

# C7800

# Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Petr Kulhánek, Jakub Štěpán

[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto:kulhanek@chemi.muni.cz)

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

# Výpočty v programu gaussian

---

## Gaussian

<http://www.gaussian.com/>

Komerční program určený převážně pro kvantově chemické výpočty. Instalovaný na klastru WOLF.

# Spouštění výpočtu

Výpočty v programu gaussian provádíme na **výpočetním klastru WOLF**.

## 1) Aktivace modulu gaussian:

pouze jednou v daném terminálu

```
$ module add gaussian:03.E1
```

## 2) Přímé spuštění výpočtu (**NEPOUŽÍVAT v domovském adresáři !!!!**):

```
$ g03 soubor
```

jméno vstupního souboru bez přípony .com

Po skončení výpočtu bude v adresáři nový soubor (**soubor.log**) obsahující výsledky výpočtu.

# Spouštění výpočtu, II

## 3) Dávkové spouštění (**PREFEROVANÝ ZPŮSOB**):

```
$ psubmit localhost@short soubor.com
```

jméno vstupního souboru **včetně** přípony .com  
skript úlohy se vytvoří automaticky

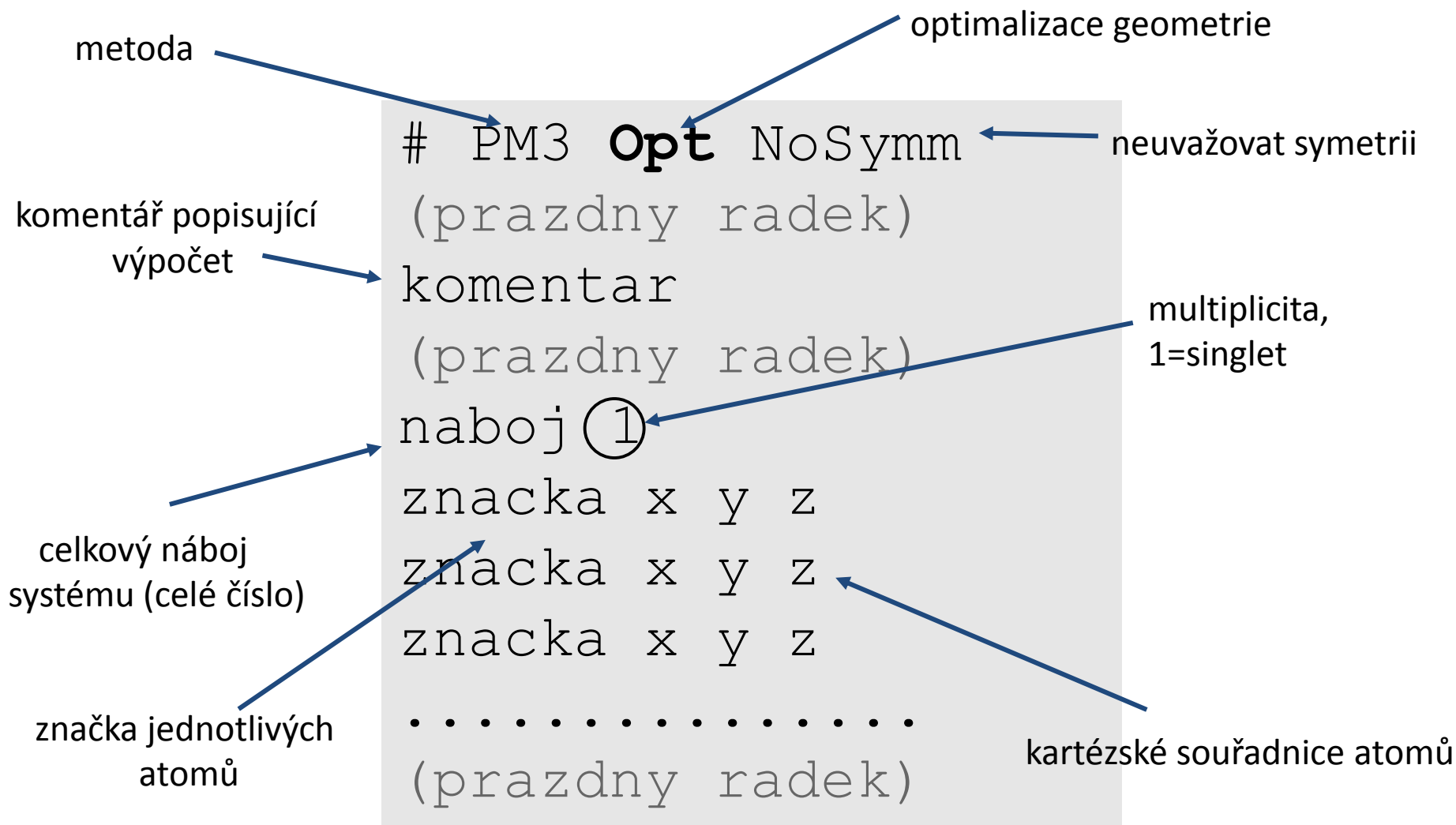
výpočet spustí na **lokálním** stroji ve frontě **short**

