

ЛЕКЦІЯ 9

ГРАФІЧНА ПОБУДОВА ХІМІЧНИХ СТРУКТУР ЗА ДОПОМОГОЮ ВІЗУАЛІЗАТОРА GaussView

Програма *GaussView* створена спеціально для роботи з програмою квантово-хімічних розрахунків Gaussian і є його графічним редактором, що суттєво полегшує формування стартової структури та вхідного файлу для програми Gaussian і здійснює перегляд проміжних та кінцевих результатів розрахунку. GaussView є набором підпрограм, що застосовуються в поєднанні з основною програмою. Вона дозволяє отримати графічне зображення молекулярних структур, здійснює візуалізацію обертання молекули, полегшує формування вхідних файлів; за її допомогою можна здійснювати запуск програми на розв'язання.

9.1 Інтерфейс програми GaussView

Розглянемо основи роботи в програмі GaussView (для версії GaussView5.0). Після запуску програми в середовищі ОС Windows на екрані монітора з'являються головне вікно програми з контрольною панеллю (рис.9.1) та активне (робоче) вікно (рис.9.2), яке є екраном для поточного фрагменту. Робочий стіл програми GaussView включає кілька вікон, на додаток до яких в ході роботи з'являються інші діалоги.

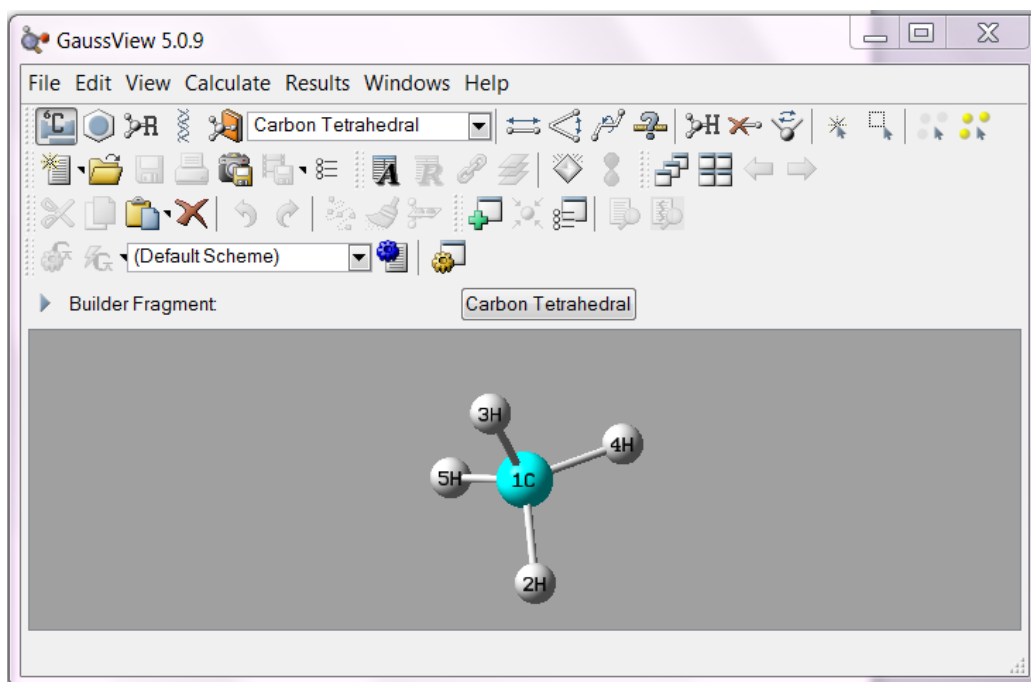


Рисунок 9.1 – Головне вікно програми GaussView

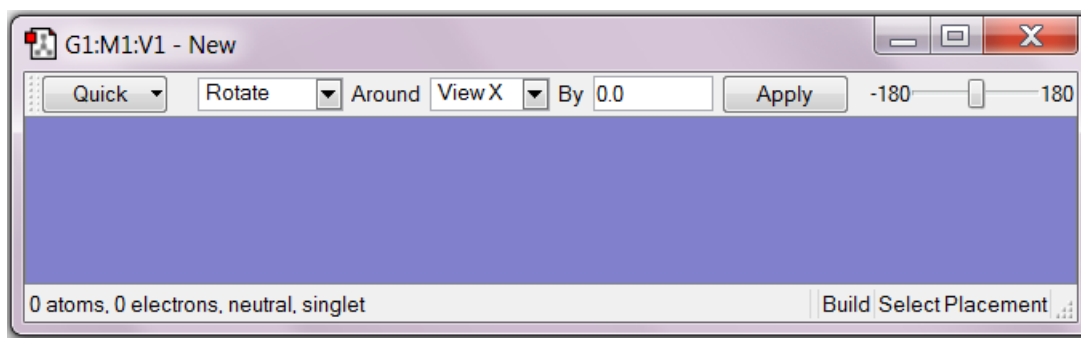


Рисунок 9.2 – Активне (робоче) вікно GaussView

Для розрахунку структури і властивостей молекулярної системи спочатку необхідно побудувати її графічне зображення в активному вікні.

Побудова фрагментів досліджуваної структури може бути виконано за допомогою вбудованих в програму баз даних. Для побудови фрагментів є бібліотека елементів і фрагментів. Фрагмент бази даних спочатку з'являється на контрольній панелі. Для того, щоб фрагмент, створений на контрольній панелі, з'явився в активному вікні, потрібно натиснути лівою кнопкою миші по тій частині активного вікна, куди потрібно вставити цей фрагмент.

