

TSM

Modelování molekulárních struktur

Referenční manuál - Avogadro

Petr Kulhánek

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

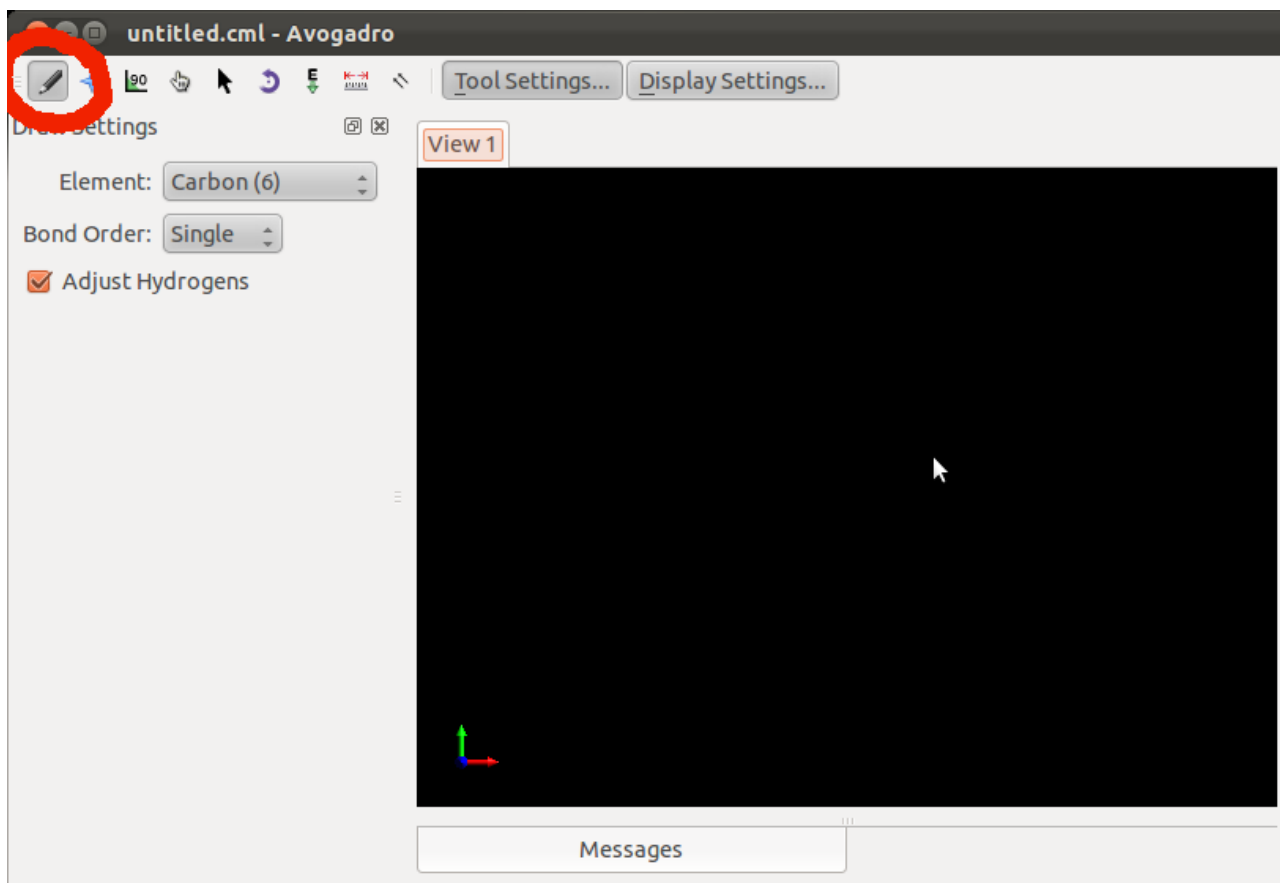
Program pro stavbu a vizualizaci molekul. Volně dostupný pro MS Windows a Linux.

