

## Sommario

|   |   |
|---|---|
| GAUSSIAN09.....                                   | 1 |
| COSTRUIRE UNA MOLECOLA CON Z-MATRIX.....          | 2 |
| CALCOLARE LA CARICA DEGLI ATOMI.....              | 3 |
| CALCOLARE L'ENERGIA DI BENDING DELL'ACQUA.....    | 4 |
| RICAVARE LA Z-MATRIX O XYZ TRAMITE OPENBABEL..... | 7 |

## GAUSSIAN09

Gaussian09 è un programma di chimica computazionale che può essere usato per calcolare varie caratteristiche di una molecola

1. Energia molecolare;
2. Struttura
3. Frequenza vibrazionale
4. Densità elettronica...

Per verificare se le molecole elaborate da Gaussian09 sono corrette si può utilizzare il programma open-source Multiwfn (un programma realizzato per l'analisi delle funzioni d'onda) che permette di visualizzare le molecole in formato wfx/wfn (si possono creare con gaussian09).

Esistono vari algoritmi che permettono di eseguire calcoli sulle le molecole:

**STO-3G**

**6-21G**

**6-31G**

**6-311G**

**6-311G(d,p)**

**MP4(SDQ)**

**MP4(SDTQ)**

**Ed altri...**

Le molecole possono essere ottimizzate in diversi modi:

**opt** o **opt=Redundant** ottimizza la geometria con coordinate interne scelte automaticamente.

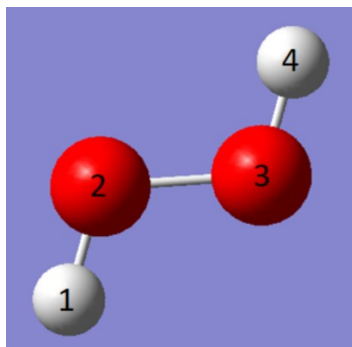
**opt=Cartesian** ottimizza la geometria con le coordinate Cartesiane.

**opt=Z-Matrix** ottimizza la geometria con le coordinate interne come previsto nel file di input.

Z-matrix è un linguaggio che viene usato per fornire le coordinate degli atomi che costituiscono la molecola (indicando quali atomi sono coinvolti nel legame, quale angolo formano e l'angolo diedro), ci permette di costruire il modello della molecola.

## COSTRUIRE UNA MOLECOLA CON Z-MATRIX

Per costruire le molecole con Gaussian09 si può usare la Z-Matrix.



Costruzione della Z-Matrix del perossido di idrogeno  $\text{H}_2\text{O}_2$ :

```
H
O 1 R1
O 2 R2 1 A
H 3 R1 2 A 1 D
  Variables:
R1 0.9
R2 1.4
A 105.0
D 120.0
```

1. La prima variabile specifica il tipo di atomo.
2. La seconda variabile specifica con quale atomo viene formato il legame (es: O2 con H1).
3. La terza variabile R rappresenta la lunghezza di legame (R1, lunghezza del legame tra O2 e H1).
4. La quarta variabile A rappresenta l'angolo formato da due atomi (A, angolo tra O3 e H1).
5. La quinta variabile D rappresenta il diedro tra due atomi (D, diedro tra H4 e H1).

Oppure al posto delle variabili si possono inserire direttamente i numeri:

```
H
O 1 0.9
O 2 1.4 1 105.0
H 3 0.9 2 105.0 1 120.0
```

Si può congelare una variabile con **F** per fare in modo che non venga ottimizzata.

d= 180.0 F

## CALCOLARE LA CARICA DEGLI ATOMI DI UNA MOLECOLA

La carica degli atomi può essere calcolata con il comando **pop=nbo**.

Di seguito sono state calcolate le cariche degli atomi del perossido di idrogeno.

```
%NProcShared=4
# hf/6-31g opt pop=nbo out=wfn

hf/6-31g optimization of Hydrogen peroxide; H2O2; Oxydol

0 1
0
0 1 r2
H 1 r3 2 a3
H 2 r4 1 a4 3 d4
Variables:
r2= 1.4533
r3= 0.9762
a3= 96.57
r4= 0.9762
a4= 96.57
d4= 180.00

H2O2.wfn
```

Di seguito sono riportati i risultati:

Mulliken charges:

```
      1
  1  O  -0.449407
  2  O  -0.449407
  3  H   0.449407
  4  H   0.449407
Sum of Mulliken charges =  0.00000
```

## CALCOLO DELL'ENERGIA

L'energia di bending può essere calcolata attraverso la parola chiave **scan** (scansione rigida), impostando il numero degli step (si fa variare l'angolo piano).

```
%NProcShared=4
# mp2/6-311g(d,p) scan out=wfn

H2O

0 1
O1
H2 1 1.0
H3 2 1.0 1 a
Variables:
a= 104.5 s 5 30.0

H2O.wfn
```

Se si esegue il comando **opt=z-matrix** viene ottimizzata tutta la struttura (le variabili devono essere specificate una ad una, la struttura deve essere flessibile).