У верхній частині контрольної панелі головного вікна GaussView розташована зона головного меню, під якою розміщені кнопки меню інструментів (рис.9.1). Головне меню складається з пунктів File, Edit, View, Calculate, Results, Windows та Help.

File призначений для роботи з файлами. В цьому пункті є команди створення нового робочого вікна, відкриття вже існуючого на диску робочого файлу, збереження файлу тощо.

View дозволяє керувати кількістю відображених елементів робочого вікна програми, зокрема, Hydrogens – показувати атоми гідрогену, Dummies – показувати фіктивний атом, Bonds – показувати зв'язки між валентно зв'язаними атомами.

Для перегляду елементів та порядкових номерів атомів необхідно позначити галочками пункти Symbols та Labels, відповідно.

Results дозволяє візуалізувати параметри, отримані в результаті розрахунку. В цьому пункті є такі команди, як Vibrations (візуалізація частот коливань), Scan (візуалізація кривої залежності повної електронної енергії від зміни одного або кількох геометричних параметрів), IRC/Path (візуалізація спусків по координаті реакції),









Optimization (візуалізація графіка зміни енергії в процесі оптимізації структури молекули) та ін.

Help – виклик довідки з більшості питань роботи з програмою.

Призначення кнопок зони меню контрольної панелі наведене у табл.9.1.

Таблиця 9.1

Основні кнопки меню інструментів GaussView

Кнопка	Призначення
	– відкриття нового активного вікна
	– відкриття бази даних елементів
	– відкриття бази даних циклічних фрагментів
	– відкриття бази даних функціональних груп і фрагментів
	– відкриття бази даних біологічних фрагментів
	– видалення структури в активному вікні
	– модифікація (зміна довжини) зв'язку
	– зміна валентного кута
	– зміна двогранного кута
	– виведення в лівий нижній кут активного вікна довжин зв'язків, валентних і двогранних кутів виділених атомів
	– гідрування обраного атома
	– видалення атом
	– показати молекулярні орбіталі
	– розрив зв'язків, довжини яких перевищують стандартні довжини зв'язків
	– підчищення побудованої структури відповідно до наявних в базі даних довжин зв'язків і кутів
	– симетризація молекули згідно з точковою групою симетрії
	– центрування молекули в активному вікні
	– додавання нового вікна з молекулою, побудованою в активному вікні
	– виведення діалогових вікон, що регулюють формат побудованої структури

Для переміщення молекул в активному вікні використовують наступні поєднання клавіш. За допомогою лівої кнопки миші здійснюється обертання фрагмента в поточному вікні. Shift + ліва кнопка миші – переміщення молекули в площині екрану. Права кнопка миші або Ctrl + ліва кнопка миші – переміщення молекули перпендикулярно площині екрану. Якщо в активному вікні є два незв'язаних фрагменти, ними можна маніпулювати як окремими фрагментами і як цілої структурою. За необхідності маніпулювання цілою структурою використовується описане вище застосування миші. Для маніпуляції окремим фрагментом додатково використовується клавіша Alt. Встановлюємо курсор на фрагмент, яким ми хочемо маніпулювати: Alt + ліва кнопка миші – обертання фрагмента, Alt+Shift + ліва кнопка миші – переміщення фрагмента в площині екрану.

9.2 Створення молекули в GaussView

Створити молекулу в програмі GaussView можна двома способами:

- 1) послідовним додаванням атомів;
- 2) послідовним додаванням циклічних та радикальних фрагментів.

Другий спосіб є кращим, з технічної точки зору. Це пояснюється тим, що циклічні та радикальні елементи, закладені у базу даних GaussView, мають геометричну структуру, близьку до оптимальної, що суттєво скорочує час проведення розрахунку оптимізації геометричних параметрів молекули. Особливо це стає помітним зі збільшенням розміру досліджуваної молекулярної системи. Розглянемо використання наведених вище способів створення молекул на прикладах.

Приклад 9.1. Побудувати молекулу нітроетану методом послідовного додавання атомів. Основні етапи:

1. Відкрити програму GaussView.
2. В меню інструментів головного вікна програми натиснути кнопку Element Fragment (табл.9.1, рис.9.1). У з'явившомуся відповідному вікні Element Fragments обрати атом карбона в sp^3 -гібридизації (рис.9.3).
3. Натиснути на будь-яку точку робочого вікна програми, в результаті чого в ньому повинна з'явитися молекула метана (рис.9.4).

