

SEMINÁRNÍ ÚLOHA č. 2

Nekovalentní interakce - metody založené na analýze elektronové hustoty

ZADÁNÍ

1. Vytvořte model dvou aromatických platforem C_6F_6 a *para*- $C_6H_4F_2$. Molekulu orientujte do roviny xy těžištěm do počátku.

2. Zoptimalizujte oba modely (ORCA: **M062X/def2TZVPP Opt Keepdens**) a porovnejte jejich kvadrupolový moment. Ověřte vlastním výpočtem hodnotu jaderné komponenty těchto momentů. Pro C_6F_6 si připravte dvoudimenzionální grid bodů ($-5 < x/y < +5$; $z=0$ a $z=3$; vzdálenost bodů 0.25), souřadnice bodů uložte do souboru *plane.xyz*

(Nápověda: `$awk 'BEGIN{for (x=-5;x<=5;x+= 0.25){for(y=-5;y<=5; y+=0.25)printf "%5.2f %5.2f %5.2f\n", x,y,0}' > plane_0.out`)

a na těchto bodech vypočítejte elektrostatický potenciál pomocí příkazu *orca_vpot* (budete nejprve potřebovat vypočítat soubor s nábojovou hustotou pojmenovaný *.scfp - použijte *orca_plot*)

`$ orca_vpot *.gbw *.scfp plane.xyz plane_vpot.out`

Vytvořte graf mapující ESP v rovině ($z=0$) a nad rovinou aromátu ($z=3$) - přiřaďte regionům hodnoty komponent kvadrupolového momentu.

(Nápověda pro případné vykreslení interpolovaného grafu v nástroji *gnuplot*:

```
set pm3d map
set dgrid3d 30,30,10
set palette defined [-0.05 "red", 0 "white", 0.5 blue]
splot 'plane_vpot.out' u 1:2:4 with pm3d
)
```

3. V programu ADF(**M062X/TZ2P**) vypočítejte závislost ESP na bodech hlavní osy symetrie C_6F_6 (zvolte rozsah 0-5 Å). Pro tento účel budete potřebovat po SCF výpočtu v *adf-gui* spustit následující soubor:

```
$AMSBIN/densf << eor
ADFFILE ams.results/adf.rkf
OUTPUTFILE TAPE41
Grid Inline
... x y z KOORDINATY BODŮ, kde chcete spočíst ESP ...
End
Potential coul scf
eor
```

a poté zkonvertovat binární výstup TAPE41 do ascii formátu:

`$ dmpkf TAPE41 > OUT`

V programu ORCA zoptimalizujte Cl aniont vázaný nad středem C_6F_6 aromatu a získaný model anion-pi komplexu podrobte EDA-NOCV výpočtu v ADF. Porovnejte hodnotu elektrostatického potenciálu v pozici Cl⁻ s hodnotu elektrostatické komponenty interakční energie EDA. Zaznamenejte hodnoty orbitální komponenty a vyplotujte první NOCV1 kanál. Pomocí tří single-point výpočtů v programu Gaussian(**M062X/TZ2P**) vypočítejte diferenční nábojovou hustotu interakce a srovnajte ji s NOCV1. Vyhodnoťte, zda při této interakci dochází k významnému přenosu náboje mezi molekulami.

4. V programu ORCA zoptimalizujte NH_3 molekulu v následujících 4 polohách vůči C_6F_6 . Výpočtem optimalizace struktury (ORCA: **M062X/def2TZVPP Opt**) a interakční energie (Gaussian: **M062X/def2-TZVPP Counterpoise=2**) určete nejstabilnější pozici a na ní stanovte EDA komponenty. Porovnejte je s výsledky bodu 3.

