

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Referenční manuál - Gaussian

Petr Kulháněk

kulhanek@chemi.muni.cz

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

Gaussian

<http://www.gaussian.com>

Nápověda:

Tech Support -> Gaussian 09 Help:

- Table of Contents
- Keyword List

!!! Všechny výstupy níže uvedené jsou pouze ukázkami !!!

Jejich obsah nesouvisí s řešenými úkoly.

Vstupní soubor

Link0 příkazy – uvozeny %, lze použít pro specifikaci jména archivu (checkpoint), množství paměti, počtu procesorů určených pro výpočet (všechny položky jsou volitelné)

Příkazová řádka – uvozena #, specifikuje typ výpisu (viz Route (#)), **metodu a typ výpočtu**

The diagram shows an input file for a quantum chemistry calculation with several annotations:

- metoda**: points to `RHF/cc-pVDZ`
- báze vlnové funkce**: points to `Opt`
- optimalizace geometrie**: points to `Opt`
- náboj**: points to `0`
- multiplicita $M=2S+1$** : points to `1`
- celkový spin elektronů**: points to `0`
- prázdný řádek**: points to the empty line after `# RHF/cc-pVDZ Opt`
- prázdný řádek**: points to the empty line after `optimalizace geometrie molekuly vody`
- prázdný řádek**: points to the empty line after the coordinate table
- specifikace geometrie systému (kartézské souřadnice v Å)**: points to the coordinate table
- zakončena prázdným řádkem**: points to the empty line after the coordinate table

```
%chk=h2o.chk
# RHF/cc-pVDZ Opt
optimalizace geometrie molekuly vody
0 1
O 0.000000 0.000000 -0.154167
H 0.000000 0.854766 0.538096
H 0.000000 -0.854766 0.538096
```

O	0.000000	0.000000	-0.154167
H	0.000000	0.854766	0.538096
H	0.000000	-0.854766	0.538096

Spuštění výpočtu

```
$ module add gaussian  
$ g09 soubor.com
```

aktivace modulu gaussian
pouze jednou v daném terminálu

jméno vstupního souboru

program gaussian

Po doběhnutí úlohy bude **výsledek výpočtu** uložen v souboru **soubor.log**, na posledním řádku souboru musí být uvedeno:

```
Normal termination of Gaussian 09 at Sun Oct 26 20:20:09 2014.
```

v opačném případě je výpočet neúspěšný. Důvod předčasného ukončení výpočtu je nutné hledat ve výstupním souboru.

**Na klastru WOLF je doporučeno výpočty
žadávat do dávkového systému pomocí
rozhraní Infinity.**

Tento postup je podrobně popsán v následující kapitole.

Výpočet energie

Optimalizace geometrie

Výpočet energie a optimalizace

```
%chk=h2o.chk
# RHF/cc-pVDZ Pop=MK

vypocet energie molekuly vody

0 1
O      0.000000      0.000000     -0.154167
H      0.000000      0.854766      0.538096
H      0.000000     -0.854766      0.538096
```

bez klíčového slova **Opt**
pouze výpočet energie,
vlnové funkce a vlastností
systému
(single point výpočet)

zakončeno prázdným řádkem

```
%chk=h2o.chk
# RHF/cc-pVDZ Opt Pop=ChelpG

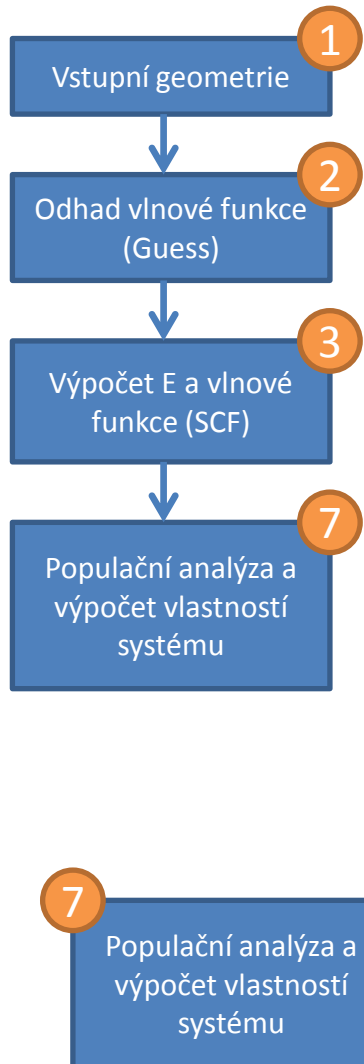
optimalizace geometrie molekuly vody

0 1
O      0.000000      0.000000     -0.154167
H      0.000000      0.854766      0.538096
H      0.000000     -0.854766      0.538096
```

