

# C7800

# Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Referenční manuál - Avogadro

Petr Kulhánek

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

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

# Avogadro

---

[http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main\\_Page](http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page)

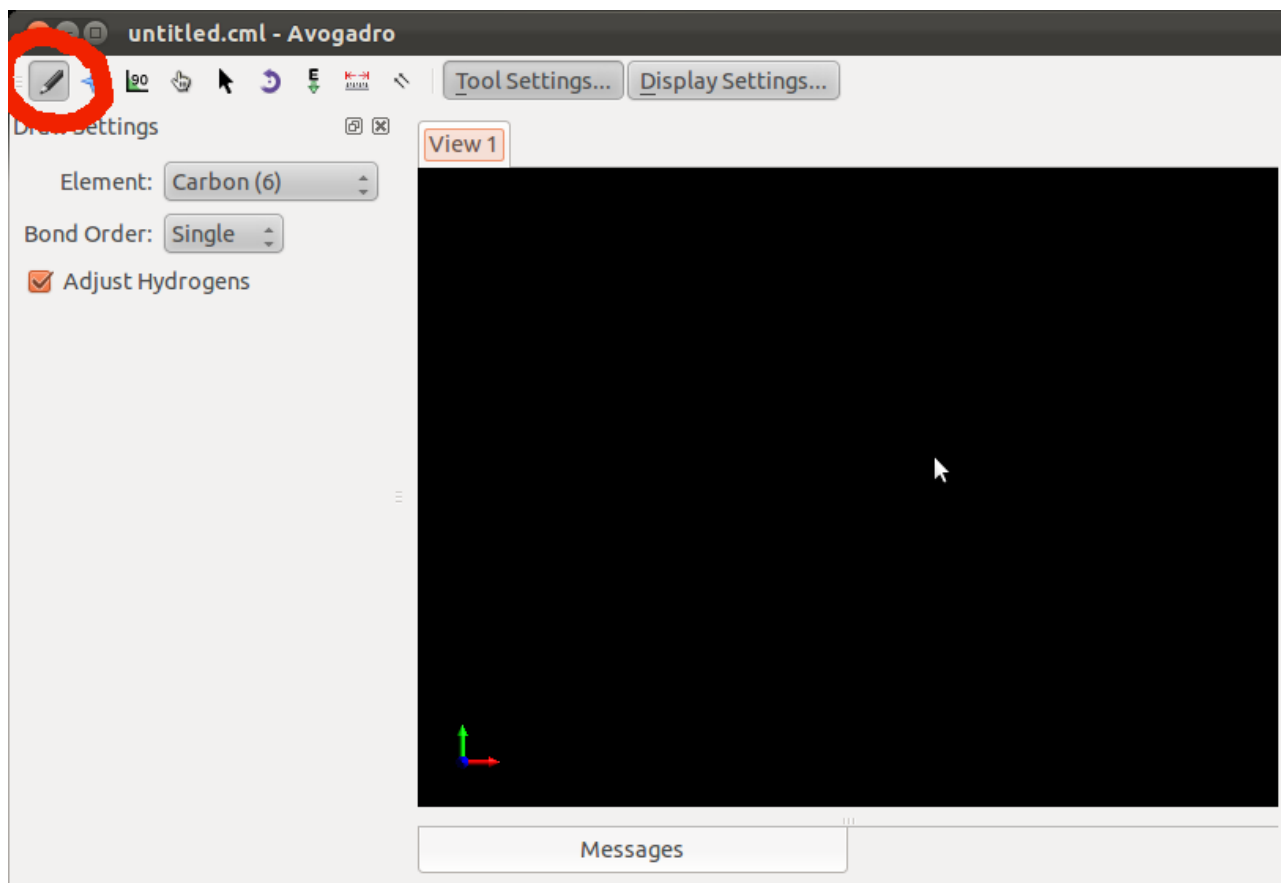
Program pro stavbu a vizualizaci molekul. Volně dostupný pro MS Windows a Linux.

