

# C7790

# Počítačová chemie a molekulové modelování I

## 11. Projekt I

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

- **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, že nalezená geometrie odpovídá lokálnímu minimu na PES, pomocí vibrační analýzy.
- 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) Zobrazte elektronovou hustotu, zobrazte isoplochu elektronové hustoty a na ní namapovaný elektrostatický potenciál.
- 7) Na stejné geometrii opakujte výpočet uvedený v bodě 5 pro báze: cc-pVTZ, cc-pVQZ a cc-pV5Z
- 8) Energii molekuly vody extrapolujte na CBS (Complete Basis Set), tj. určete hodnotu energie pro metodu HF/CBS
- 9) Extrapolujte dipólový moment na CBS hodnotu.
- 10) Srovnejte hodnotu vypočteného dipólového momentu s experimentální hodnotou, případný rozdíl diskutujte.

## 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** 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). 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

6) (aug-)cc-pVXZ jsou konzistentně korelační báze, které vykazují **exponenciální pokles energie** systému se **vzrůstající velikostí báze**. Tento fakt lze využít k **extrapolaci energie** na úplnou bázi (**CBS – complete basis set** neboli HF-limitu).

$$E(x) = E_{CBS} + Ae^{-Bx}$$

kde  $x$  je číselné vyjádření pro X: 2 (D), 3 (T), 4 (Q)

$E_{CBS}$ ,  $A$ ,  $B$  jsou neznámé konstanty, které lze učit z hodnot energie pro tři hodnoty  $x$  (báze).

Podobná závislost platí i pro jiné vlastnosti systému, např. dipólový moment, frekvence vibrace, geometrický parametr, apod.

$$P(x) = P_{CBS} + A'e^{-B'x}$$



# Výsledky

## Geometrie molekuly vody

doplňte použité silové pole



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

# Výsledky

## Molekula vody – průběh SCF metody HF/cc-pVDZ

SCF Krok	E [au]	$\Delta E_{\text{prev}}$ [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]	$\mu$ [D]	Mulliken		MK ESP	
				q(H)	q(O)	q(H)	q(O)
cc-pVDZ		0,0					
cc-pVTZ							
cc-pVQZ							
cc-pV5Z							
CBS				----	----	----	----

výsledek výpočtu  
absolutní energie (E(RHF))

relativní energie vůči bázi cc-pVDZ

dipólový elektrostatický moment

atomové náboje

# 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) Pro optimalizovanou geometrii proveďte výpočet energie se započítáním BSSE korekce.
- 6) Na stejné geometrii opakujte výpočet uvedený v bodě 5 pro báze: cc-pVTZ, cc-pVQZ a cc-pV5Z
- 7) Energii dimeru molekuly vody extrapolujte na CBS (Complete Basis Set), tj. určete hodnotu energie pro metodu HF/CBS
- 8) Pro každou bázi určete interakční energii mezi molekulami vod. Srovnajte ji s hodnotou vypočtenou s použitím úplné báze. Srovnajte hodnotu interakční energie s hodnotou BSSE chyby. Výsledky diskutujte.

## 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. Do výpočtu energie je však nutné zahrnout korekci na BSSE (Counterpoise=2 + definice fragmentů).

# Výsledek

## Geometrie dimeru molekuly vody

doplňte použité silové pole



Metoda	MM	HF/cc-pVTZ	Rozdíl
d(HO) [Å]			
$\Theta$ (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	$E_r$	$E_{BSSE}$	$E_{BSSE}$	$E_i$
	[au]	[kcal/mol]	[au]	[kcal/mol]	[kcal/mol]
cc-pVDZ		0,0			
cc-pVTZ					
cc-pVQZ					
cc-pV5Z					
CBS					

výsledek výpočtu  
absolutní energie včetně korekce na BSSE

relativní energie vůči bázi cc-pVDZ

interakční energie mezi  
molekulami vody

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