### Nezapomeň:

- každý výpočet musí být spuštěn v samostatném adresáři!!

# Optimalizace geometrie

# Optimalizace geometrie, vstup



soubor ukládáme s příponou **.com**

# Opt. geometrie, ukázka vstupu

ethan.com

kartézské souřadnice atomů v Ångströmech

```
# PM3 Opt Nosymm
```

```
Ethan
```

```
0 1
```

```
-----  
C      -8.17932      3.14871      -0.03132  
C      -7.00267      2.20120       0.03204  
H      -7.90498      4.06824     -0.55607  
H      -8.51264      3.41431      0.97740  
H      -9.01757      2.68656     -0.56001  
H      -6.16234      2.66559      0.55546  
H      -6.67317      1.93085     -0.97667  
H      -7.27527      1.28418      0.56205
```

prázdný řádek

# Příprava vstupního souboru, NEMESIS

- 1) Projekt: Build Structure
- 2) Sestavíme molekulu
- 3) Provedeme optimalizaci pomocí molekulové mechaniky
- 4) File->Export Structure as -> Gaussian Input
- 5) Nastavíme metodu a typ výpočtu, uložíme

Project 1: NEMESIS - Molecular Modelling Package

Build panel

Basic General

Optimize

Geometry

Position Distance Angle Torsion

Restrain Property Label

Gaussian Input

Title: Title

Calculation: Geometry Optimization Processors: 1

Theory: PM3 Basis:

Charge: 0 Multiplicity: 1

Format: Cartesian

Checkpoint  Include PBC  Include fragments

```
%Chk=checkpoint.chk
# RPM3 Opt NoSymm

Title

0 1
O 1
H 0.043916 -0.336071 1.404725
C -0.017513 -0.336324 0.312494
H -1.075148 -0.371158 0.031690
H 0.453524 -1.259117 -0.043340
C 0.702669 0.874594 -0.267004
H 1.562094 0.531237 -0.853870
```

Save setup  Close on save

Reset Save ... Close

S T C G D P select a connect atom (open valence) to attach a molecular fragment

Optimalizace geometrie

PM3



# Výsledný soubor

1) Otevřete výstupní soubor v textovém editoru:

```
$ kwrite soubor.log &> /dev/null &
```

2) Projděte souborem, pouvažujte nad významem jednotlivých sekcí:

Input orientation:

```
.....
SCF Done: E(RPM3) = -0.289342988150E-01 A.U. after 8 cycles
.....
Center Atomic Forces (Hartrees/Bohr)
.....
Item Value Threshold Converged?
Maximum Force 0.000311 0.000450 YES
RMS Force 0.000068 0.000300 YES
Maximum Displacement 0.009047 0.001800 NO
RMS Displacement 0.004622 0.001200 NO
.....
Optimization completed.
-- Stationary point found.
.....
Normal termination of Gaussian 09
```

# Načtení výstupního souboru, NEMESIS

- 1) Projekt: Trajectory
- 2) File->Import Trajectory as -> Gaussian Geometry Optimization