Přehled funkcionality: <https://www.youtube.com/watch?v=xdmLoBILmq8>

# Stavba modelu

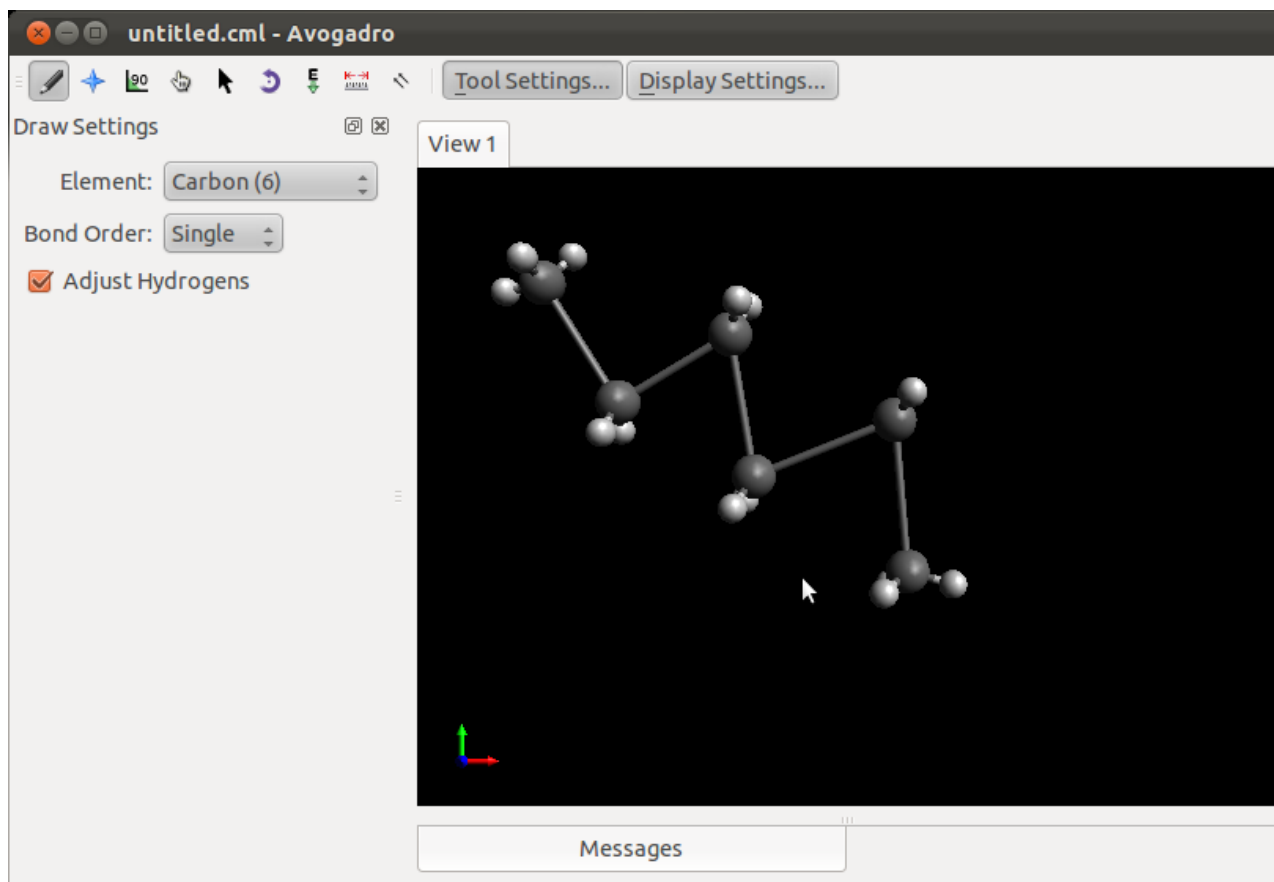
# Stavba modelu

Ke stavbě 3D modelu reaktantu a produktu můžete použít program **Avogadro**. Jedná se o volně šiřitelný program, který lze používat jak pod operačním systémem MS Windows tak i pod Linuxovými klony (např. Ubuntu).