Přehled funkcionality: <https://www.youtube.com/watch?v=xdmLoBILmq5>

Stavba modelu

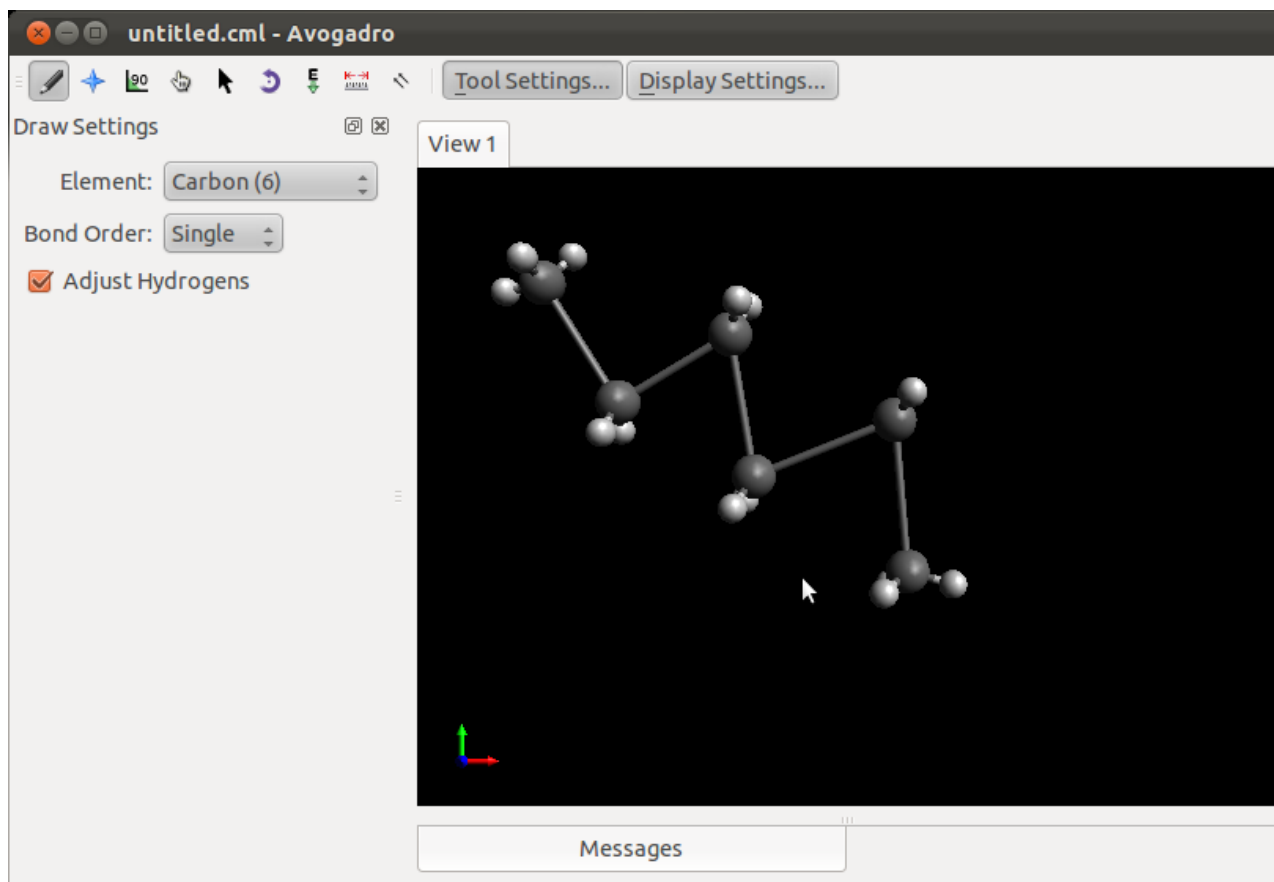
Stavba modelu

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).