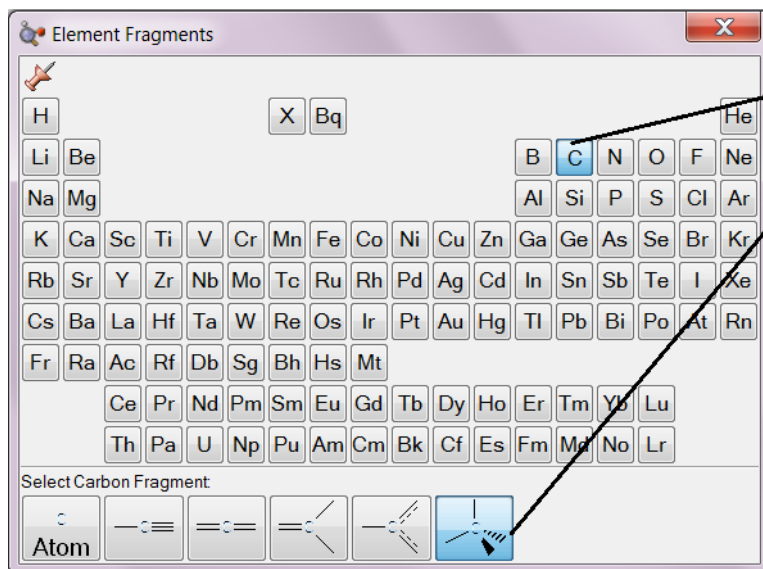


Рисунок 9.3 – Вибір фрагменту атома карбона

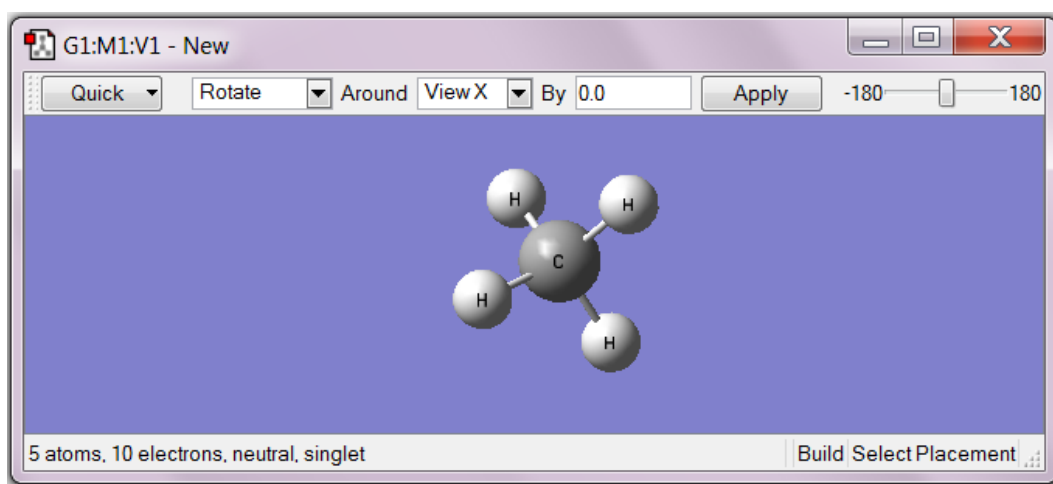


Рисунок 9.4 – Молекула метана

4. Для побудови молекули етана необхідно в робочому вікні натиснути лівою кнопкою миші на один з атомів гідрогена молекули метана (рис.9.5).

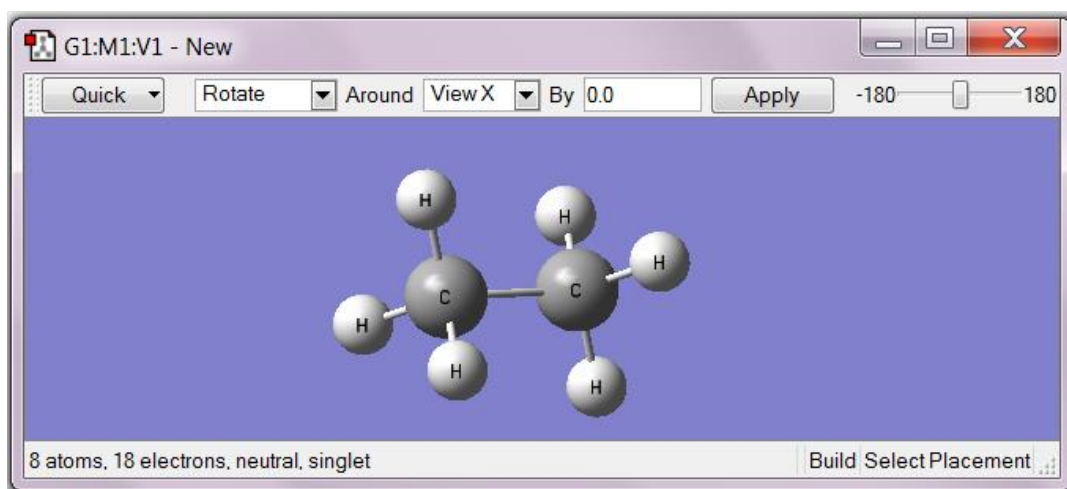


Рисунок 9.5 – Молекула етана

5. Аналогічно п.2 у вікні Element Fragments обираємо атом нітрогена з валентістю III (рис.9.6) та натисканням лівої кнопки миші замінюємо один з атомів гідрогена молекули етана на атом нітрогена. Результатом виконання пп.1–5 є молекула етиламіна (рис.9.7).

