Reprezentace molekuly při modelování

Souřadnicový systém
Transformační matice

Bornova – Oppenheimerova aproximace

- Jedna ze základních aproximací umožňující řešení Schrödingerovy rovnice
- Oddělení pohybu atomových jader a elektronů
- Umožňuje rozdílný přístup modelování

kvantově-mechanický model

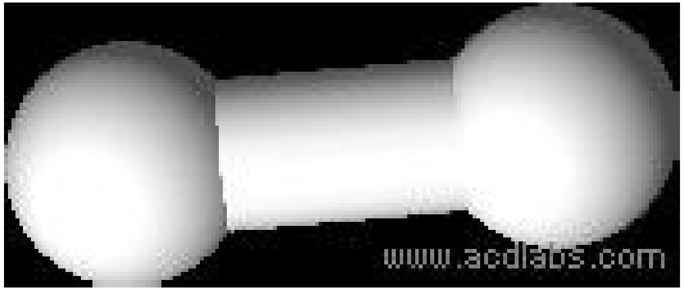
x

molekulově-mechanický model

Používané jednotky

- Úhly, dihedrální úhly – stupně
- Vzdálenosti, délky – Å – angström 1 Å = 10^{-10} m

Molekula vodíku H_2



Kartézský souřadný systém

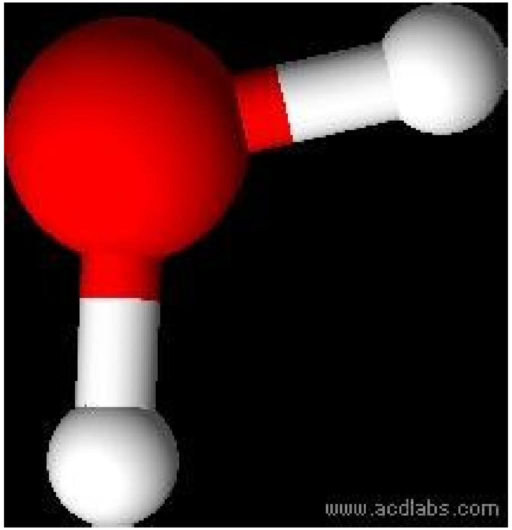
-0.3525	-0.0302	-0.0133	H
0.3525	0.0302	0.0133	H