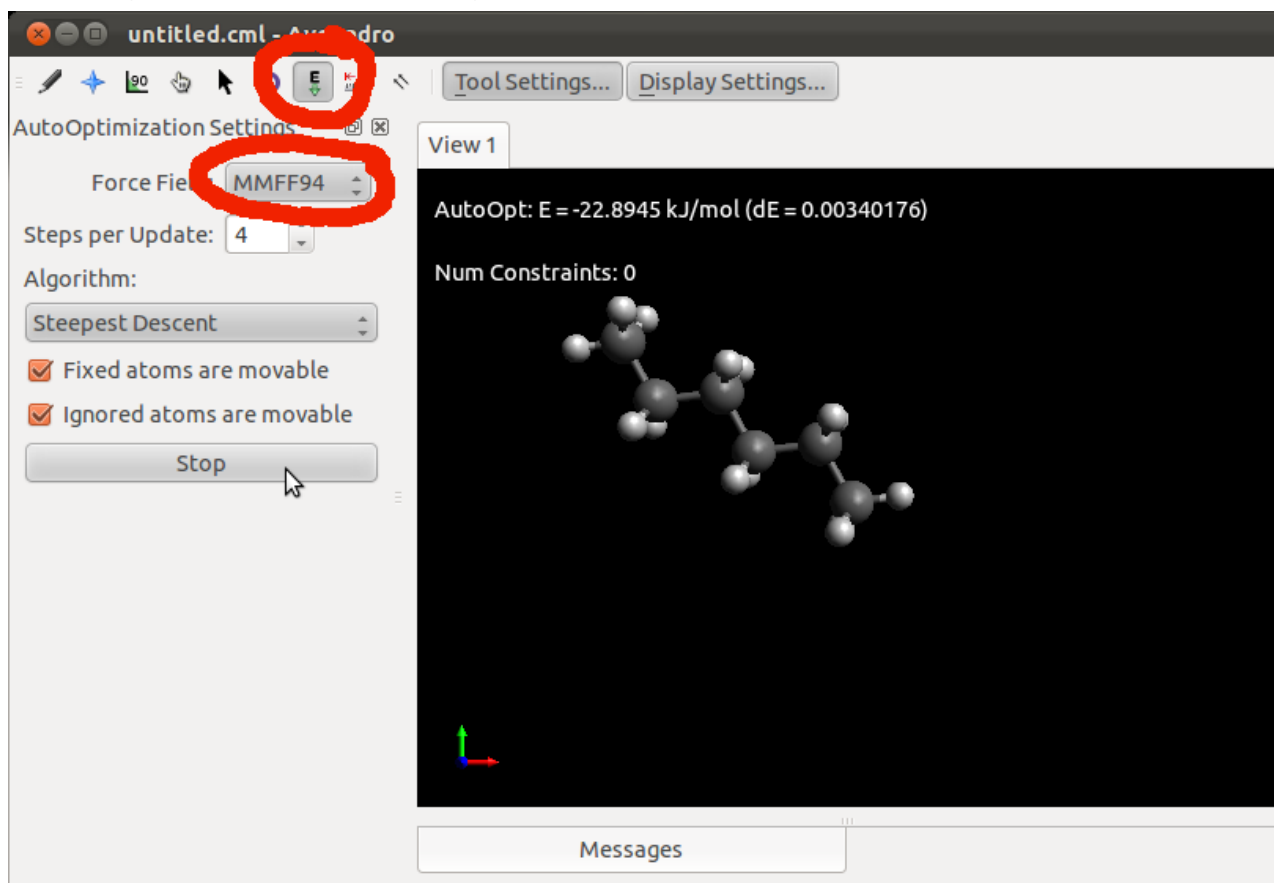
Draft modelu

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

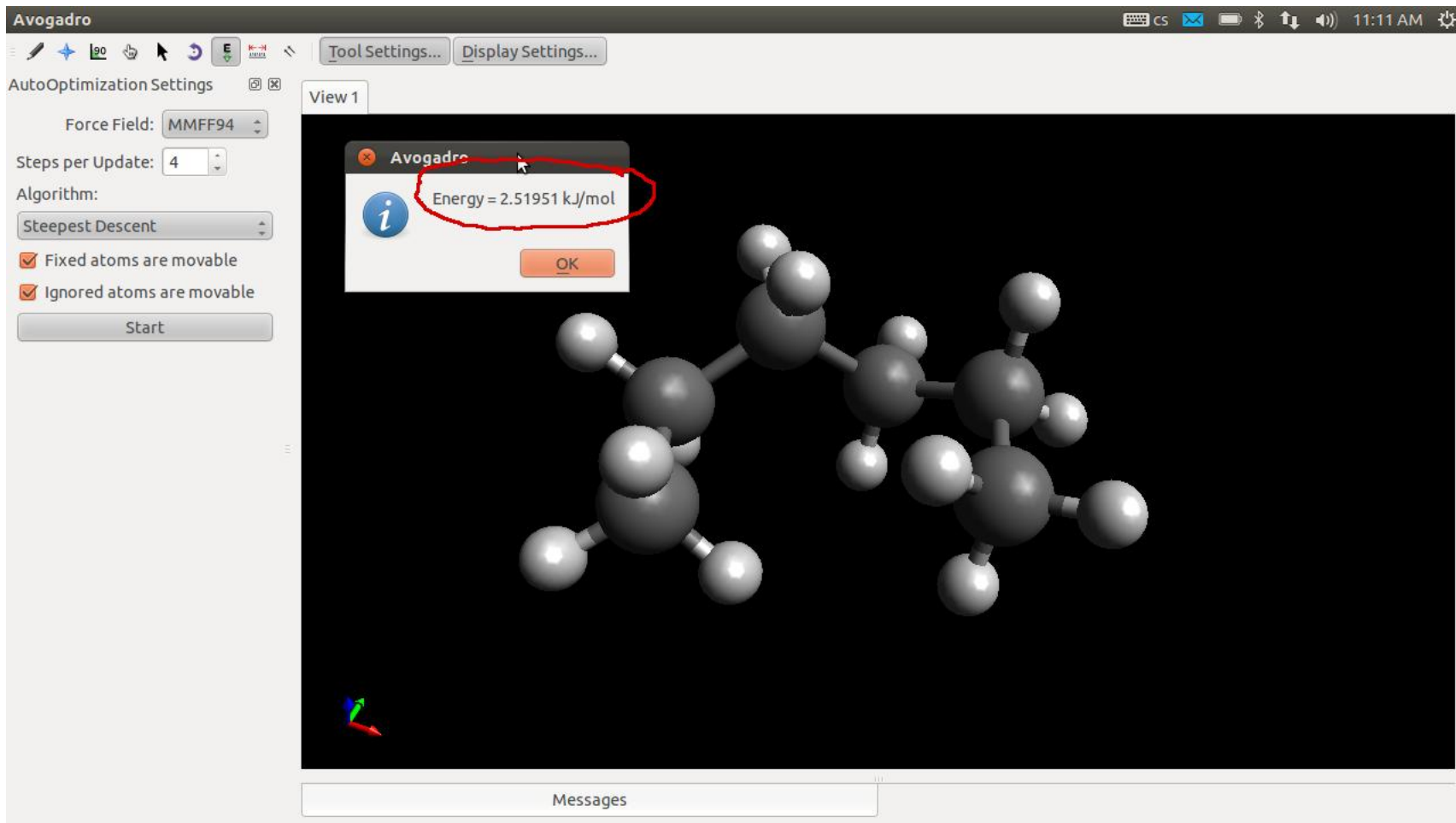
Program používá pro optimalizace geometrie metody molekulové mechaniky (MM). Pro její správnou funkci musíte ve struktuře správně uvést řady vazeb. Protože MM je empirickou metodou, musíte zvolit i typ parametrizace. V našem případě budeme používat silové pole MMFF94.