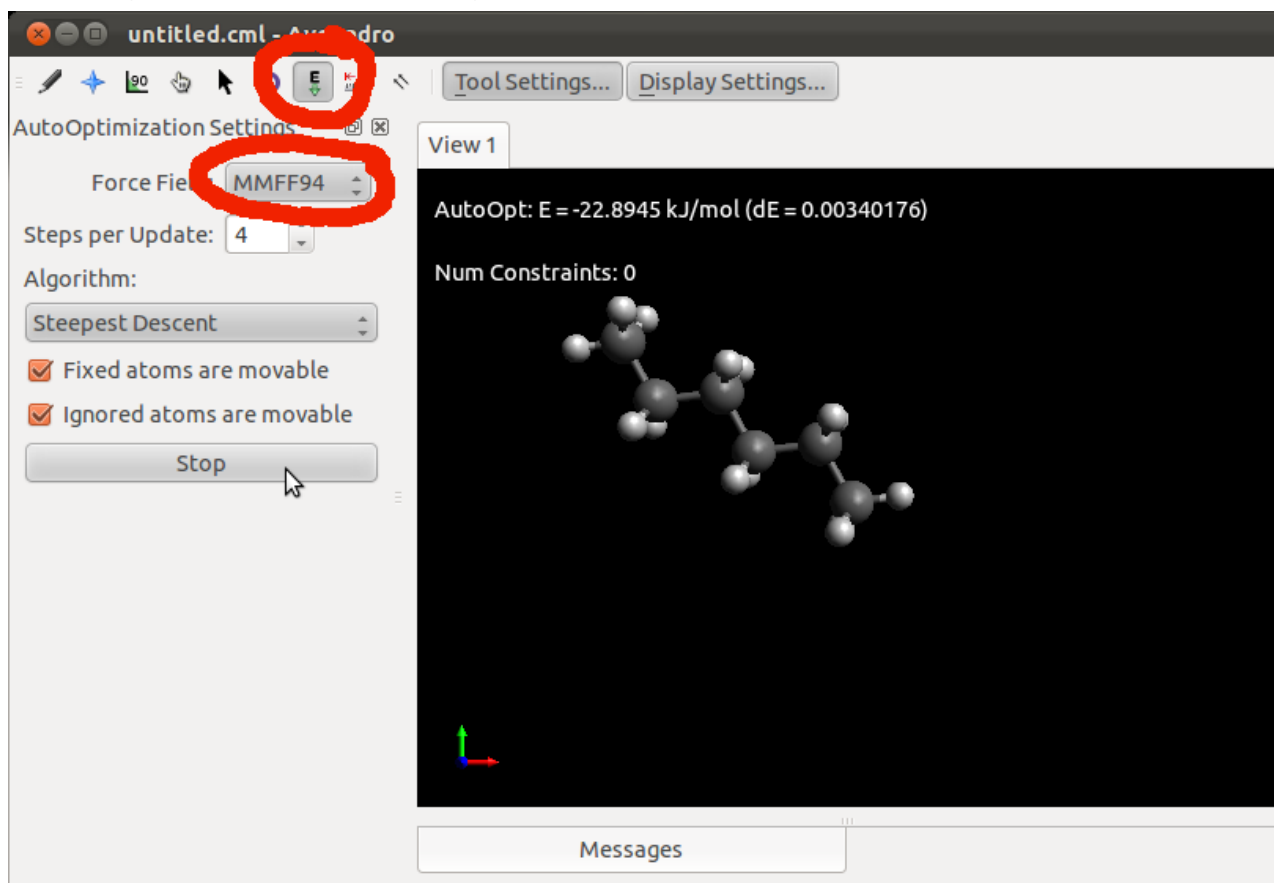
# Draft modelu

Při stavbě molekuly nejsou délky vazeb, úhly a další parametry molekuly optimální. Je to dáno způsobem, jakým se v programu Avogadro, struktury editují. Draft modelu je proto nutné před dalším použitím upravit pomocí optimalizace geometrie.