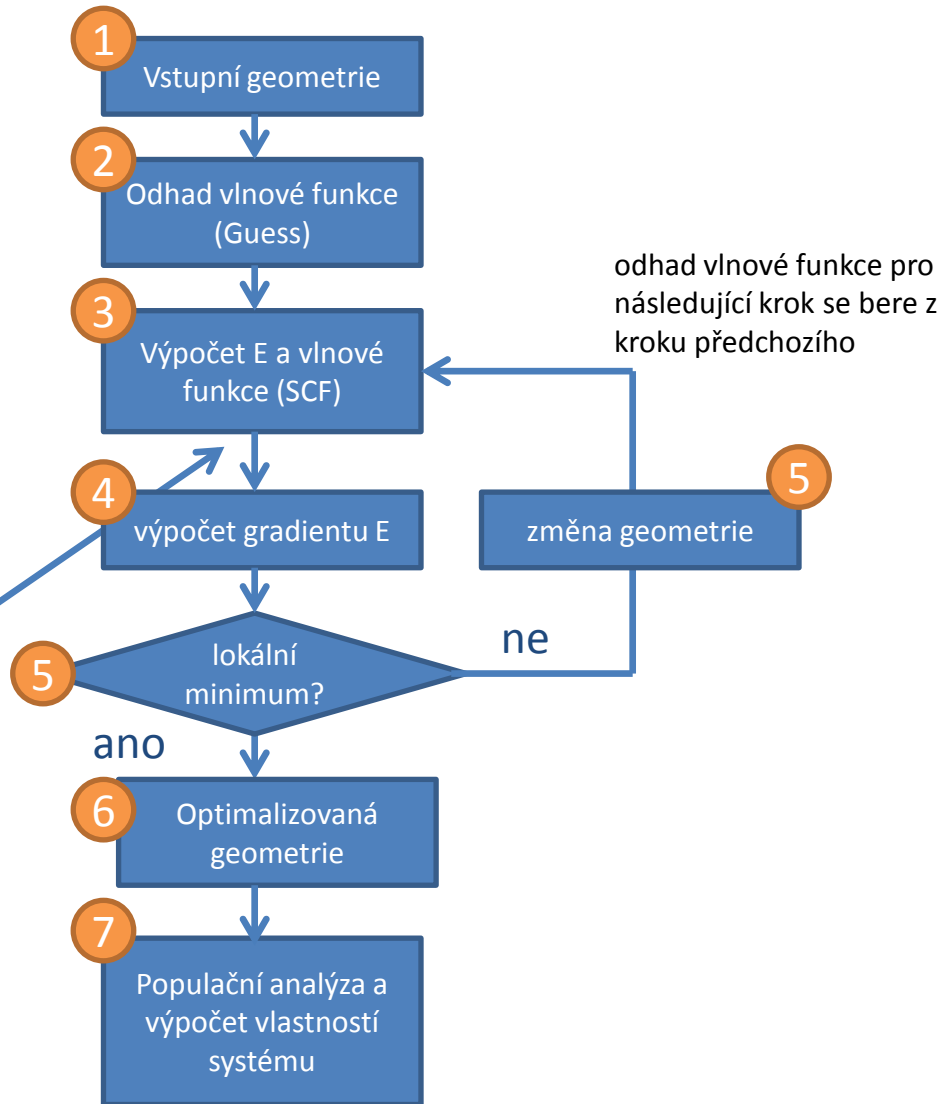
zakončeno prázdným řádkem

Průběh výpočtu

Výpočet energie



Optimalizace geometrie



Extrakce dat - optimalizace

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 analyzovat průběh optimalizace, např. v programu **vmd** nebo **Avogadro**

Extrakce dat – optimalizace, pokr.

Průběh optimalizace (energie):

```
$ 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. Geometrii **soubor_last.xyz** si můžeme prohlédnout v programu **Avogadro**, **Nemesis**, **vmd**.

Vibrační analýza

Vibrační analýza

```
%chk=h2o.chk
# RHF/cc-pVDZ Freq

vibracni analyza

0 1
O      0.0000000      0.0000000      -0.0780430
H      0.0000000      0.7492420      0.5000340
H      0.0000000     -0.7492420      0.5000340
```

← zakončeno prázdným řádkem

Pokud je **vstupní geometrie stacionárním bodem** na PES, lze z počtu imaginárních frekvencí normálních vibrací určit typ stacionárního bodu.

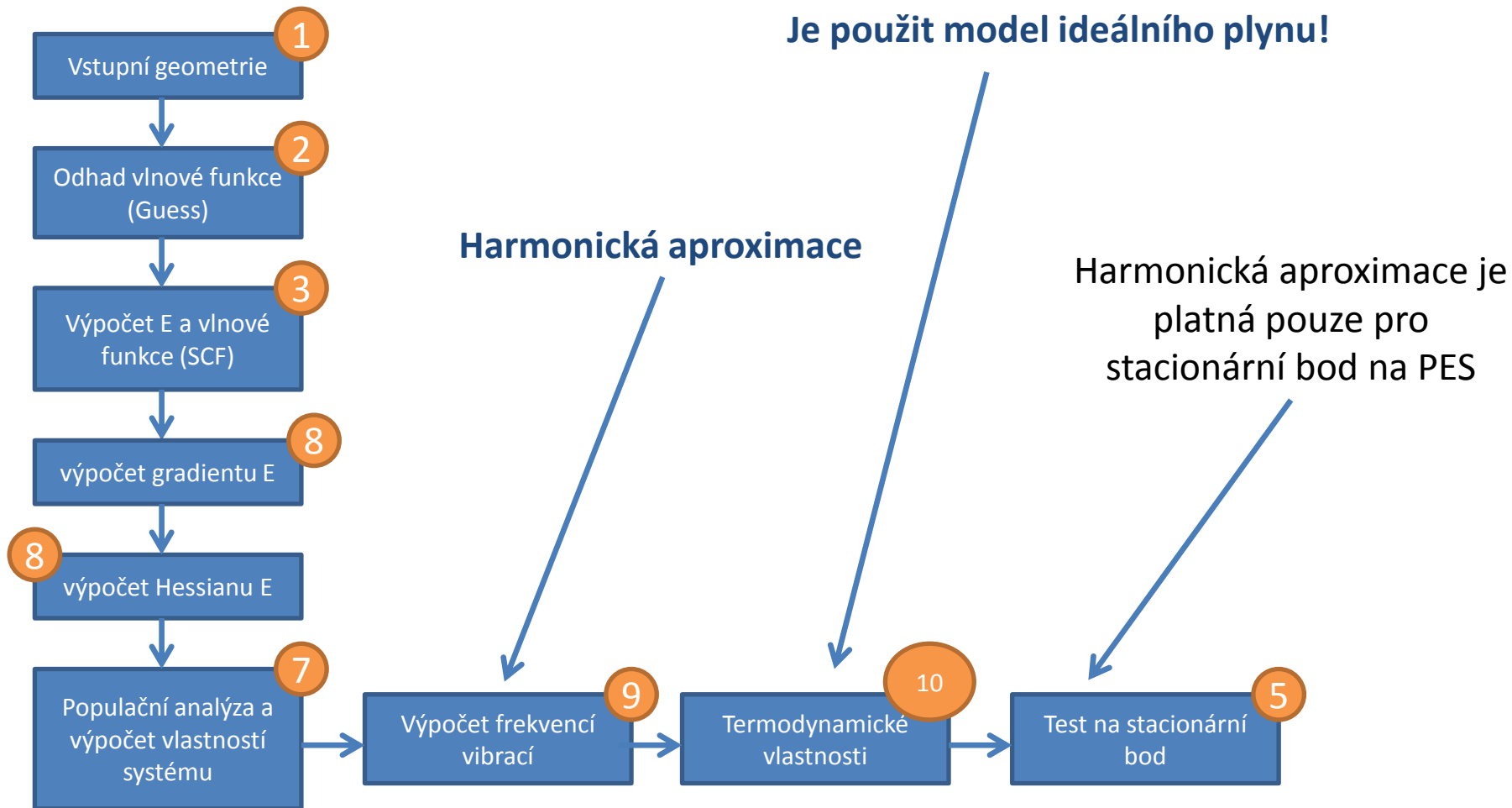
0 imaginárních frekvencí = **lokální minimum**

1 imaginární (záporná) frekvence = **tranzitní stav prvního řádu**

Vibrační analýza vyžaduje výpočet Hessianu, což může být výpočetně velmi náročné.

Průběh výpočtu

Výpočet energie



BSSE

CP korekce na BSSE