The screenshot displays the NEMESIS Molecular Modelling Package interface. The main window shows a 3D ball-and-stick model of an ethane molecule. A blue arrow labeled "dvojklik" (double-click) points from the "Trajectory 1 Structure 1" entry in the "Trajectories" panel to the "Trajectory" dialog box. This dialog box has tabs for "Basic", "Play", "Segments", "Filters", and "Referenced by". Another blue arrow labeled "dvojklik" points from the "Trajectory" dialog to the "Gaussian Geometry Optimization" dialog box. The "Gaussian Geometry Optimization" dialog has tabs for "Basic", "Energy", and "Info". The "Energy" tab is active, showing a table of energy values for six snapshots.

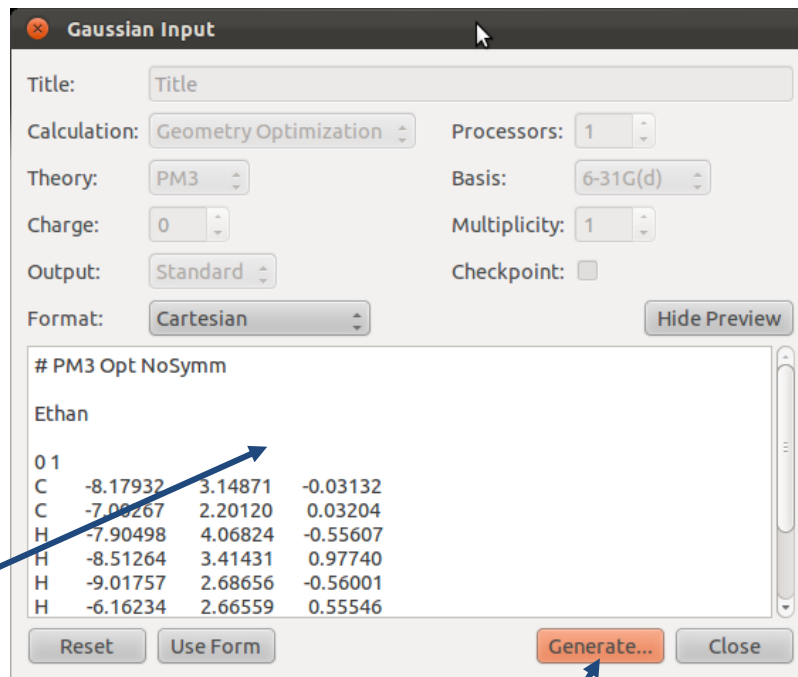
ID	Energy [a.u.]	Relative Energy [kcal]
1	-0.028617175	0.00
2	-0.028893932	-0.17
3	-0.028929498	-0.20
4	-0.028931879	-0.20
5	-0.028934299	-0.20
6	-0.028935040	-0.20

At the bottom of the interface, a blue oval highlights a set of playback controls (stop, play, next, previous, etc.), with a blue arrow pointing to it from the text "průběh optimalizace" (optimization process).

# Optimalizace geometrie alternativní postupy

# Příprava vstupního souboru, Avogadro

Vstupní soubor pro výpočet můžeme vytvořit pomocí programu **Avogadro**. Příslušný nástroj naleznete v menu **Extensions->Gaussian**.



ručně upravíme  
podle typu výpočtu

vytvoří vstupní soubor pro výpočet

Pokud je struktura výsledkem **předchozího výpočtu** v programu gaussian, **neměli** bychom tuto strukturu v programu Avogadro **měnit** (např. optimalizovat geometrii)!

# Optimalizace geometrie, výsledek

## 1) Aktivace modulu qmutil:

```
$ module add qmutil
```

pouze jednou v daném terminálu

## 2) Zobrazení průběhu optimalizace (energie):

```
$ extract-gopt-ene soubor.log
```

## 3) Průběh optimalizace (všechny geometrie):

```
$ extract-gopt-xyz soubor.log > soubor_opt.xyz
```

## 4) Získání optimalizované geometrie (poslední):

```
$ extract-xyz-str soubor_opt.xyz last > soubor_last.xyz
```

Je vhodné podívat se na průběh optimalizace, např. v programu **vmd**, **Avogadro**, nebo **Nemesis**.