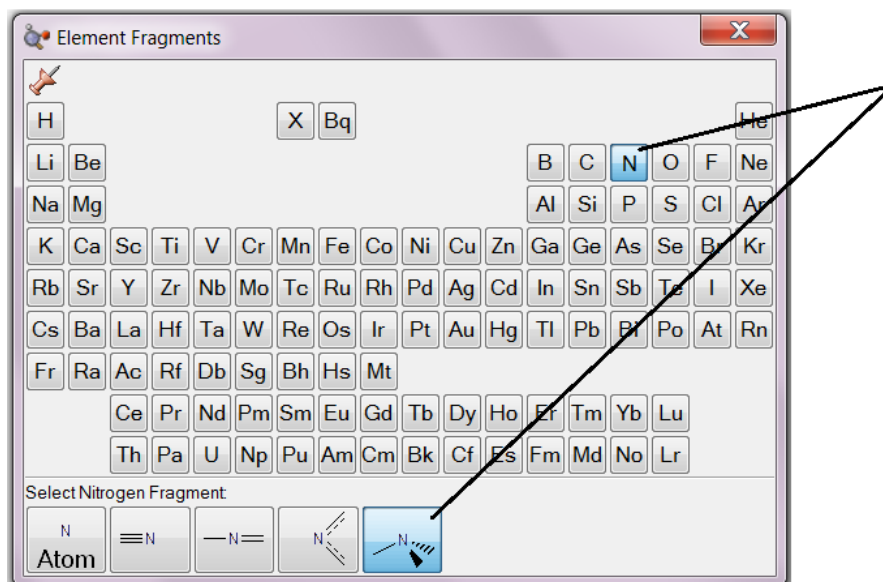


Рисунок 9.6 – Вибір фрагменту атома нітрогена

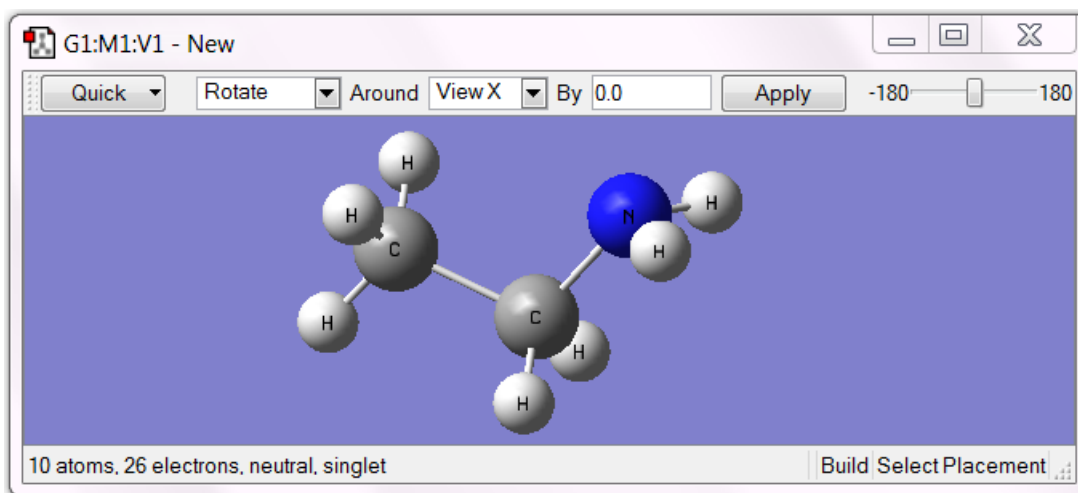


Рисунок 9.7 – Молекула етиламіна

6. У вікні Element Fragments обираємо атом оксигена (Atom) та натисканням лівої кнопки миші послідовно замінюємо атоми гідрогена аміногрупи на атоми оксигена (рис.9.8). В результаті вказаних дій будувється молекула нітроетана (рис.9.9).

