

# 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

- **Požadavky na zpracování výsledků**
- **Tématické okruhy**
  - Diesova-Alderova [4+2] cykloadice
  - [3,3]-sigmatropní přesmyk chorismátu na prefenát

# Požadavky na zpracování výsledků

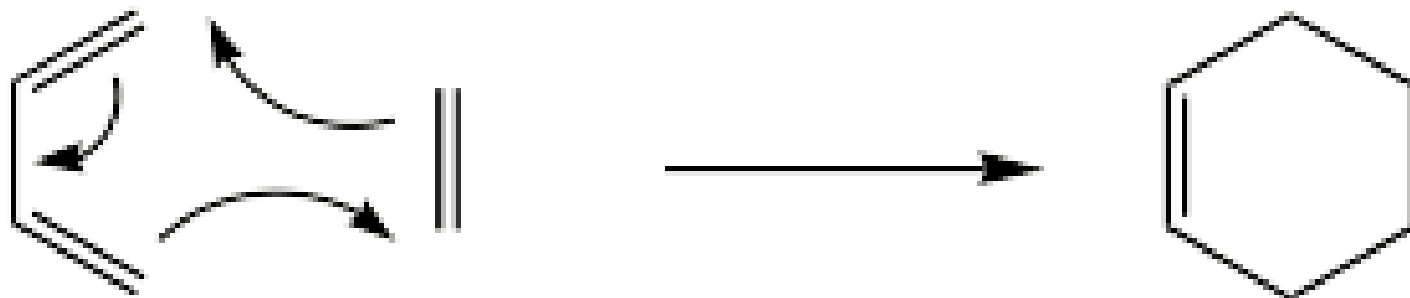
Výsledky jednotlivých cvičení budou zpracovány do protokolu, který bude mít následující náležitosti:

- 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 a grafy)
  - Diskuze výsledků dle zadání
  - Použitá literatura (např. u experimentálních hodnot)

Protokol ve formátu **pdf** je nutné odevzdat do konce semestru.

# Dielsova-Alderova [4+2] cykloadiční reakce

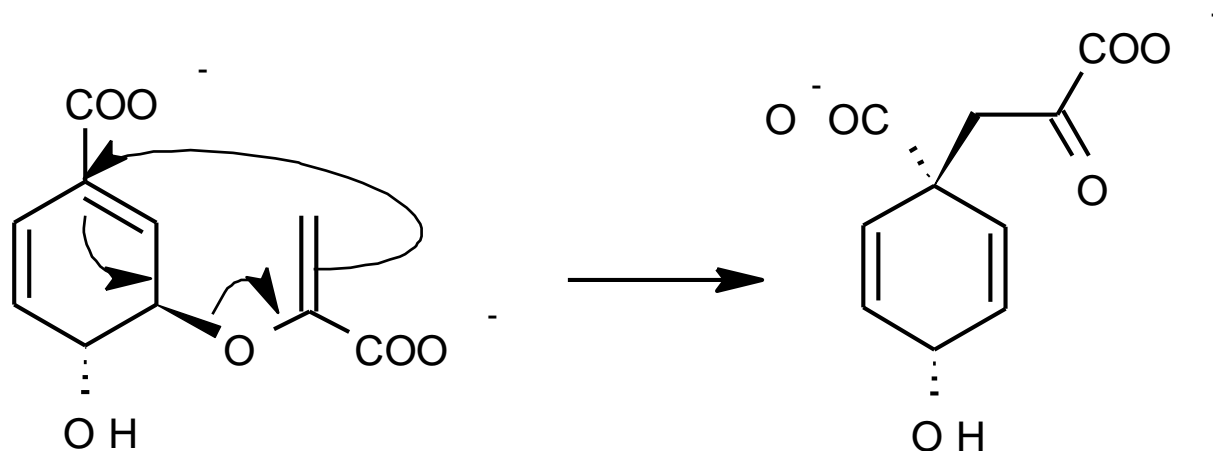
---



# Úkoly

- 1) Namodelujte molekulu butadienu, ethenu a cyklohexenu a proved'te optimalizaci jejich geometrie pomocí molekulové mechaniky.
- 2) Zoptimalizujte geometrie molekul pomocí kvantově chemické metody PM3 (u této metody se explicitně neuvádí báze). Ověřte, zda-li jsou nalezené geometrie lokálními minimy na PES. Určete reakční energii.
- 3) Vyberte vhodného kandidáta (reaktanty nebo produkt) pro metodu single coordinate driving (SCD) sloužící pro nalezení odhadu geometrie tranzitního stavu. Pro daného kandidáta zvolte vhodnou aproximaci reakční koordináty.
- 4) Proved'te SCD za použití metody PM3. Zobrazte průběh energie podél reakční koordináty. Vizualně ověřte namodelovanou reakční cestu.
- 5) Optimalizujte geometrii tranzitního stavu reakce metodou PM3. Ověřte, že se jedná o sedlový bod prvního řádu na PES.
- 6) Optimalizujte geometrii předreakčního komplexu metodou PM3. Ověřte, že se jedná o lokální minimum na PES.
- 7) Určete aktivační energie dopředné i zpětné reakce (vůči předreakčnímu komplexu a produktu reakce).
- 8) Určete energii vzniku předreakčního komplexu.

# [3,3]-sigmatropní přesmyk chorismátu na prefenát



# Úkoly

- 1) Namodelujte molekulu chorismátu a preferátu a proveďte optimalizaci jejich geometrie pomocí molekulové mechaniky. Použijte program avogadro a pokuste se nalézt globální konformační stav pro oba reakční stavy.
- 2) Zoptimalizujte geometrie chorismátu a preferátu pomocí kvantově chemické metody PM3. Ověřte, zda-li jsou nalezené geometrie lokálními minimy na PES. Určete reakční energii.
- 3) Vyberte vhodného kandidáta (reaktant nebo produkt) pro metodu single coordinate driving (SCD) sloužící pro nalezení odhadu geometrie tranzitního stavu. Pro daného kandidáta zvolte vhodnou aproximaci reakční koordináty.
- 4) Proveďte SCD metodou PM3. Zobrazte průběh energie podél reakční koordináty. Vizuálně ověřte namodelovanou reakční cestu.
- 5) Optimalizujte geometrii tranzitního stavu reakce metodou PM3. Ověřte, že se jedná o sedlový bod prvního řádu na PES.
- 6) Určete předreakční a postreakční geometrie. Srovnejte je s globálními konformačními stavy a diskutujte rozdíl.
- 7) Určete aktivační energie dopředné i zpětné reakce vůči předreakčnímu a postreakčnímu stavu.