

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

15. Projekt Ib

Petr Kulhánek

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 Ib



K zamyšlení

- Jaký vliv má velikost báze na vypočtené vlastnosti molekuly vody a dimeru vody?
- Jak velký vliv má BSSE na vypočtenou interakční energii dimeru vody?
- Je možné použít rozdílné báze na výpočet energie molekuly vody a dimeru vody a z nich vypočítat interakční energii?
- Jak dobře CP-korekce opravuje BSSE chybu?

- **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.

Výsledky z části Ia a Ib budou uvedeny v jednom protokolu.

Molekula vody

Úkoly

- 1) Pro molekulu vody zobrazte elektrostatický potenciál namapovaný na elektronovou hustotu. Obě veličiny budou vypočteny metodou HF/cc-pVDZ. (Postup je uveden v referenčním manuálu programu VMD v sekci Volumetrická data).
- 2) Z výpočtů HF/cc-pVDZ až HF/cc-pV5Z vyextrahujte Mullikenovy, ESP náboje a dipólový moment (pouze velikost).
- 3) Extrapolujte náboje a dipólový moment na CBS. Srovnajte vypočtený dipólový moment s experimentální hodnotou. Případný rozdíl diskutujte.

Molekula vody

Báze	Mulliken		ESP		μ
	q(H)	q(O)	q(H)	q(O)	[D]
cc-pVDZ					
cc-pVTZ					
cc-pVQZ					
cc-pV5Z					
CBS					

Dimer molekuly vody



Volitelná část projektu.

Úkoly

- 1) Za použití CP korekce vypočtete interakční energii dimeru vody metodami HF/cc-pVDZ až HF/cc-pV5Z.
- 2) Výsledky srovnejte s výpočty bez CP korekce a s hodnotou extrapolovanou na CBS. Případné rozdíly diskutujte.
- 3) Zobrazte elektrostatický potenciál namapovaný na elektronovou hustotu vypočtený metodou HF/cc-pVDZ. Srovnejte s molekulou vody.

Štábní kultura

00.input

01.opt

02.freq

03.props

01.cc-pVDZ

02.cc-pVTZ

03.cc-pVQZ

04.cc-pV5Z

04.bsse

01.cc-pVDZ

02.cc-pVTZ

03.cc-pVQZ

04.cc-pV5Z

- 1) Načtěte soubor 01.opt/opt.log (Project: **Trajectory**, File->Import Trajectory from ...->Gaussian->Geometry Optimization File).
- 2) Z optimalizované geometrie (HF/cc-pVDZ) vytvořte Build Project (Structure -> Open in Build Project).

- 3) Každou molekulu vody vložte do samostatného residua.
 - 1) Selection->Select Atoms, označte jeden atom v molekule vody
 - 2) Selection->Complete Molecules (označí zbývající atomy v molekule vody)
 - 3) Structure->Residue->New Residues From Selected Atoms
 - 4) Residuum nazvěte W1
 - 5) Postup zopakujte pro druhou molekulu vody (W2)
 - 6) Otevřete nástroj pro správu Residuí (Tools->Edit Residues)
 - 7) Na záložce „Build“ zvolte „Delete empty“
 - 8) Na záložce „Order“ zvolte „Serial index by seq and local indexes“
- 4) Vytvořte vstupní soubor pro výpočet interakční energie v programu Gaussian. File->Export Structure as->Gaussian Input. Nastavte: “Single Point Energy”, HF/cc-pVDZ, zvolte “Include fragments” a do vstupního souboru dopište „Counterpoise=2“, viz referenční manuál k programu Gaussian, strana 14. Soubor uložte pod názvem bsse.com do adresáře 04.bsse/01.cc-pVDZ
- 5) Předchozí krok opakujte pro báze cc-pVTZ až cc-pV5Z. Spusťte výpočty.
- 6) Analyzujte vypočtená data a uložte je do tabulek.

Výsledek

Dimer molekuly vody

Báze	E	E_r	E_i	E (BSSE)	E_i (BSSE)
	[au]	[kcal/mol]	[kcal/mol]	[au]	[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

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

výsledek výpočtu

interakční energie mezi
molekulami vody

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