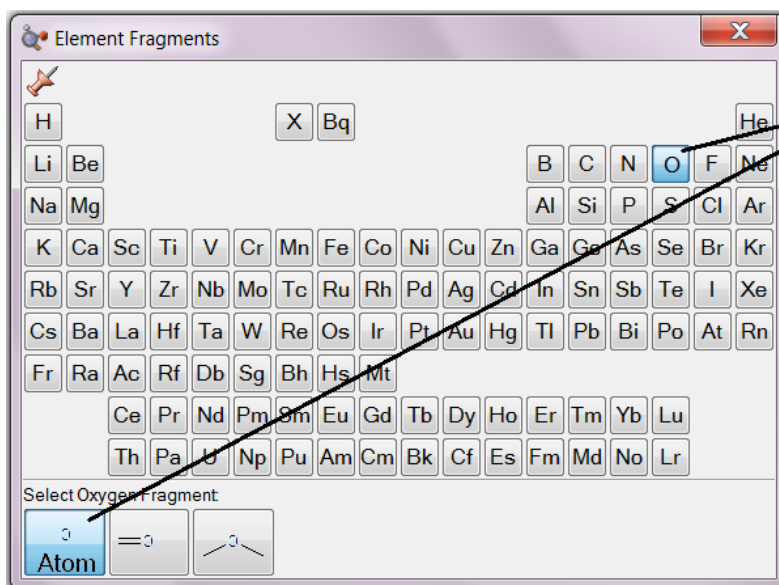


Рисунок 9.8 – Вибір атома оксигена

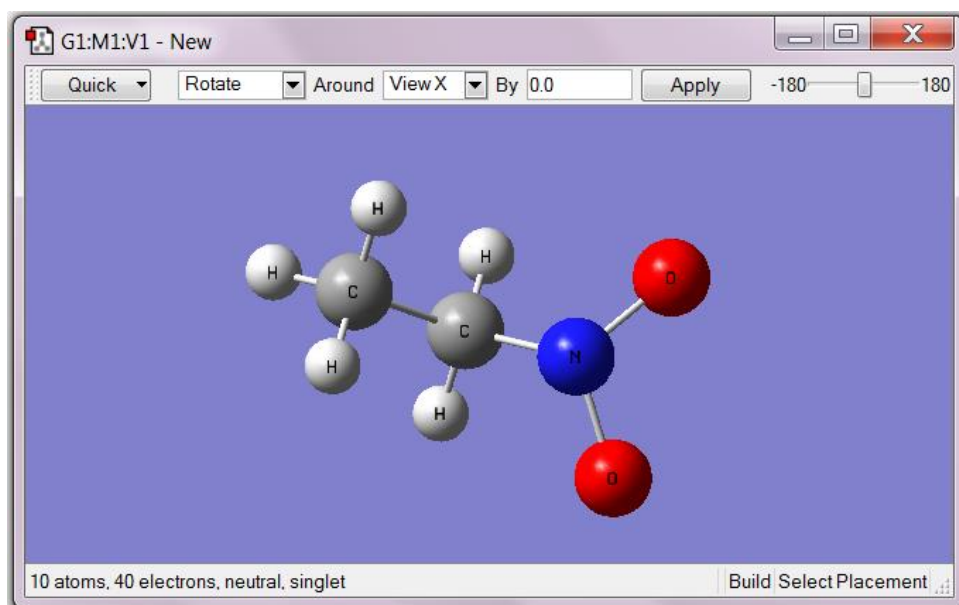


Рисунок 9.9 – Молекула ніроетана

Приклад 9.2. Побудувати молекулу 2-метил-1,3,5-тринітробензола методом послідовного додавання циклічних та радикальних фрагментів. Основні етапи:

1–3. Перші три етапи співпадають з першими трьома етапами прикладу 9.1.

4. Натиснути двічі кнопку Ring Fragment в меню інструментів головного вікна GaussView (табл.9.1, рис.9.1). У відповідному вікні Ring Fragments обираємо циклічний фрагмент, що відповідає молекулі бензола (рис.9.10), та натисканням лівої кнопки миші замінюємо в робочому вікні програми один з атомів гідрогена молекули метана (рис.9.11) на бензол. В результаті отримуємо молекулу метилбензола.

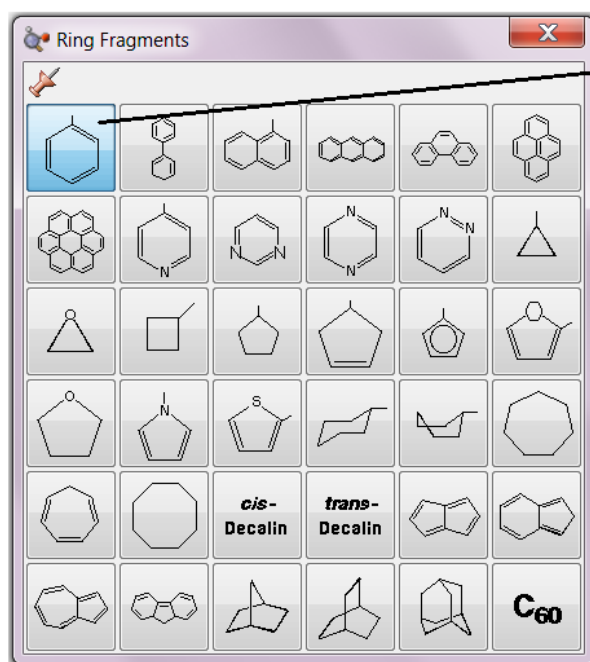


Рисунок 9.10 – Вибір молекули бензола

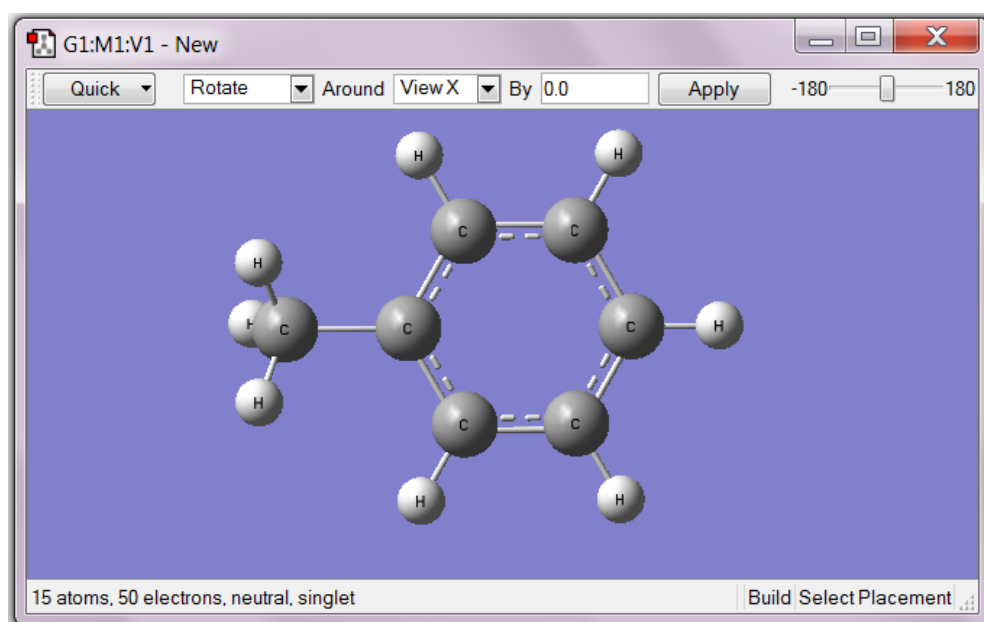


Рисунок 9.11 – Молекула метилбензола

5. Натискаємо двічі кнопку R-Group Fragment в меню інструментів головного вікна GaussView (табл.9.1, рис.9.1) та обираємо радикальний фрагмент, що відповідає нітрогрупі (рис.9.12).