Hledání globálního minima

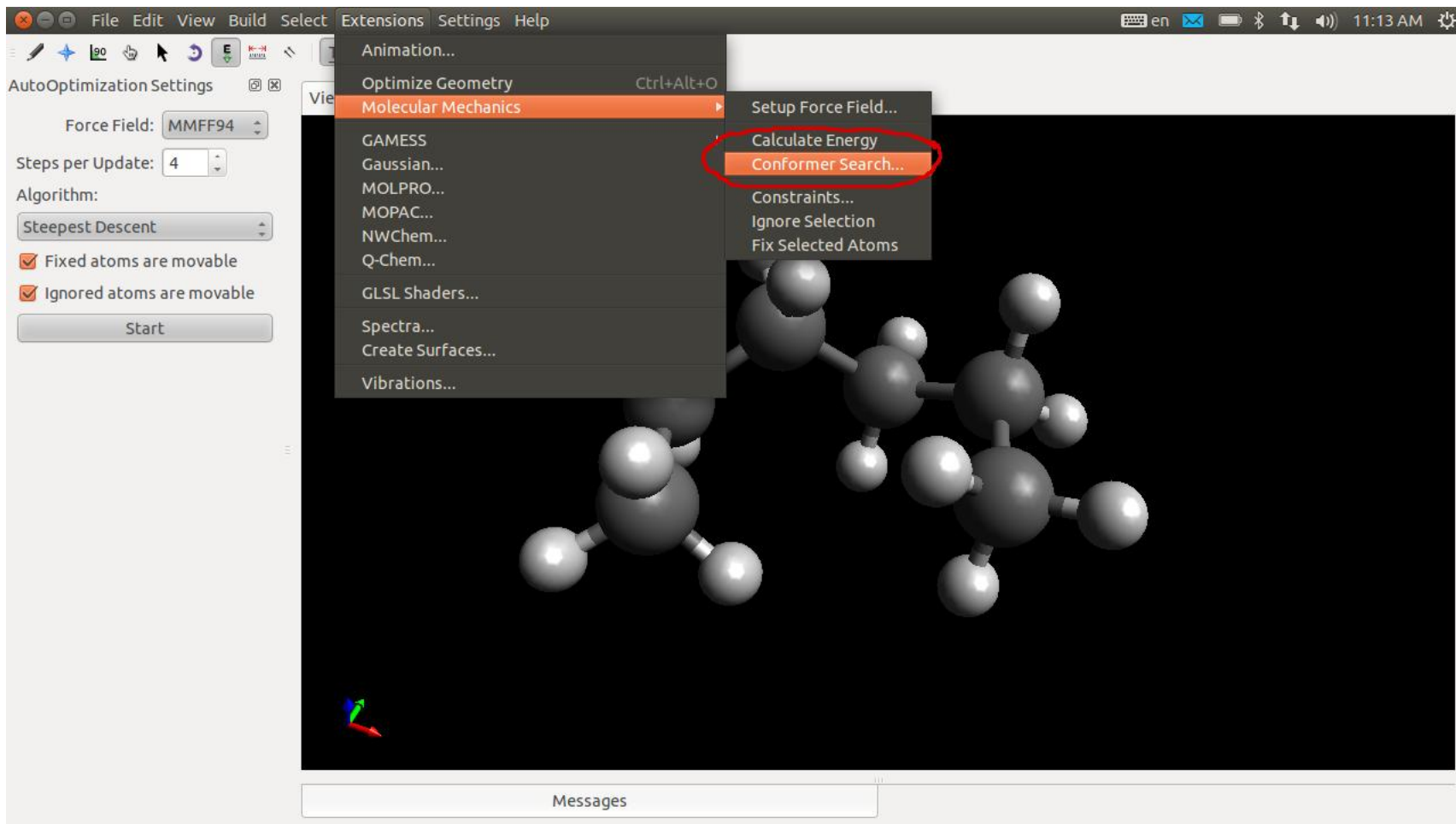
Hledání nejstabilnější geometrie, I

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.