# Optimalizace modelu

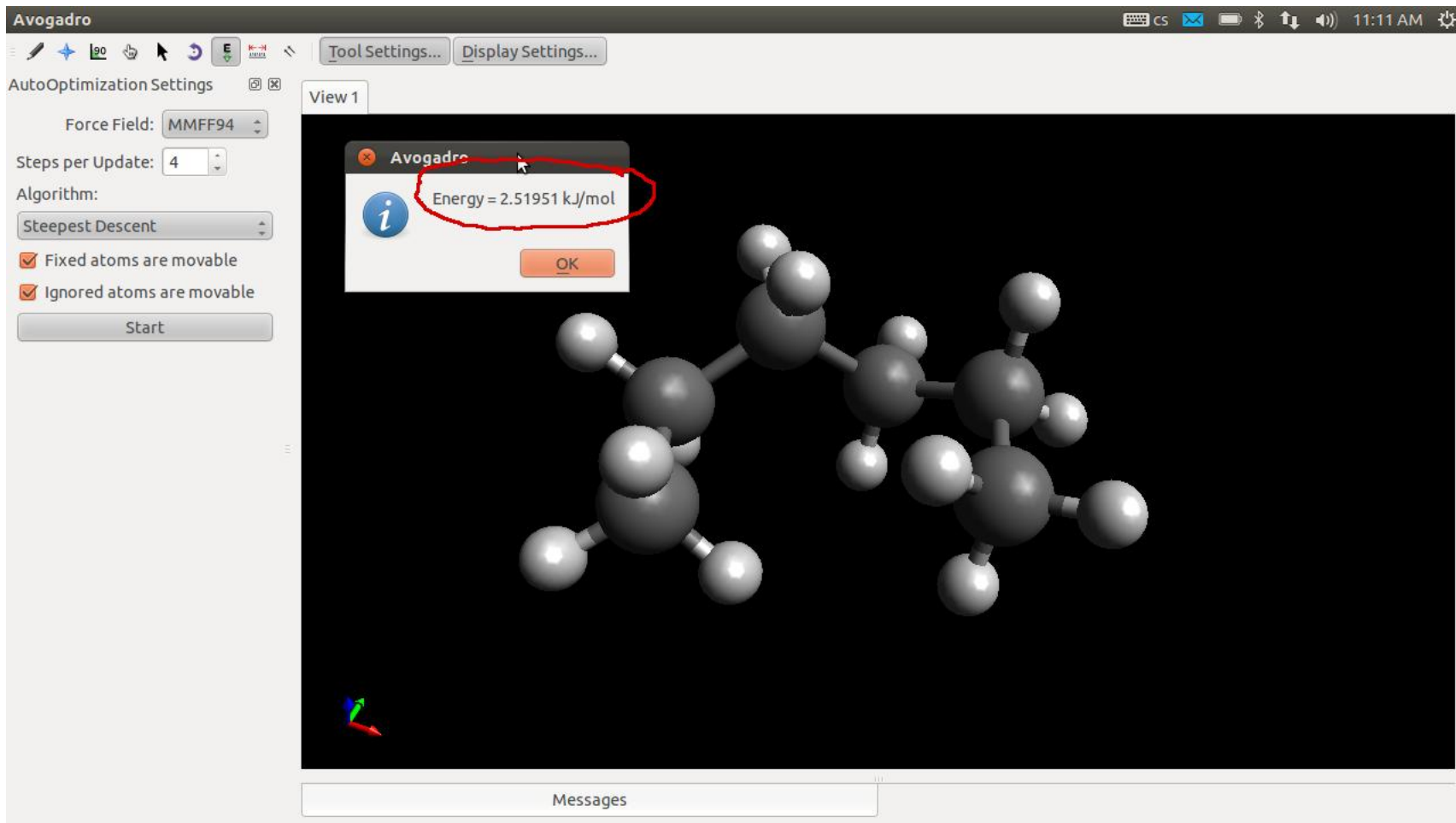
Program používá pro optimalizace geometrie metody molekulové mechaniky (MM). Pro její správnou funkci musíte ve struktuře správně uvést řady vazeb. Protože MM je empirickou metodou, musíte zvolit i typ parametrizace. V našem případě budeme používat silové pole MMFF94.