```
%Chk=ene.chk
# RHF/cc-pVDZ Counterpoise=2

vypocet energie s korekci na BSSE

0 1
O(Fragment=1) 0.231135 0.063539 0.203312
H(Fragment=1) 0.374693 0.253491 1.116647
H(Fragment=1) 0.074728 -0.864502 0.130817
O(Fragment=2) -1.648273 1.893276 -1.229780
H(Fragment=2) -1.166742 2.355543 -1.894982
H(Fragment=2) -1.036494 1.311764 -0.798971
```

Výpočet energie s
korekcí na BSSE

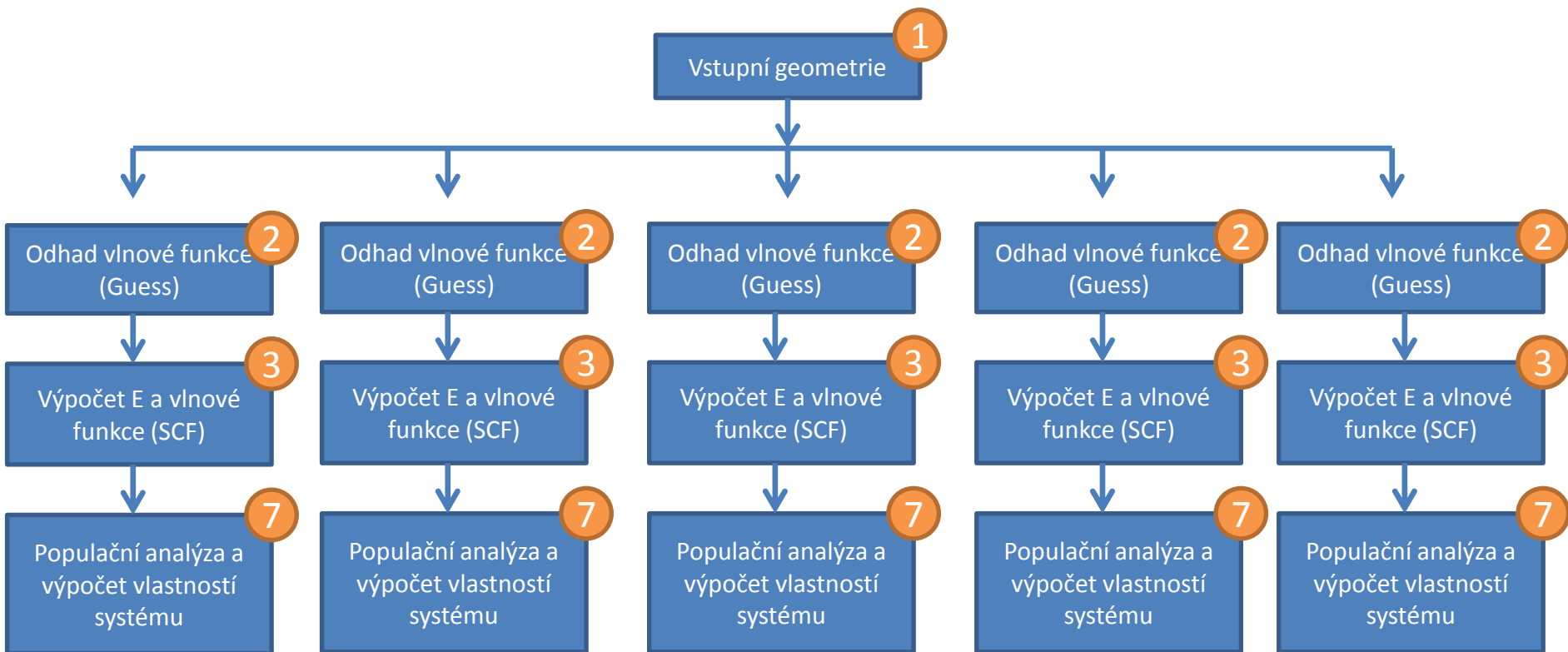
zakončeno prázdným řádkem

Fragmenty představují interagující molekuly.

Counterpoise korekce na BSSE vyžaduje celkem 5 výpočtů energie [AB, A(B), (A)B, A, B], které program Gaussian provede automaticky.

Tuto korekci je možné použít při optimalizace geometrie.

Průběh výpočtu



AB

A(B)

(A)B

A

B

$$E_{CP} = E_{AB} + \underbrace{(E_A - E_{A(B)}) + (E_B - E_{(A)B})}_{BSSE}$$

BSSE

11
Korigovaná energie

Hledání reakční cesty

(single coordinate driving)

Driving, strategie

Cílem **drivingu** je nalézt **odhad tranzitního stavu** reakce. Driving se provádí tak, že se mění zvolený geometrický parametr a všechny ostatní stupně geometrické volnosti se optimalizují. Parametrem může být např. zkracování délky mezi atomy, mezi kterými v průběhu reakce vzniká vazba.

Volba vhodné reakční koordináty popisující průběh reakce:

- Reakční koordináta je většinou velmi komplikovaná
- Je nutno použít zjednodušenou koordinátu co nejlépe postihující reakci
- Vybíráme z jednoduchých geometrických parametrů (délka, úhel, torzní úhel atd.)
- U reakcí se nejčastěji používají vzdálenosti mezi atomy, mezi kterými vznikají nebo zanikají vazby.
- U konformačních přechodů se většinou používají torzní úhly.
- Jako výchozí stav drivingu volíme stav s nejmenším počtem konformačních stupňů volnosti. Pokud je to tedy výhodné, driving můžeme provádět ve směru od produktu k reaktantu.

Driving, vstup