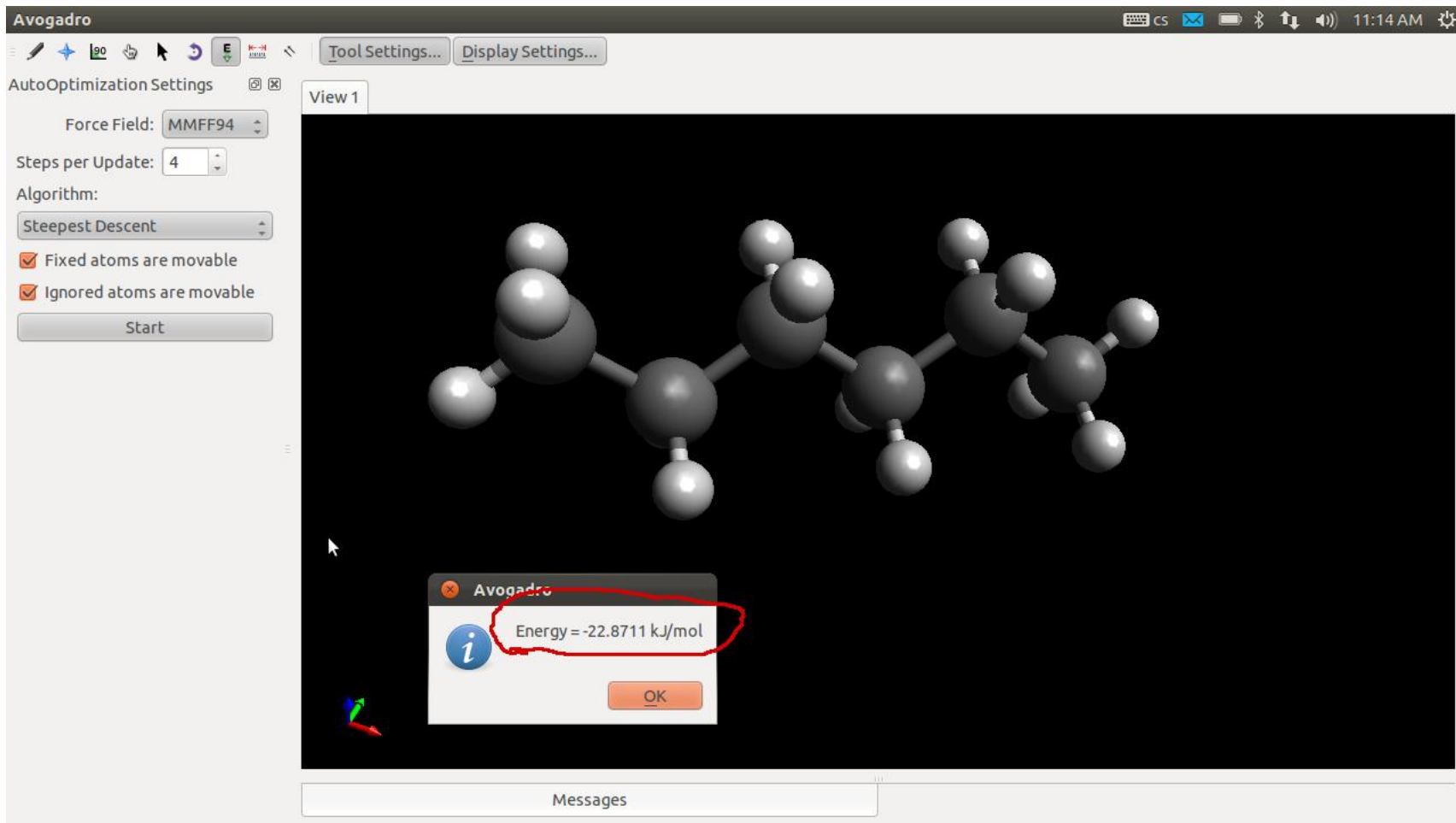
The screenshot displays the Avogadro software interface. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a molecule. On the left, the 'AutoOptimization Settings' panel is visible, with 'Force Field' set to 'MMFF94', 'Steps per Update' set to 4, and 'Algorithm' set to 'Steepest Descent'. A 'Conformer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

	Frequency (cm ⁻¹)	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 the 'Start Animation' button: one to the 3D model and another to the table.

vizualizace vibrací

frekvence vibrací