# Hledání globálního minima

# Hledání nejstabilnější geometrie, I

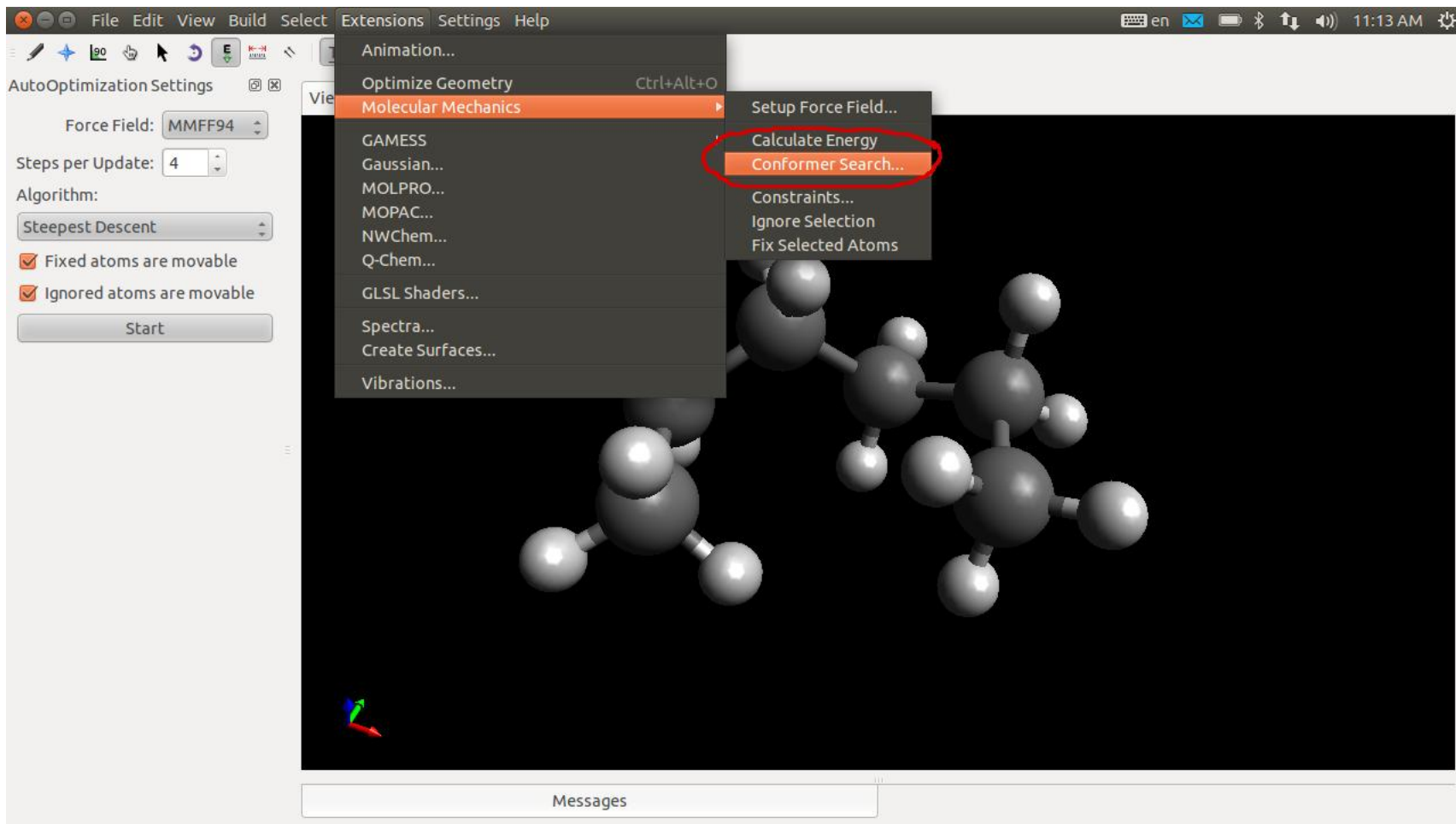
Výchozí optimalizovaná geometrie hexanu má energii 2.5 kJ/mol (MMFF94). Jedná se o lokální minimum na ploše potenciální energie, které však není nejnižší.