```
%chk=driving.chk  
# PM3 Opt=ModRedundant NoSymm
```

```
single coordinate driving
```

```
X X  
X .....  
X .....  
X .....  
.....
```

```
B A1 A2 S NStep StepSize
```

aktivuje driving

náboj multiplicita
geometrie

zakončeno prázdným řádkem

zakončeno prázdným řádkem

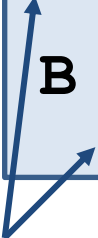
měníme
vzdálenost

délka kroku (kladné nebo záporné číslo), číslo musí obsahovat
desetinou tečku (pro vzdálenost je optimální délka kroku okolo 0.1 Å)
počet kroků (celé číslo)

čísla atomů, mezi kterými budeme měnit
vzdálenost (počítá se od jedné)

Driving, příklad

```
.....  
H      -7.27527      1.28418      0.56205  
  
B 4 11 S 15 -0.1
```



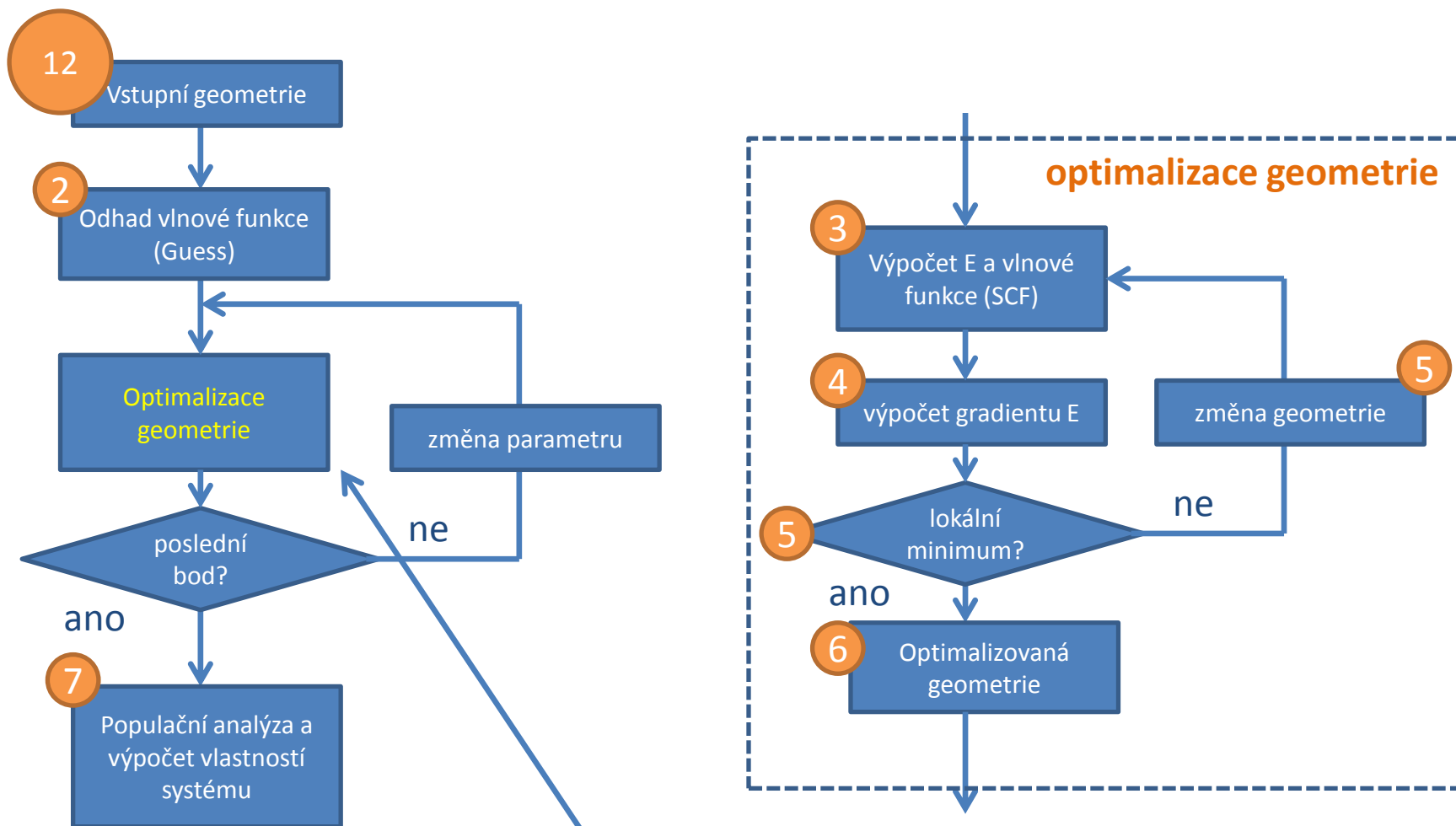
prázdný řádek

Zkracujeme délku (B) mezi atomy 4 a 11 a to v patnácti krocích vždy o 0.1 Å.

Podrobná dokumentace:

http://gaussian.com/g_tech/g_ur/k_opt.htm – sekce ModRedundant

Průběh výpočtu



V průběhu optimalizace je hodnota parametru, který se drívuje, neměnná.

Driving, výsledky

1) Aktivace modulu qmutil:

```
$ module add qmutil
```

Je vhodné podívat se na průběh drivingu, např. v programu vmd nebo Avogadro.

2) Zobrazení průběhu drivingu (energie):

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

3) Průběh drivingu (všechny geometrie):

```
$ extract-gdrv-xyz soubor.log > soubor_drv.xyz
```

4) Získání významné (N-té) geometrie:

```
$ extract-xyz-str soubor_drv.xyz N1 > soubor_TS.xyz
```

Číslo struktury, kterou chceme vyextrahovat ze souboru soubor_drv.xyz.

Driving, výsledky

Příklad: Dielsova Alderova cykloadiční reakce

Coordinate: R(4,7)

#	Step	Value	Energy [kcal/mol]	S	Energy [au]
	1	1.5380	0.000	-	0.002554791
	2	1.6380	2.648	/	0.006774307
	3	1.7380	8.526	/	0.016141320
	4	1.8380	15.826	/	0.027774776
	5	1.9380	23.919	/	0.040672342
	6	2.0380	32.626	/	0.054548199
	7	2.1380	41.714	/	0.069029627
	8	2.2380	50.746	/	0.083423613
	9	2.3380	59.194	/	0.096886686
	10	2.4380	66.597	/	0.108683559
	11	2.5380	72.657	/	0.118340986
	12	2.6380	77.257	/	0.125671188
	13	2.7380	80.400	/	0.130680500
	14	2.8380	36.191	\	0.060228061
	15	2.9380	35.376	\	0.058929736
	16	3.0380	34.774	\	0.057970622

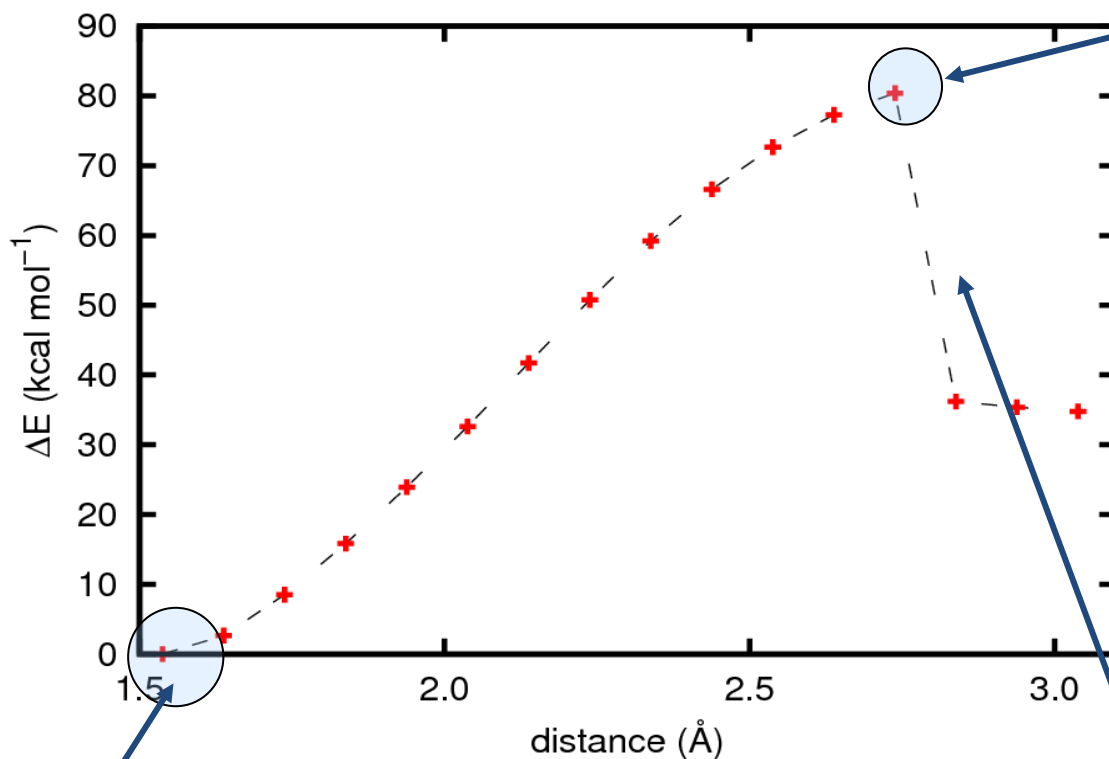
Číslo struktury

Struktura s maximální energií na reakční cestě =>
odhad tranzitního stavu

Driving, výsledky

Příklad: Dielsova Alderova cykloadiční reakce

coordinate driving



Struktura s maximální energií na reakční cestě => odhad tranzitního stavu

produkt (výchozí stav drivingu)

trháme vazbu

Zlom indikuje, že použitá koordináta ne zcela správně postihuje průběh reakce

Optimalizace geometrie tranzitního stavu reakce

Optimalizace TS, vstup

aktivuje optimalizaci tranzitního stavu