1 2

Z-matice

H	0.0000	0.0000	0.0000	0	0	0
H	0.7080	0.0000	0.0000	1	0	0

Molekula vody H_2O

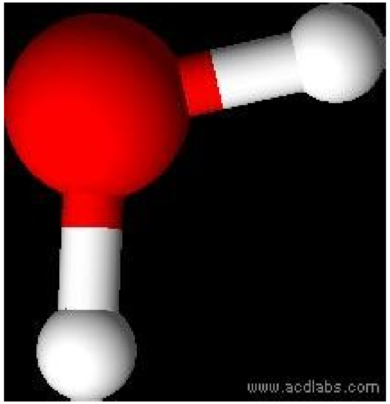


Kartézský souřadný systém

-0.4764	0.3956	-0.0282	O
0.5117	0.6139	-0.0365	H
-0.5117	-0.6139	0.0365	H

1 2
1 3

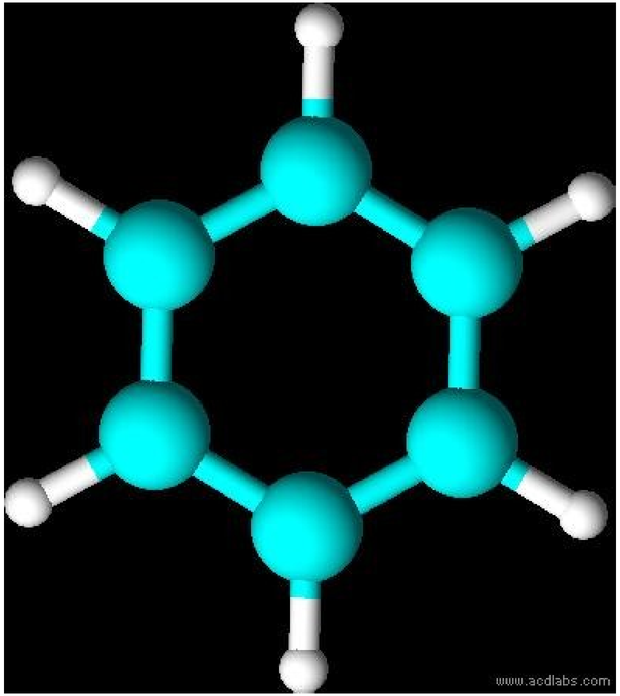
Molekula vody H_2O



Z-matice

O	0.0000	0.0000	0.0000	0	0	0	0
H	1.0119	0.0000	0.0000	0	1	0	0
H	1.0121	104.4629	0.0000	0	1	2	0

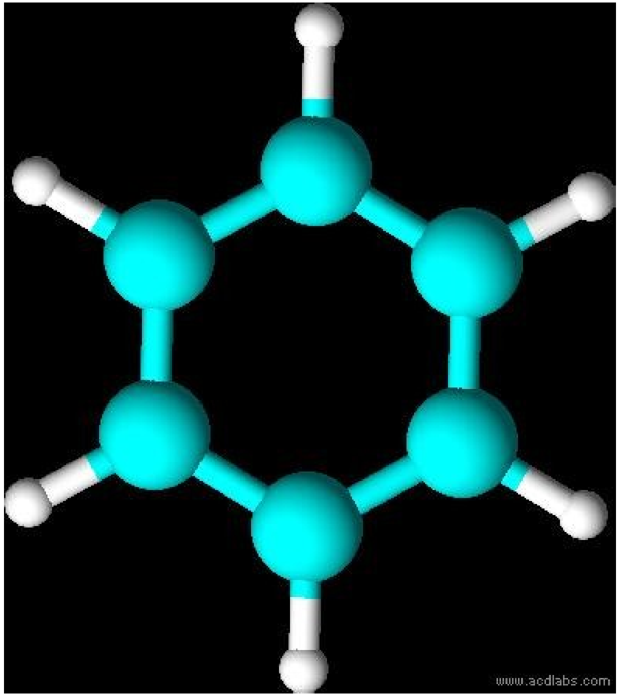
Molekula benzenu C_6H_6



1.2167	0.6629	-0.0325	C
1.1821	-0.7225	-0.0367	C
0.0346	1.3854	0.0042	C
-0.0346	-1.3854	-0.0041	C
-1.1821	0.7226	0.0367	C
-1.2167	-0.6630	0.0325	C
2.1920	1.1944	-0.0585	H
2.1297	-1.3018	-0.0661	H
0.0623	2.4961	0.0076	H
-0.0623	-2.4961	-0.0075	H
-2.1297	1.3018	0.0661	H
-2.1920	-1.1944	0.0586	H