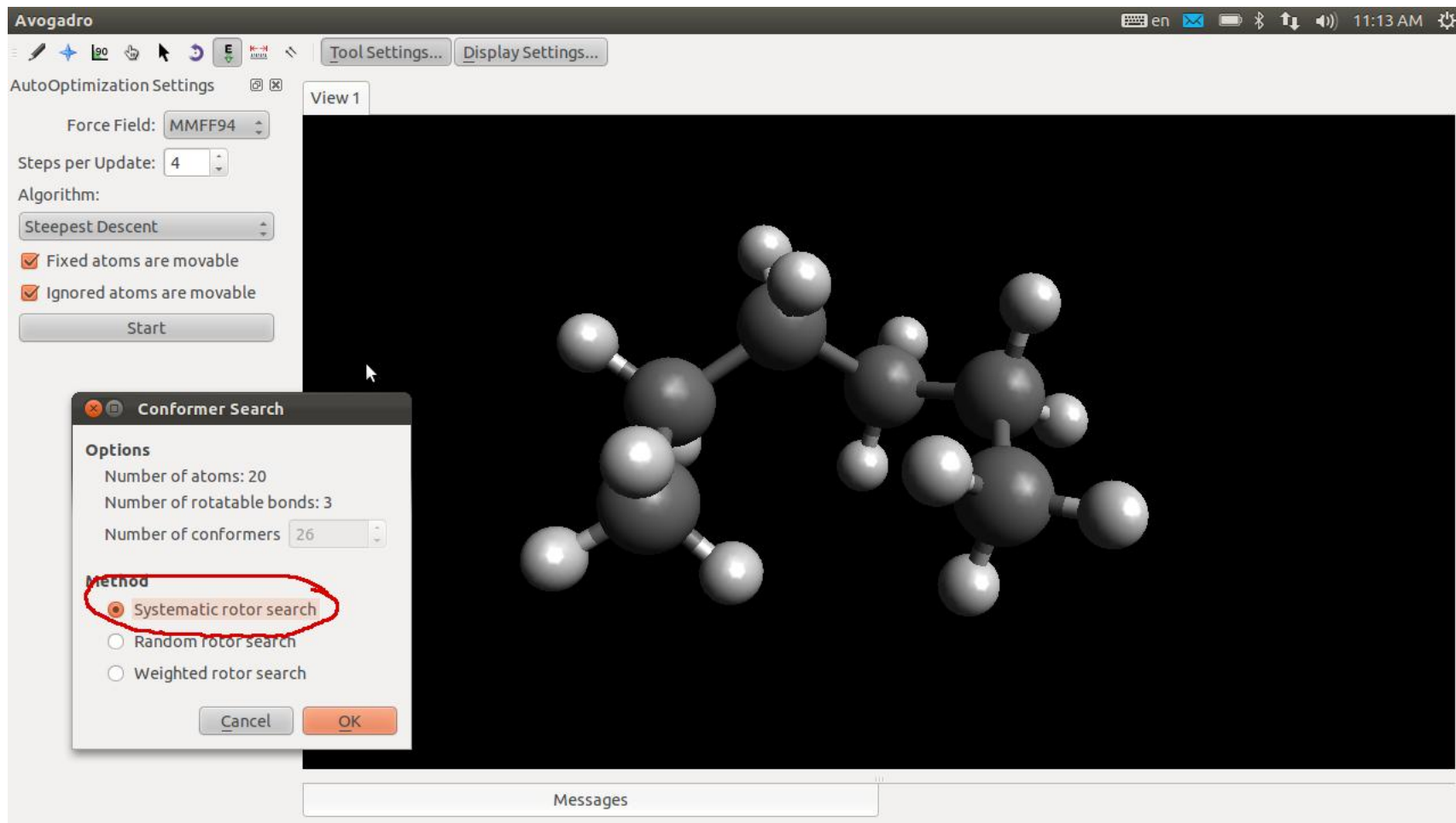
# Hledání nejstabilnější geometrie, II

Avogadro obsahuje metody pro hledání nejstabilnějšího konformeru (struktury).



# Hledání nejstabilnější geometrie, III

K hledání nejstabilnějšího konformeru použijeme metodu systematického hledání.