```
%chk=ts.chk  
# PM3 Opt( CalcFC, TS, NoEigenTest, MaxCycle=25)  
  
optimalizace geometrie tranzitního stavu  
  
X X  
X      ....      ....      ....  
X      ....      ....      ....  
X      ....      ....      ....
```

zakočeno prázdným řádkem

CalcFC

výpočet silových konstant (Hessianu) je proveden na výchozí geometrii

CalcAll

výpočet silových konstant (Hessianu) je proveden na každé geometrii v průběhu optimalizace (Newtonova-Raphsonova metoda)

Optimalizace TS, výstup

Výstup **zpracováváme stejně** jako by se jednalo o normální optimalizaci geometrie.

- Pokud je překročen maximální počet kroků, je možné zkusit pokračovat v optimalizaci (extrahovat poslední souřadnice a znovu provést optimalizaci). Druhou možností je místo klíčového slova **CalcFC** použít klíčové slovo **CalcAll**.
- Pokud není TS nalezen do cca 30 optimalizačních kroků, je nutné nalézt vhodnější odhad TS.
- TS musí mít pouze jednu imaginární (“zápornou”) frekvenci.
- Vibrační pohyb s imaginární frekvencí musí sledovat vznik a zánik vazeb odpovídající reakčním kroku.

- Pokud se TS nepodaří nalézt, je možné použít místo drivingu metodu QST2 (Opt=QST2, viz. http://gaussian.com/g_tech/g_ur/k_opt.htm)

Výstupní soubor

Výstupní soubor I a II

1. Vstupní geometrie v interních souřadnicích

```
-----  
!      Initial Parameters      !  
! (Angstroms and Degrees)    !  
-----  
! Name  Definition              Value              Derivative Info.      !  
-----  
! R1    R(1,2)                  1.0999            estimate D2E/DX2      !  
! R2    R(1,3)                  1.0999            estimate D2E/DX2      !  
! A1    A(2,1,3)                101.9929          estimate D2E/DX2      !  
-----
```

2. Odhad vlnové funkce

počet báзовých funkcí = počet koeficientů c , které je nutné nalézt během SCF procedury

```
Two-electron integral symmetry is turned off.  
 24 basis functions,      47 primitive gaussians,      25 cartesian basis functions  
 5 alpha electrons       5 beta electrons  
 nuclear repulsion energy      8.0071357792 Hartrees.  
NAtoms=    3 NActive=    3 NUniq=    3 SFac= 1.00D+00 NAtFMM=    60 NAOKFM=F Big=F  
One-electron integrals computed using PRISM.  
NBasis=    24 RedAO= T   NBF=    24  
NBsUse=    24 1.00D-06 NBFU=    24  
Harris functional with IExCor= 205 diagonalized for initial guess.
```

počáteční odhad vlnové funkce

Výstupní soubor III

3. Výpočet energie a vlnové funkce

```
SCF Done: E(RHF) = -75.9901319773  
          Convg = 0.5258D-08
```

Výsledná energie

Změna energie v posledním kroku SCF procedury

```
A.U. after 10 cycles
```

```
-V/T = 2.0057
```

Počet SCF kroků potřebných k nalezení E a vlnové funkce

virialový teorém

Energie je v atomových jednotkách.

Úplný průběh SCF procedury je vypsán, pokud je ve vstupním souboru uvedeno #P

Výstupní soubor III, pokračování

```
Cycle 1 Pass 1 IDiag 1:
E= -75.9710832672194
DIIS: error= 4.94D-02 at cycle 1 NSaved= 1.
NSaved= 1 IEnMin= 1 EnMin= -75.9710832672194 IErMin= 1 ErrMin= 4.94D-02
ErrMax= 4.94D-02 EMaxC= 1.00D-01 BMatC= 1.08D-01 BMatP= 1.08D-01
IDIUse=3 WtCom= 5.06D-01 WtEn= 4.94D-01
Coeff-Com: 0.100D+01
Coeff-En: 0.100D+01
Coeff: 0.100D+01
Gap= 0.463 Goal= None Shift= 0.000
GapD= 0.463 DampG=2.000 DampE=0.500 DampFc=1.0000 IDamp=-1.
RMSDP=6.04D-03 MaxDP=1.13D-01 OVMaX= 1.12D-01
```

kráceno