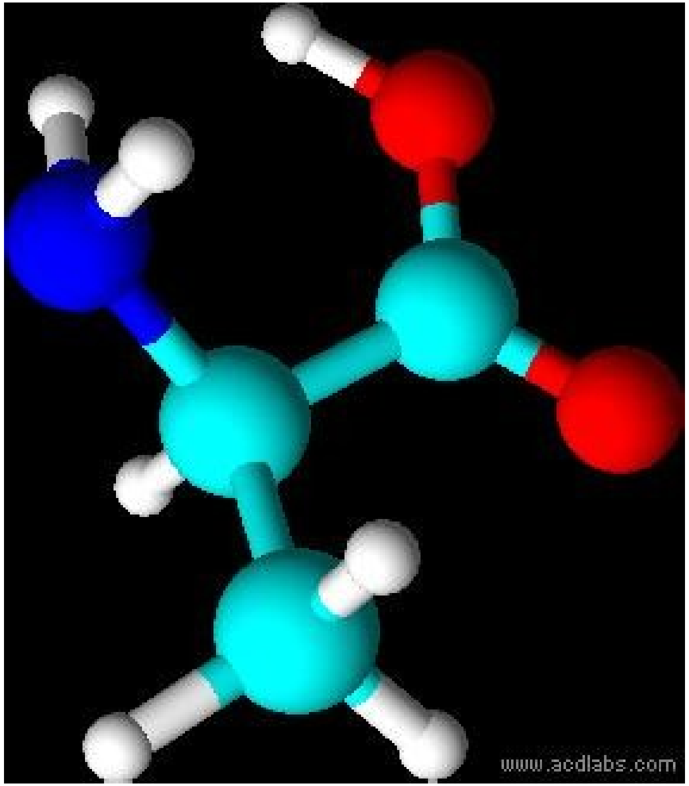
1 2
1 3
1 7
2 4
2 8

Molekula benzenu C_6H_6



C	0.0000	0.0000	0.0000	0	0	0
C	1.3859	0.0000	0.0000	1	0	0
C	1.3859	119.9960	0.0000	1	2	0
C	1.3860	120.0000	0.0004	2	1	3
C	1.3859	120.0051	-0.0022	3	1	2
C	1.3859	120.0052	0.0001	4	2	1
H	1.1110	120.0015	-180.0000	1	2	3
H	1.1110	119.998	-179.9997	2	1	3
H	1.1110	119.9970	179.9980	3	1	2
H	1.1110	119.9997	-180.0000	4	2	1
H	1.1110	119.9998	-179.9968	5	3	1
H	1.1110	120.000	-179.9990	6	4	1

Molekula alaninu



C	0.0000	0.0000	0.0000	0	0	0
O	1.2099	0.0000	0.0000	1	0	0
C	1.511	119.7762	0.0000	1	2	0
N	1.471	109.7784	130.1012	3	1	2
C	1.5265	109.3265	10.1190	3	1	2
O	1.3611	119.7658	-178.9553	1	2	3
H	1.113	109.3101	-110.0357	3	1	2
H	1.0099	104.6531	-46.4500	4	3	1
H	1.0099	105.1970	63.7940	4	3	1
H	1.1113	110.2518	56.6209	5	3	1
H	1.1120	108.7651	176.6227	5	3	1
H	1.1116	110.3632	-63.4869	5	3	1
H	0.9598	120.5894	177.0137	6	1	2

Výhody a nevýhody reprezentace systému

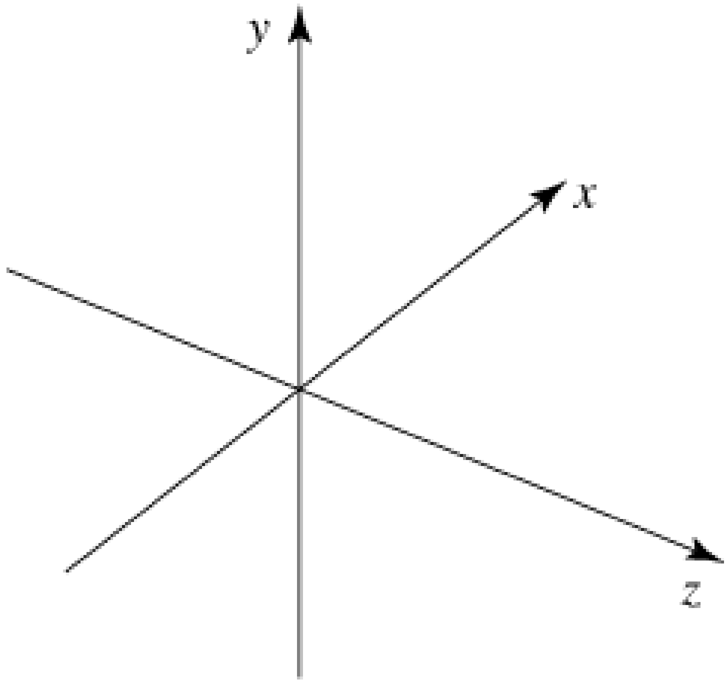
Kartézský systém

- N atomů = 3N souřadnic (můžeme redukovat u prvních 3 atomů vhodným posunutím do souřadného systému)
- Změna délky vazby, vazebného úhlu nebo dihedrálního úhlu vede ke změně souřadnic téměř celého systému