# Optimalizace geometrie, výsledek

## Průběh optimalizace (energie):

```
[kulhanek@wolf ethan]$ extract-gopt-ene soubor.log
```

```
# Coordinate:
```

```
# Step          Energy [kcal/mol]   Energy [au]
```

```
# -----
```

```
1              0.000              -0.028650961
```

```
2             -0.171              -0.028922822
```

```
3             -0.188              -0.028950914
```

```
4             -0.190              -0.028953934
```

číslo optimalizačního  
kroku

relativní energie vůči  
**výchozí geometrii**

absolutní energie v  
Hartree

Energie optimalizované struktury, tedy geometrie obsažené v **soubor\_last.xyz**, v Hartree.

# Vibrační analýza

Výsledkem vibrační analýzy jsou **normální vibrace** (lineárně nezávislé pohyby atomů v molekule) odpovídající zpřaženým **harmonickým oscilátorům** (jedná se o aproximaci). Vibrační analýzu lze využít k předpovědi absorpčních spekter v oblasti infračerveného záření (není příliš přesné) nebo k **určení typu stacionárního bodu na ploše potenciální energie**. Lze tak od sebe odlišit **optimální strukturu** (všechny frekvence vibrací jsou **kladné**) od **tranzitního stavu** (**právě jedna** frekvence musí být **imaginární**).

Vibrační analýza se provádí pro geometrii, která byla

**optimalizována stejnou metodou,**

jaká bude použita pro vibrační analýzu. V opačném případě budou spočtené frekvence zcela chybné.



# Vibrační analýza, vstup

frekvenční analýza

```
# PM3 FREQ NoSymm
(prazdny radek)
komentar
(prazdny radek)
naboj 1
znacka x y z
znacka x y z
znacka x y z
.....
(prazdny radek)
```

optimalizovaná  
geometrie

soubor ukládáme s příponou **.com**

# Příprava vstupního souboru, NEMESIS

- 1) **Optimalizovaná** geometrie
- 2) File->Export Structure as -> Gaussian Input
- 3) Nastavíme metodu a typ výpočtu, uložíme

Project 1 : NEMESIS - Molecular Modelling Package

Calculation: **Frequencies**

Theory: **PM3**

Charge: 0

Format: Cartesian

Checkpoint  Include PBC  Include fragments

%Chk=checkpoint.chk  
# RPM3 Freq NoSymm

Title			
0	1		
H	-0.908150	0.201192	0.637090
C	-0.034170	-0.058327	0.025579
H	-0.390627	-0.686639	-0.801043
H	0.623995	-0.680150	0.646308
C	0.675174	1.169534	-0.477182
H	1.549213	0.910014	-1.088609

Save ... Close

Energy [a.u.] Relative Energy [kcal/mol]

Energy [a.u.]	Relative Energy [kcal/mol]
-0.028617175	0.00
-0.028893932	-0.17
-0.028929498	-0.20
-0.028931879	-0.20
-0.028934299	-0.20
-0.028935040	-0.20

Poslední (optimalizovaná) geometrie

Frequencies

PM3

# Výsledný soubor

1) Otevřete výstupní soubor v textovém editoru:

```
$ kwrite soubor.log &> /dev/null &
```

2) Projděte souborem, pouvažujte nad významem jednotlivých sekcí:

Input orientation:

```
....  
SCF Done: E(RPM3) = -0.289350395641E-01 A.U. after 9 cycles....  
....  
Harmonic frequencies (cm**-1), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering  
activities (A**4/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized  
incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A),  
and normal coordinates:  
          1              2              3  
          A              A              A  
Frequencies -- 224.6457          878.1828          878.1936....
```

```
-----  
- Thermochemistry -  
-----
```

[http://gaussian.com/g\\_whitepap/thermo.htm](http://gaussian.com/g_whitepap/thermo.htm)

```
...  
Zero-point vibrational energy      194420.2 (Joules/Mol)  
...  
Item          Value      Threshold  Converged?  
Maximum Force      0.000005    0.000450    YES  
RMS Force          0.000002    0.000300    YES  
Maximum Displacement 0.000091    0.001800    YES  
RMS Displacement  0.000049    0.001200    YES  
...  
Normal termination of Gaussian 09 at Sun Mar 10 20:23:26 2013.
```

Vibrační analýzu lze provádět pouze na stacionárních bodech (optimalizovaných geometriích).