```
.....
Cycle 10 Pass 1 IDiag 1:
E= -76.0418076480768 Delta-E= 0.000000000000 Rises=F Damp=F
DIIS: error= 2.15D-08 at cycle 10 NSaved= 10.
NSaved=10 IEnMin=10 EnMin= -76.0418076480768 IErMin=10 ErrMin= 2.15D-08
ErrMax= 2.15D-08 EMaxC= 1.00D-01 BMatC= 8.09D-15 BMatP= 1.54D-13
IDIUse=1 WtCom= 1.00D+00 WtEn= 0.00D+00
Coeff-Com: -0.199D-06 0.154D-05 0.181D-04-0.155D-03 0.397D-03 0.649D-03
Coeff-Com: -0.110D-01 0.669D-01-0.441D+00 0.138D+01
Coeff: -0.199D-06 0.154D-05 0.181D-04-0.155D-03 0.397D-03 0.649D-03
Coeff: -0.110D-01 0.669D-01-0.441D+00 0.138D+01
Gap= 0.546 Goal= None Shift= 0.000
RMSDP=4.57D-09 MaxDP=4.52D-08 DE=-3.84D-13 OVMaX= 8.92D-08
```

```
SCF Done: E(RHF) = -76.0418076481 A.U. after 10 cycles
Conv g = 0.4573D-08 -V/T = 2.0008
```

Výstupní soubor IV

4. Výpočet gradientu

síly = záporně vzatý gradient energie (v atomových jednotkách)



Center Number	Atomic Number	Forces (Hartrees/Bohr)		
		X	Y	Z
1	8	0.000000000	0.000000000	0.131133317
2	1	0.000000000	-0.085534245	-0.065566658
3	1	0.000000000	0.085534245	-0.065566658

Cartesian Forces: Max 0.131133317 RMS 0.067020838

Výstupní soubor V

5. Optimalizace geometrie

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad

Berny optimization.

Internal Forces: Max 0.107734851 RMS 0.088033019

...

Variable	Old X	-DE/DX	Delta X (Linear)	Delta X (Quad)	Delta X (Total)	New X
R1	2.07857	-0.10773	0.00000	-0.21160	-0.21160	1.86697
R2	2.07857	-0.10773	0.00000	-0.21160	-0.21160	1.86697
A1	1.78011	-0.00599	0.00000	-0.02126	-0.02126	1.75885

kráceno

Item	Value	Threshold	Converged?
Maximum Force	0.107735	0.000450	NO
RMS Force	0.088033	0.000300	NO
Maximum Displacement	0.177009	0.001800	NO
RMS Displacement	0.154831	0.001200	NO

Predicted change in Energy -3.060008D-02

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad

konvergenční kritéria pro optimalizaci geometrie

plánovaná změna geometrie

Výstupní soubor VI

6. Optimalizovaná geometrie

```
Item                Value      Threshold  Converged?
Maximum Force      0.000267   0.000450   YES
RMS Force          0.000172   0.000300   YES
Maximum Displacement 0.000999   0.001800   YES
RMS Displacement   0.000967   0.001200   YES
Predicted change in Energy=-2.315429D-07
Optimization completed.
```

-- Stationary point found.

```
-----
!   Optimized Parameters   !
! (Angstroms and Degrees)  !
```

```
-----
! Name  Definition                Value      Derivative Info.      !
-----
! R1    R(1,2)                    0.9463    -DE/DX = -0.0001      !
! R2    R(1,3)                    0.9463    -DE/DX = -0.0001      !
! A1    A(2,1,3)                   104.696   -DE/DX = -0.0003      !
-----
```

Grad

Výstupní soubor VII

7. Populační analýza a výpočet vlastností systému (kráceno)

```
Alpha occ. eigenvalues -- -20.54839 -1.34218 -0.70556 -0.56822 -0.49389
Alpha virt. eigenvalues --  0.18742  0.25779  0.79793  0.86396  1.16257
```

energie molekulových orbitalů

obsazené
neobsazené

Mulliken atomic charges:

```
      1
  1  O  -0.292462
  2  H   0.146231
  3  H   0.146231
```

Mullikenovy atomové (bodové) náboje

Sum of Mulliken atomic charges = 0.00000

Dipole moment (field-independent basis, Debye):

```
  X=          0.0000    Y=          0.0000    Z=          2.0430    Tot= 2.0430
```

Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):

```
  XX=         -7.0085    YY=         -4.1369    ZZ=         -5.7327
  XY=          0.0000    XZ=          0.0000    YZ=          0.0000
```

dipólový a kvadrupólový elektrostatický moment

Typ populační analýzy lze měnit pomocí klíčového slova: **pop**

Výstupní soubor VIII