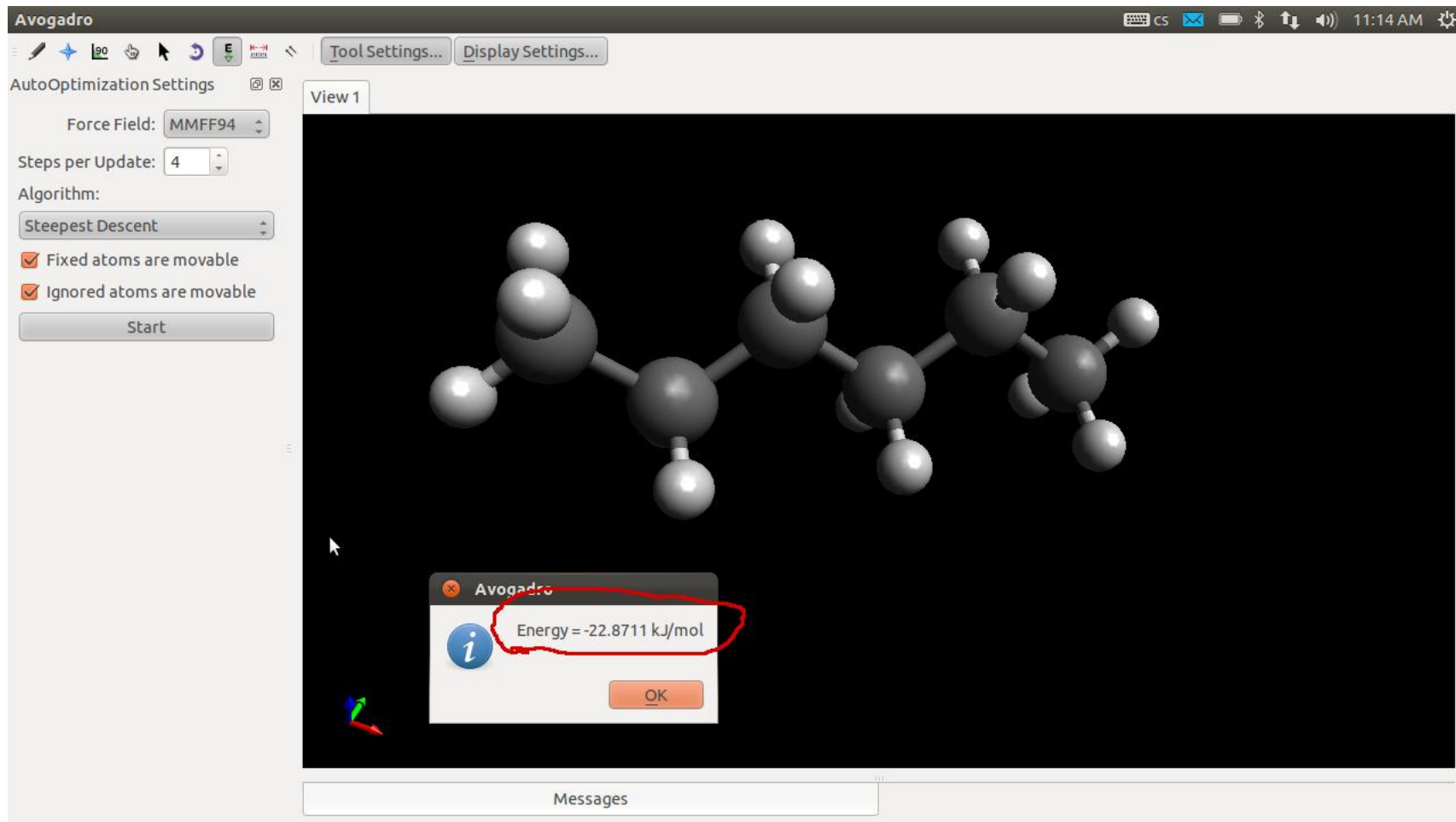
The screenshot displays the Avogadro software interface. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a molecule. On the left, the 'AutoOptimization Settings' panel is visible, with 'Force Field' set to 'MMFF94', 'Steps per Update' set to 4, and 'Algorithm' set to 'Steepest Descent'. A 'Conformer Search' dialog box is open in the foreground, showing the following options:

- Options
  - Number of atoms: 20
  - Number of rotatable bonds: 3
  - Number of conformers: 26
- Method
  - Systematic rotor search
  - Random rotor search
  - Weighted rotor search

The 'Systematic rotor search' option is highlighted with a red circle. The dialog box also includes 'Cancel' and 'OK' buttons. The background shows the Avogadro interface with a toolbar and a 'Messages' panel at the bottom.

# Hledání nejstabilnější geometrie, IV

Nejstabilnější konformer hexanu má energii -22.9 kJ/mol (MMFF94). Geometrii nalezené struktury je vhodné opět zoptimalizovat.



# Vizualizace vibrací

# Vizualizace vibrací

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 two columns: 'Frequency (cm<sup>-1</sup>)' and 'Intensity (km/mol)'. The table lists 8 vibrational modes. Below the table are 'Options' including 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.

	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

Options

Scale:

Display force vectors

Animation speed set by frequency

vizualizace vibrací

frekvence vibrací