# Načtení výstupního souboru, NEMESIS

- 1) Projekt: Trajectory
- 2) File->Import Trajectory as -> Gaussian Vibrations

The screenshot shows the NEMESIS Molecular Modelling Package interface. The main window displays a ball-and-stick model of a molecule. A blue arrow labeled "dvojklik" (double click) points from the "Trajectory 1 Structure 1" entry in the "Trajectories" panel to the "Trajectory" dialog box. The "Trajectory" dialog box has a table with the following data:

SI	Name	Snapshots	Type
1	ethan_freq	180	Gaussian Vibratic

A second blue arrow labeled "dvojklik" points from the "ethan\_freq" entry to the "Gaussian Vibrations" dialog box. The "Gaussian Vibrations" dialog box has a table with the following data:

ID	Frequency	IR Intensity	Scale
1	224.6	0.0	
2	878.2	0.0	
3	878.2	0.0	
4	1120.0	0.0	
5	1120.0	0.0	
6	1137.8	0.0	
7	1359.3	0.0	
8	1408.2	0.0	
9	1408.2	0.0	
10	1443.6	0.0	

The checkboxes in the first column of this table are circled in orange, with a blue arrow labeled "zvolíme vibraci" (we choose vibrations) pointing to them. Below the table, the "Number of vibrations" is set to 24 and "Active vibrations" is 0. There are buttons for "Activate imaginary" and "Deactivate all". A third blue arrow labeled "spustíme animaci" (we start animation) points to the play button in the bottom control bar, which is also circled in orange.

# Vibrační analýza

## alternativní postupy

# Vibrační analýza, výstup - Avogadro

Do programu Avogadro načteme **soubor.log**, obsahující výsledky vibrační analýzy. Souhrn frekvencí jednotlivých normálních vibrací najdeme v menu **Extensions->Vibrations**.

The screenshot shows the Avogadro interface with the 'Molecular Vibrations' dialog box open. The dialog box contains a table with the following data:

	Frequency (cm <sup>-1</sup> )	Intensity (km/mol)
1	223.7	0.0
2	877.8	1.5
3	878.0	1.5
4	1,119.8	0.0
5	1,119.9	0.0
6	1,138.0	0.0
7	1,359.2	0.3
8	1,408.1	0.3

Below the table, there are options for visualization: a 'Scale' slider, checkboxes for 'Display force vectors' and 'Animation speed set by frequency', and buttons for 'Start Animation', 'Export...', and 'Close'. A 3D ball-and-stick model of a molecule is visible in the background. Two blue arrows point from text labels at the bottom to the 'Start Animation' button and the table.

vizualizace vibrací

frekvence vibrací

# Vibrační analýza, výstup - Molekel

## Molekel

<http://molekel.cscs.ch/wiki/pmwiki.php>

Program pro vizualizaci molekulárních struktur.

1) Aktivace modulu molekel:

```
$ module add molekel
```

2) Otevření programu molekel:

```
$ molekel
```

3) Načíst do programu soubor *soubor.log*:

4) Animation->Per molecule settings ...

.Animation (Tab) → Animation mode → Vibration

.Vibration (Tab) → zvolit danou vibraci

4) Animation->Start animation

<http://www.youtube.com/watch?v=Aan97dvvVqk>

# Cvičení

1. Namodelujte molekulu formaldehydu. Najděte optimální geometrii. K výpočtu energie použijte semiempirickou kvantově chemickou metodu PM3. Jaká je délka vazby C=O?
2. Proveďte vibrační analýzu na optimalizované geometrii. Jaká je charakteristická vibrace vazby C=O?
3. Jaký je vztah normálních vibrací vůči vlastním číslům a vektorům Hessianu.