). V adresáři spusťte výpočet v programu Gaussian pomocí prostředí Infinity.
- 6) V adresáři **02.freq** otevřete soubor **opt.log** v programu Nemesis (Projekt: **Trajectory**, File->Import Trajectory from ...->Gaussian->Vibrations File). Jedná se o stacionární bod prvního řádu?
- 7) Pokud ano, tak optimalizovanou geometrii postupně uložte do adresářů 03.props/01.cc-pVDZ, ... Při vytváření vstupního souboru **props.com** pro Gaussian zvolte „MK Charges“ a správnou bázi. V adresářích spusťte výpočty v programu Gaussian pomocí prostředí Infinity.
- 8) Analyzujte vypočtená data a uložte je do tabulek.

Výsledky

Geometrie molekuly vody

doplňte použité silové pole



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

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

Řešení – Varianta B

Štábní kultura

00.input

01.opt

02.freq

03.props

01.cc-pVDZ

02.cc-pVTZ

03.cc-pVQZ

04.cc-pV5Z

Alternativní postup, upřednostňuje příkazovou řádku.



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** překopírujte 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** překopírujte 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

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.
- 7) Určete interakční energii extrapolovanou na CBS.

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-pVDZ	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			
CBS			

výsledek výpočtu

relativní energie vůči bázi cc-pVDZ

interakční energie mezi
molekulami vody

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