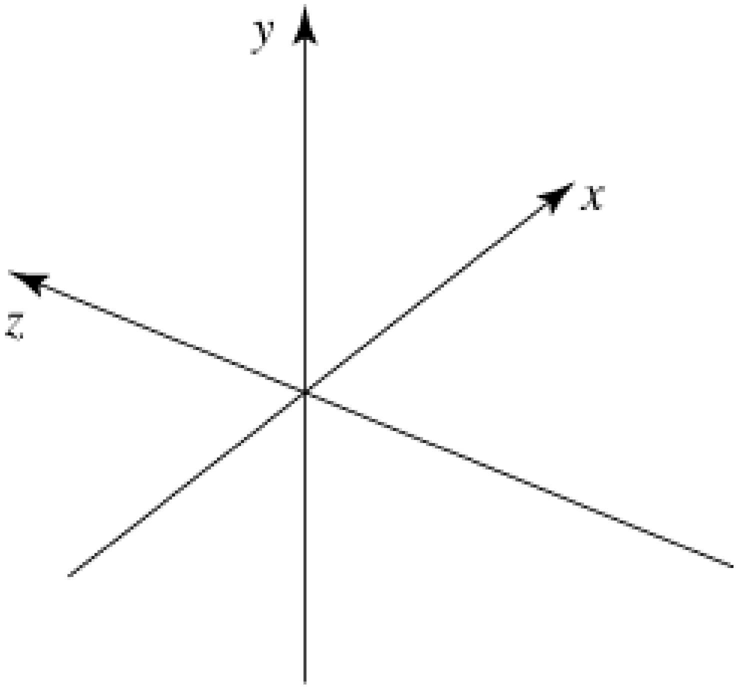
Vnitřní souřadný systém = Z-matice

- N atomů = 3N - 6 souřadnic
- Změna délky vazby, vazebného úhlu nebo dihedrálního úhlu vede ke změně pouze uvedené souřadnice

Souřadný systém



pravotočivý systém



levotočivý systém

Transformace ve 2D

- Posunutí
- Otočení kolem bodu
- Změna měřítka
- Zkosení

Transformace ve 2D - posunutí

Bod $A[A_x; A_y]$ posuneme o vektor $v=(v_x; v_y)$ a získáme bod $B[B_x; B_y]$

$B_x = A_x + v_x$

$B_y = A_y + v_y$

Maticový zápis:

$(B_x; B_y)^T = (A_x; A_y)^T + (v_x; v_y)^T$

Transformace ve 2D - otočení

- Kolem počátku soustavy souřadnic o úhel φ

  $B_x = A_x \, cos(\varphi) - A_y \, sin(\varphi)$

  $B_y = A_x \, sin(\varphi) + A_y \, cos(\varphi)$

Transformace ve 2D - otočení

- Kolem libovolného bodu $S[S_x; S_y]$ o úhel φ
- Jak na to?

Transformace ve 2D - otočení

- Kolem libovolného bodu $S[S_x; S_y]$ o úhel φ
- Jak na to?
- Posuneme bod S i bod A tak, aby bod S byl v počátku soustavy souřadnic, provedeme otočení a nový bod posuneme v opačném směru než bylo posunutí bodu S.

Transformace ve 2D - otočení

- Kolem libovolného bodu $S[S_x; S_y]$ o úhel φ

$A^1_x = A_x – S_X$

$A^1_y = A_y – S_y$

$A^2_x = A^1_x \cos(\varphi) – A^1_y \sin(\varphi)$

$A^2_y = A^1_x \sin(\varphi) + A^1_y \cos(\varphi)$

$B_x = A^2_x + S_x$

$B_y = A^2_y + S_y$

Transformace ve 2D - otočení

- Kolem libovolného bodu $S[S_x; S_y]$ o úhel φ

$$B_x = (A_x - S_x)\cos(\varphi) - (A_y - S_y)\sin(\varphi) + S_x$$

$$B_y = (A_x - S_x)\sin(\varphi) + (A_y - S_y)\cos(\varphi) + S_y$$

Transformace ve 2D – změna měřítka

$B_x = m_x \,.\, A_x$

$B_y = m_y \,.\, A_y$

Pokud $m_x = m_y$ – proporcionální změna měřítka (ze čtverce se transformací stane opět čtverec)