6. Натисканням лівої кнопки миші послідовно замінюємо атоми гідрогена у трьох відповідних положеннях на нітрогрупи (рис.9.13).

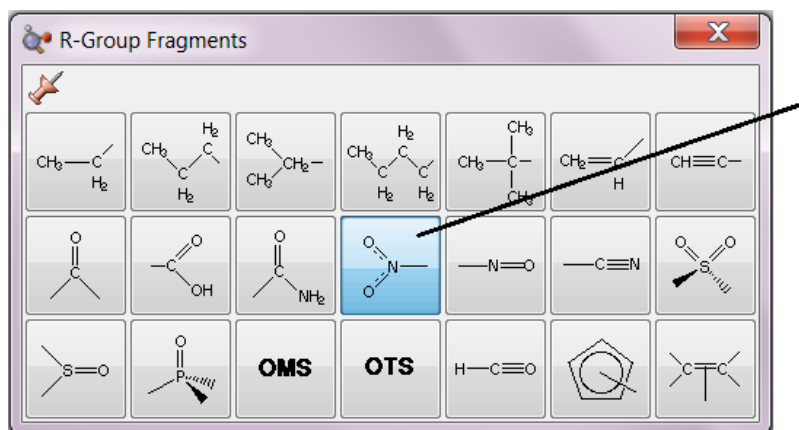


Рисунок 9.12 – Вибір радикального фрагменту NO₂

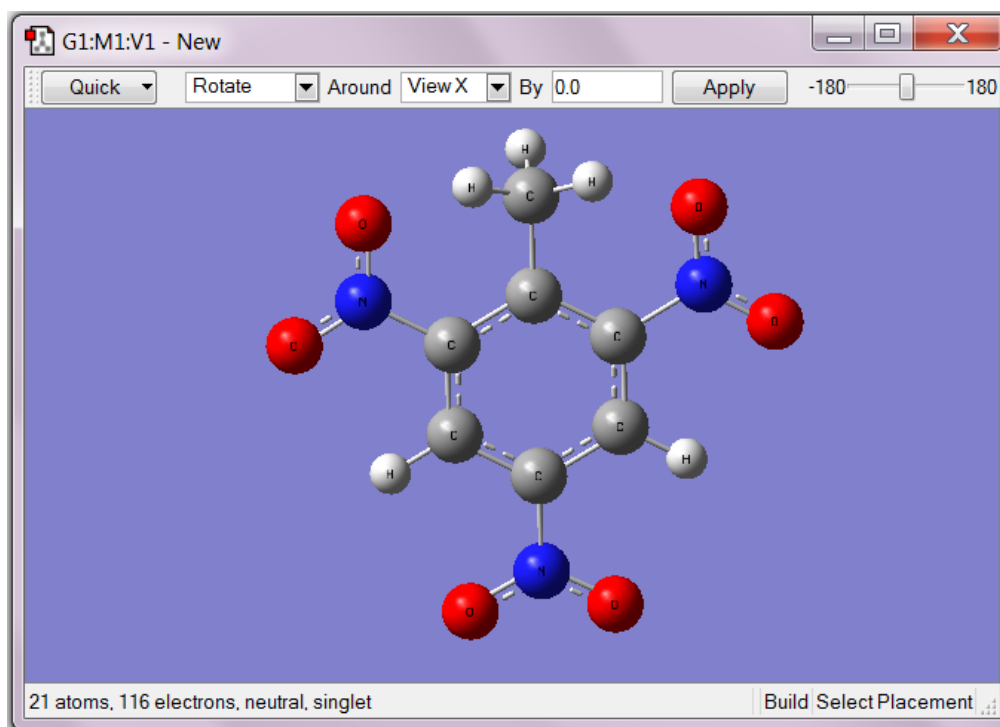


Рисунок 9.13 – Молекула 2-метил-1,3,5-тринітробензола

9.3 Визначення геометричних параметрів молекул

Для опису геометричної структури молекули необхідно знати три основні геометричні параметри:

- 1) довжину зв'язку;
- 2) валентний кут – кут, утворений двома напрямками хімічних зв'язків, що виходять з одного атома;
- 3) двогранний кут – кут, утворений двома напівплощинами, що виходять з однієї прямої, а також частина простору, обмежена цими напівплощинами (рис.9.14).

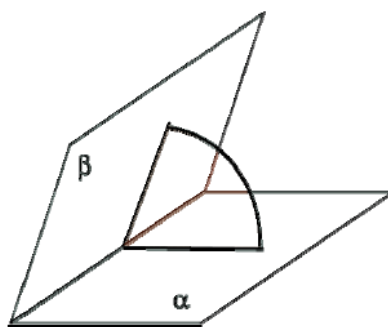


Рисунок 9.14 – Двогранний кут

Приклад 9.3. У програмі GaussView побудувати молекулу 1,2-дихлоретана. Визначити: довжину зв'язку C-C, валентний кут Cl-C-C та двогранний кут Cl-C-C-Cl.

