

Ćwiczenie 4A

Optymalizacja geometrii molekuł

Celem ćwiczenia jest wyznaczenie teoretycznych wartości parametrów geometrycznych dla danego układu molekularnego.

Przed przystąpieniem do zajęć wymagana jest znajomość następujących zagadnień

1. Metoda Hartree-Focka
2. Metoda DFT
3. Bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach kwantowo-chemicznych
4. Optymalizacja geometrii cząsteczki
 - 4.1. Powierzchnia energii potencjalnej układu
 - 4.1.1. Gradient molekularny, Hessian molekularny
 - 4.1.2. Procedura optymalizacji geometrii – metoda Newtona-Raphsona

Warunkiem uzyskania zaliczenia jest przeprowadzenie obliczeń i poprawne przygotowanie sprawozdania. Należy przygotować jedno sprawozdanie z ćwiczeń 4A, 4B i 4C.

1) Instrukcja wykonania ćwiczenia

- a) Zalogować się do systemu. Wejść do swojego katalogu roboczego. Utworzyć katalog do ćwiczenia 4A. Wejść do tego katalogu. Utworzyć katalog MOLECULES. Wejść do tego katalogu.
- b) U uruchomić z poziomu terminala program **pqsmol**.
- c) Zbudować przy pomocy programu pqsmol¹ modele następujących układów molekularnych:
 1. KWAS OCTOWY
 2. CYKLOBUTANON
 3. FENOL
 4. MRÓWCZAN ETYLU
 5. OCTAN METYLU
 6. TOLUEN
 7. 1,4-DIOKSAN
 8. CYKLOPROPANOL
 9. ALDEHYD AKRYLOWY
 10. BUTAN-2-ON

¹ Manual do programu PQS znajduje się w pracowni 616 oraz w formie elektronicznej (plik w formacie pdf) w katalogu /usr/local/share/PQS/DOC/, manual w formie elektronicznej (plik w formacie pdf) do programu pqsmol znajduje się w katalogu /usr/local/share/PQS/PQSMOL/.

11. PIRYDYNA
12. BUTAN-2-OL
13. GLICYNA
14. GLICERYNA

Każdy model zapisać w katalogu bieżącym stosując konwencję nazwa_czasteczki.pqb². Zamknąć program pqsmol.

d) Wyjść z katalogu MOLECULES.

Dla podanej przez prowadzącego ćwiczenia cząsteczki (jedna ze struktur zbudowanych poprzednio utworzyć katalog NAZWA_CZASTECKI. Wejść do tego katalogu. Przekopiować z katalogu MOLECULES plik (*.pqb) z analizowaną strukturą.

Otworzyć w programie pqsmol plik nazwa_czasteczki.pqb

e) Dla danej startowej geometrii cząsteczki wygenerowanej w programie pqsmol przeprowadzić obliczenia optymalizacji geometrii w następujących bazach funkcyjnych i poziomach teorii (metodach)

Nazwa pliku	Baza funkcyjna	Metoda
scf1.pqb	STO-3G	HF SCF
scf2.pqb	6-31G	HF SCF
scf3.pqb	6-311G-dp	HF SCF
dft1.pqb	STO-3G	DFT/B3LYP
dft2.pqb	6-31G	DFT/B3LYP
dft3.pqb	6-311G-dp	DFT/B3LYP

Przeanalizować strukturę pliku wejściowego (*.inp).

UWAGA! Pliki nazywać zgodnie z oznaczeniami podanymi w powyższej tabeli.

f) Przeanalizować informacje zawarte w pliku wynikowym (*.out) – zapoznać się z kryteriami zbieżności procedury optymalizacyjnej. Skorzystać z programu **pqsvi** umożliwiającego wizualizację danych zawartych w pliku wynikowym (typu output). Przeanalizować charakter zmian energii układu w trakcie optymalizacji geometrii cząsteczki.

g) Zapisać plik obrazujący charakter zmian energii układu w trakcie optymalizacji geometrii cząsteczki dla jednego z przeprowadzonych obliczeń optymalizacji geometrii (wykres zmiany energii układu w funkcji nr cyklu optymalizacji) w swoim katalogu roboczym.

² UWAGA! Nazwy plików nie powinny zawierać spacji i polskich znaków.

- h) Korzystając z plików wynikowych (*.out) utworzyć tabelę (TAB1) zawierającą
1. wartości energii dla zoptymalizowanej geometrii układu (w jednostkach atomowych) dla poszczególnych procesów,
 2. nazwę stosowanej metody i nazwę bazy funkcyjnej
 3. liczbę cykli optymalizacyjnych (wg schematu)

Lp.	Metoda	Baza funkcyjna	Energia układu [j.at]	Liczba cykli optymalizacji

- i) Korzystając z *Hanbook of Chemistry and Physics* (D. R. Lide ed.)³ lub/i internetowych baz danych porównać dane eksperymentalne z wynikami obliczeń. Dla wyznaczonych parametrów geometrycznych na poziomie DFT wyznaczyć błędy bezwzględne długości wiązań, kątów walencyjnych i kątów torsyjnych (dwuściennych). Wyniki zestawić w tabelach:
- a. TAB. 2A – dla DFT/STO-3G;
 - b. TAB. 2B – dla DFT/6-31G;
 - c. TAB. 2C – dla DFT/6-311G-dp.

wraz z podaniem źródła danych doświadczalnych (wg schematu)

	Parametr 1	Parametr 2	Parametr 3
Nazwa metody/baza np. DFT/STO-3G			
Wartość eksperymentalna			
Błąd bezwzględny			
Źródło danych eksperymentalnych:			

2) Opracowanie wyników obliczeń – część 4A

Warunkiem uzyskania zaliczenia z wykonanego ćwiczenia jest poprawne przygotowanie opracowania. Opracowanie (**część 4A**) powinno zawierać:

- datę i nr ćwiczenia, nazwisko studenta, kierunek studiów, symbol grupy;
- nazwę systematyczną i wzór strukturalny (model cząsteczki) rozpatrywanego układu;
- wyjaśnienie pojęć optymalizacja geometrii układu, powierzchnia energii potencjalnej (PES), gradient molekularny, hessian molekularny, minimalna baza funkcyjna, baza typu split-valence, baza typu double zeta;
- informację o kryteriach zbieżności procedury optymalizacyjnej w stosowanych obliczeniach;
- wykres obrazujący zmianę energii układu w funkcji numeru cyklu optymalizacyjnego dla dowolnego procesu optymalizacyjnego (można skorzystać z pliku *.log);

³ Tytuł dostępny w bibliotece Wydziału Chemii UMCS.

- poprawnie wypełnione tabele TAB. 1 i TAB. 2A, TAB. 2B oraz TAB. 2C wraz z komentarzem dotyczącym dokładności obliczeń;
- wnioski – jak zależy dokładność i czas obliczeń od wartości użytej bazy funkcyjnej.

Literatura

1. L. Piela *Idee chemii kwantowej*, PWN 2005
2. R.F. Nalewajski *Podstawy i metody chemii kwantowej: wykłady*. Warszawa: Wydawnictwo Naukowe PWN, 2001
3. F. Jensen *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons Ltd, 2006
4. Steven M. Bachrach *COMPUTATIONAL ORGANIC CHEMISTRY*, John Wiley & Sons, Inc., 2007
5. A. Książek *Wpływ efektu indukcyjnego elektroujemnych podstawników na ekranowanie protonów w szeregu homologicznym halogenopochodnych alkanów* – praca magisterska, str. 20 -27, Zakład Chemii Teoretycznej UMCS, 2004 (załącznik do instrukcji)