

# C7790

# Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

12. Projekt Ia

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

# Molekula vody

## Dimer molekuly vody

---

Kvantově-chemické výpočty

### Molekula vody

- struktura a energie
  - vliv báze
- vlastnosti

### Dimer molekuly vody

- interakční energie
  - vliv báze

Část Ia



# K zamyšlení

- Jaký vliv má velikost báze na hodnotu absolutní energie molekuly vody?
- Jaký vliv má velikost báze na hodnotu absolutní energie dimeru molekuly vody?
- Jaký vliv má velikost báze na hodnotu interakční energie dimeru molekuly vody?

- **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 pomocí vibrační analýzy, že nalezená geometrie odpovídá lokálnímu minimu na PES.
- 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) Na stejné geometrii opakujte výpočet uvedený v bodě 5 pro báze: cc-pVTZ, cc-pVQZ a cc-pV5Z

# Řešení – Varianta A

## 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 Nemesis (Projekt: **Build Structure**). Geometrii modelu předoptimalizujeme pomocí molekulové mechaniky. Zvolte takové silové pole (Geometry->Optimizer Setup), které dle vašeho názoru nejlépe vystihne její geometrii.
- 2) Předoptimalizovanou geometrii modelu uložte ve formátu **xyz** pod názvem **water.xyz** do složky **00.input** (File->Export Structure as ...->OpenBabel). Dále uložte vstupní soubor pro program Gaussian (HF/cc-pVDZ, Geometry Optimization) s názvem **opt.com** do složku **01:opt** (File->Export Structure as ...->Gaussian).
- 3) V adresáři **01.opt** spusťte výpočet v programu Gaussian pomocí prostředí Infinity.



# Řešení

- 4) V adresáři **01.opt** otevřete soubor **opt.log** v programu Nemesis (Projekt: **Trajectory**, File->Import Trajectory from ...->Gaussian->Geometry Optimization File). Analyzujte průběh optimalizace a geometrii optimalizovaného modelu.
- 5) Optimalizovanou geometrii uložte jako vstupní soubor pro Gaussian (HF/cc-pVDZ, Frequencies) s názvem **freq.com** do složku **02.freq** (File->Export Structure as ...->Gaussian). V adresáři spusťte výpočet v programu Gaussian pomocí prostředí Infinity.
- 6) V adresáři **02.freq** otevřete soubor **opt.log** v programu Nemesis (Projekt: **Trajectory**, File->Import Trajectory from ...->Gaussian->Vibrations File). Jedná se o stacionární bod prvního řádu?
- 7) Pokud ano, tak optimalizovanou geometrii postupně uložte do adresářů 03.props/01.cc-pVDZ, ... Při vytváření vstupního souboru **props.com** pro Gaussian zvolte „MK Charges“ a správnou bázi. V adresářích spusťte výpočty v programu Gaussian pomocí prostředí Infinity.
- 8) Analyzujte vypočtená data a uložte je do tabulek.

# Výsledky

## Geometrie molekuly vody

doplňte použité silové pole



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

# Výsledky

## Molekula vody

Báze	E [au]	Er [kcal/mol]
cc-pVDZ		0,0
cc-pVTZ		
cc-pVQZ		
cc-pV5Z		
CBS		

výsledek výpočtu  
absolutní energie (E(RHF))

relativní energie vůči bázi cc-pVDZ

# Řešení – Varianta B

## Štábní kultura

00.input

01.opt

02.freq

03.props

01.cc-pVDZ

02.cc-pVTZ

03.cc-pVQZ

04.cc-pV5Z

Alternativní postup, upřednostňuje příkazovou řádku.



**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). Specifikujte checkpoint. 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

# 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) Na optimalizované geometrii proveďte výpočet energie pro báze: cc-pVDZ, cc-pVTZ, cc-pVQZ a cc-pV5Z.
- 6) Pro každou bázi určete interakční energii mezi molekulami vod.
- 7) Určete interakční energii extrapolovanou na CBS.

## 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.



# Výsledek

## Geometrie dimeru molekuly vody

doplňte použité silové pole



Metoda	MM	HF/cc-pVDZ	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	$E_r$	$E_i$
	[au]	[kcal/mol]	[kcal/mol]
cc-pVDZ		0,0	
cc-pVTZ			
cc-pVQZ			
cc-pV5Z			
CBS			

výsledek výpočtu

relativní energie vůči bázi cc-pVDZ

interakční energie mezi  
molekulami vody

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