Основні етапи:

1. Побудувати молекулу 1,2-дихлоретана (аналогічно прикладу 9.1).
2. Для визначення довжини зв'язку C-C необхідно в меню інструментів головного вікна GaussView натиснути кнопку Modify Bond (табл.9.1, рис.9.1), після чого в робочому вікні програми натисканням лівої кнопки миші виділити послідовно два атоми карбона (рис.9.15).

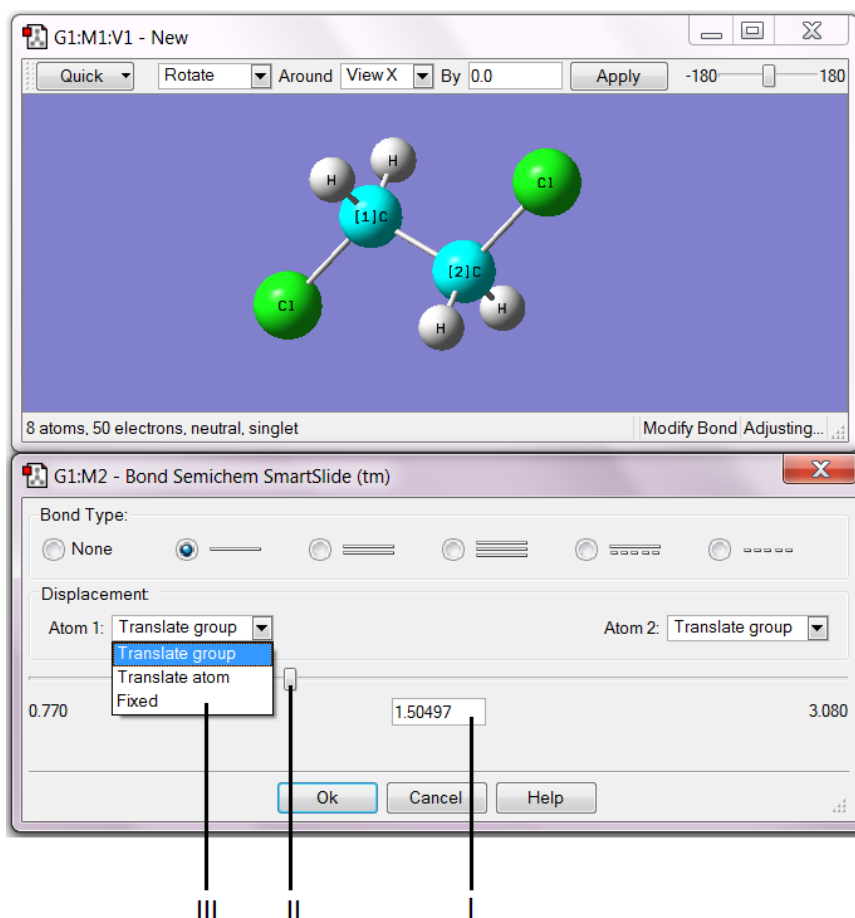


Рисунок 9.15 – Вимірювання та зміна значення довжини зв'язку C-C

Числа в квадратних скобках поруч із символами елементів у робочому вікні позначають порядок виділення атомів. Значення довжини зв'язку наводиться у вікні Bond Semichem SmartSlide. Змінити довжину зв'язку можна безпосереднім введенням потрібного значення у поле вводу I або пересуванням бігунка II.

Для зручності роботи при зміні довжин зв'язку необхідно зафіксувати один з атомів заміною Translate group у вікні III на Fixed.

3. Для визначення величини валентного кута Cl-C-C необхідно в меню інструментів головного вікна GaussView натиснути кнопку Modify Angle (табл.9.1, рис.9.1), після чого послідовно в робочому вікні натисканням лівої кнопки миші виділити атоми Cl→C→C (рис.9.16).