```
Differentiating once with respect to electric field.
      with respect to dipole field.
      Electric field/nuclear overlap derivatives assumed to be zero.
      Keep R1 ints in memory in canonical form, NReq=873499.
      There are      3 degrees of freedom in the 1st order CPHF.  IDoFFX=0.
      3 vectors produced by pass  0 Test12= 3.17D-15 3.33D-08 XBig12= 1.15D+00 6.84D-01.
AX will form      3 AO Fock derivatives at one time.
      3 vectors produced by pass  1 Test12= 3.17D-15 3.33D-08 XBig12= 5.63D-02 1.22D-01.
      3 vectors produced by pass  2 Test12= 3.17D-15 3.33D-08 XBig12= 7.24D-03 3.79D-02.
      3 vectors produced by pass  3 Test12= 3.17D-15 3.33D-08 XBig12= 2.25D-04 7.06D-03.
      3 vectors produced by pass  4 Test12= 3.17D-15 3.33D-08 XBig12= 4.04D-06 8.17D-04.
      3 vectors produced by pass  5 Test12= 3.17D-15 3.33D-08 XBig12= 2.96D-08 7.41D-05.
      3 vectors produced by pass  6 Test12= 3.17D-15 3.33D-08 XBig12= 3.37D-10 9.10D-06.
      2 vectors produced by pass  7 Test12= 3.17D-15 3.33D-08 XBig12= 1.95D-12 5.99D-07.
      1 vectors produced by pass  8 Test12= 3.17D-15 3.33D-08 XBig12= 9.82D-15 4.57D-08.
Inverted reduced A of dimension      24 with in-core refinement.
End of Minotr Frequency-dependent properties file      721 does not exist.
End of Minotr Frequency-dependent properties file      722 does not exist.
Symmetrizing basis deriv contribution to polar:
IMax=3 JMax=2 DiffMx= 0.00D+00
G2DrvN: will do      4 centers at a time, making      1 passes doing MaxLOS=2.
Calling FoFCou, ICntrl=  3107 FMM=F I1Cent=   0 AccDes= 0.00D+00.
FoFDir/FoFCou used for L=0 through L=2.
End of G2Drv Frequency-dependent properties file      721 does not exist.
End of G2Drv Frequency-dependent properties file      722 does not exist.
```

Výstupní soubor IX

6(5) vibrací musí mít nízké frekvence (ideálně nulové) – 3 translační a 3 rotační stupně volnosti systému

Full mass-weighted force constant matrix:

Low frequencies --- -40.7995 -0.0019 -0.0015 0.0005 37.6815 55.2358

Low frequencies --- 1774.9584 4112.7795 4211.8138

Harmonic frequencies (cm⁻¹), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A⁴/AMU), depolarization ratios for plane and unpolarized incident light, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A), and normal coordinates:

	1	2	3
	A1	A1	B2
Frequencies --	1774.9584	4112.7795	4211.8137
Red. masses --	1.0818	1.0460	1.0821
Frc consts --	2.0080	10.4246	11.3093
IR Inten --	80.8414	21.1644	60.8089
Raman Activ --	4.7861	68.9225	34.7495
Depolar (P) --	0.5271	0.1703	0.7500
Depolar (U) --	0.6903	0.2910	0.8571

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	8	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.05	0.00	0.07	0.00
2	1	0.00	-0.43	-0.56	0.00	0.58	-0.40	0.00	-0.56	0.43
3	1	0.00	0.43	-0.56	0.00	-0.58	-0.40	0.00	-0.56	-0.43

frekvence normálních vibrací

směr pohybů atomů pro normální vibraci

Výstupní soubor X

E(RHF) = -76.0270533118

Je použit model ideálního plynu!

$$E_k = E_m(R_{opt,m}) + E_{VRT,l}$$

- Thermochemistry -

Temperature 298.150 Kelvin. Pressure 1.00000 Atm.

....
Zero-point correction= 0.023008 (Hartree/Particle)
Thermal correction to Energy= 0.025843
Thermal correction to Enthalpy= 0.026787
Thermal correction to Gibbs Free Energy= 0.005411
Sum of electronic and zero-point Energies= -76.004045
Sum of electronic and thermal Energies= -76.001211
Sum of electronic and thermal Enthalpies= -76.000267
Sum of electronic and thermal Free Energies= -76.021642

podmínky

kráceno

energie vibrací pro
základní stav

Gibbsova energie

	E (Thermal) KCal/Mol	CV Cal/Mol-Kelvin	S Cal/Mol-Kelvin
Total	16.216	5.989	44.988
Electronic	0.000	0.000	0.000
Translational	0.889	2.981	34.608
Rotational	0.889	2.981	10.376
Vibrational	14.439	0.028	0.004

http://gaussian.com/g_whitepap/thermo.htm

Výstupní soubor XI

7. Výpočet s korekcí na BSSE

```
Counterpoise: corrected energy = -152.060077655641  
Counterpoise: BSSE energy = 0.002829142358
```

velikost chyby



energie komplexu s korekcí na BSSE

Výstupní soubor XII

! Initial Parameters !
! (Angstroms and Degrees) !

! Name	Definition	Value	Derivative Info.	!
! R1	R(1,2)	1.4982	estimate D2E/DX2	!
! R2	R(1,6)	1.3351	estimate D2E/DX2	!
! R3	R(1,17)	1.0954	estimate D2E/DX2	!
! R4	R(2,3)	1.4982	estimate D2E/DX2	!
! R5	R(2,7)	1.6028	estimate D2E/DX2	!
! R6	R(2,13)	1.5363	estimate D2E/DX2	!
! R7	R(3,4)	1.3351	estimate D2E/DX2	!
! R8	R(3,18)	1.0954	estimate D2E/DX2	!
! R9	R(4,5)	1.5075	estimate D2E/DX2	!
! R10	R(4,11)	3.7721	Scan	!
! R11	R(4,19)	1.0924	estimate D2E/DX2	!

R – vzdálenost mezi atomy 4 a 11

výchozí hodnota

indikuje, že se souřadnice bude měnit během
SCD metody