Transformace ve 2D - zkosení

- Z obdélníka se touto transformací stane rovnoběžník

$B_x = A_x + q \,.\, A_y$

$B_y = A_y$

Transformace ve 2D

¿

Posunutí

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix}$$

Změna měřítka

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_x & 0 \\ 0 & m_y \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$$

Otočení

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$$

Zkosení podél osy y

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & q \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$$

Transformace ve 2D

- Až na posunutí lze všechny transformace popsat násobením čtvercové matice (2x2) vektorem
- Zavedením homogenní souřadnice zavedeme i posunutí jako násobení čtvercovou maticí (3x3) vektorem

Transformace ve 2D

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & v_x \\ 0 & 1 & v_y \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_x & 0 & 0 \\ 0 & m_y & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & q & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ 1 \end{pmatrix}$$

Transformace ve 2D – skládání

- Příklad: Zapište transformační matici otočení o 90° kolem bodu S[1; 2].

- Matice posunu bodu S do počátku soustavy souřadnic

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Transformace ve 2D – skládání

- Příklad: Zapište transformační matici otočení o 90° kolem bodu S[1; 2].

- Matice otočení o úhel 90°

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Transformace ve 2D – skládání

- Příklad: Zapište transformační matici otočení o 90° kolem bodu S[1; 2].

- Matice posunu zpět podle bodu S

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Transformace ve 2D – skládání

- Příklad: Zapište transformační matici otočení o 90° kolem bodu S[1; 2].

- Složení transformací

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 3 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Transformace ve 3D

- Posunutí
- Otočení kolem osy
- Změna měřítka
- Zkosení podél osy

Posunutí ve 3D

- V homogenních souřadnicích

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & v_x \\ 0 & 1 & 0 & v_y \\ 0 & 0 & 1 & v_z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Otočení ve 3D

- Nutná jednotná definice otočení: pravotočivá / levotočivá transformace.
- Otočení kolem obecné osy lze převést na posunutí a postupné otáčení kolem souřadnicových os.

Otočení ve 3D kolem osy z

- V homogenních souřadnicích

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Otočení ve 3D kolem osy y

- V homogenních souřadnicích

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & 0 & \sin(\varphi) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\sin(\varphi) & 0 & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Otočení ve 3D kolem osy x

- V homogenních souřadnicích

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ 0 & -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Změna měřítka ve 3D

- V homogenních souřadnicích

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Souměrnost ve 3D

- Zvláštní případ změny měřítka
  - Absolutní hodnota koeficientu je rovna jedné
  - Středová souměrnost
  - Osová souměrnost
  - Souměrnost podle roviny

Středová souměrnost ve 3D

- V homogenní souřadné soustavě

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Osová souměrnost ve 3D

- V homogenní souřadné soustavě
- Souměrnost podle osy **x**

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Osová souměrnost ve 3D

- V homogenní souřadné soustavě
- Souměrnost podle osy **y**

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Osová souměrnost ve 3D

- V homogenní souřadné soustavě
- Souměrnost podle osy **z**

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Souměrnost podle roviny ve 3D

- V homogenní souřadné soustavě
- Souměrnost podle osy **xy**

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Souměrnost podle roviny ve 3D

- V homogenní souřadné soustavě
- Souměrnost podle osy **xz**

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Souměrnost podle roviny ve 3D

- V homogenní souřadné soustavě
- Souměrnost podle osy **yz**

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Zkosení ve 3D podél osy z

- V homogenních souřadnicích

$$\begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & q_x & 0 \\ 0 & 1 & q_y & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \\ 1 \end{pmatrix}$$