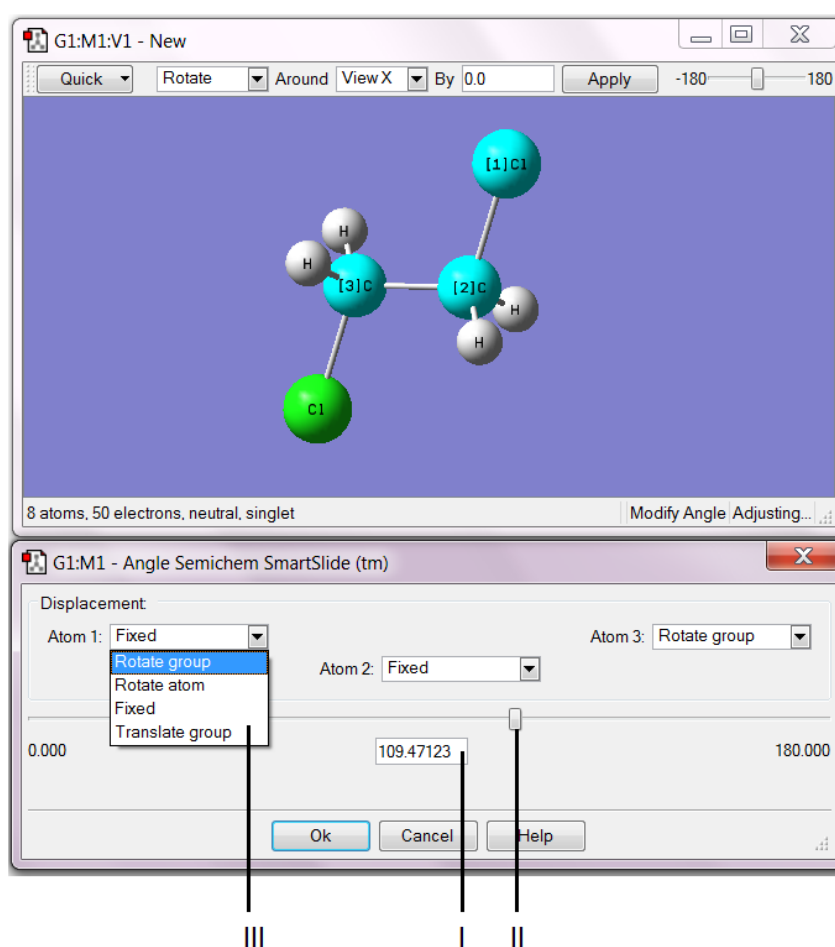


Рисунок 9.16 – Вимірювання та зміна значення валентного кута Cl-C-C

При послідовному виділенні трьох атомів другий атом є вершиною кута.

Змінювати значення кута, як і у випадку довжини зв'язку, можна шляхом введення потрібного значення у поле вводу I або змінюючи положення бігунка II. Як і при зміні

довжини зв'язку, для зручності слід зафіксувати положення першого атому заміною Rotate group у вікні III на Fixed.

4. Для визначення величини двогранного кута Cl-C-C-Cl необхідно в меню інструментів головного вікна програми натиснути кнопку Modify Dihedral (табл.9.1, рис.9.1), після чого послідовно в робочому вікні натисканням лівої кнопки миші виділити атоми Cl→C→C→Cl (рис.9.17). В даному випадку зміна двогранного кута відповідатиме обертанню однієї хлорметильної групи відносно іншої навколо зв'язку C-C. Зміна значення двогранного кута виконується аналогічно зміні довжини зв'язку та валентності кута, розглянутих у пп.2 та 3.

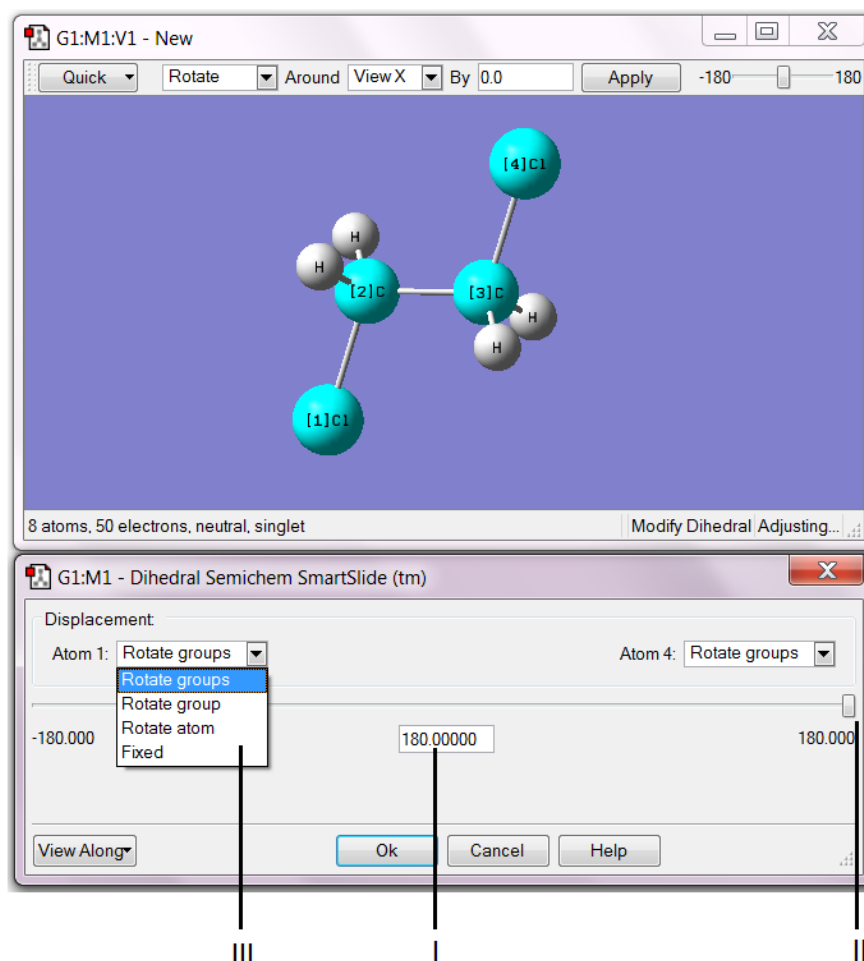


Рисунок 9.17 – Вимірювання та зміна значення двогранного кута Cl-C-C-Cl

Контрольні питання

1. Призначення програми GaussView.
2. Інтерфейс програми та меню інструментів.
3. Способи створення молекул в GaussView.
4. Визначення геометричних параметрів молекул в GaussView.