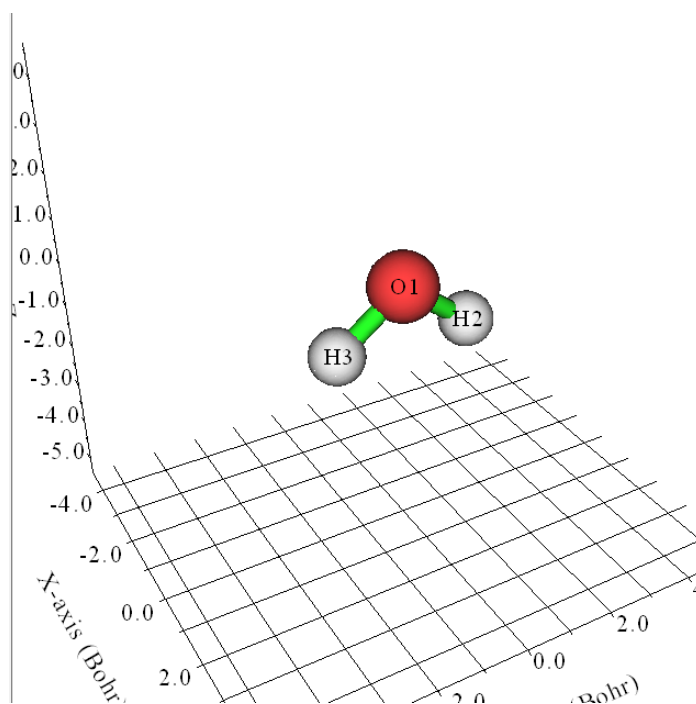
Conversione valori energia:

1 Hartree = 627.15 kcal/mol

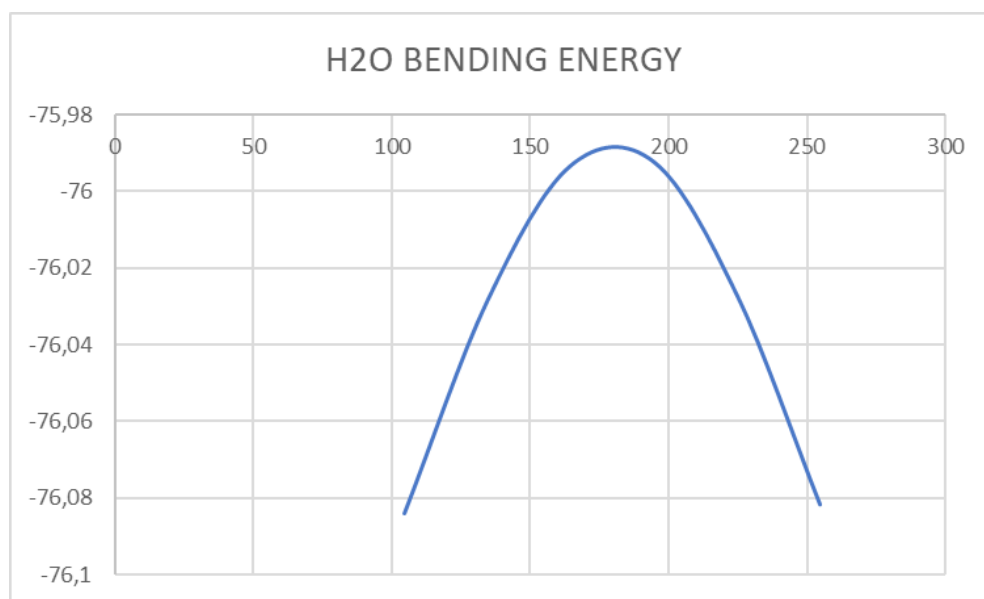
1 Hartree = 2625.5 kJ/mol

1 Hartree = 27.2116 eV

1 Hartree =  $4.3597482 \times 10^{-18}$  J/particle



Si può costruire un grafico dell'energia tra le due configurazioni della molecola.



|       |          |
|-------|----------|
| 104,5 | -76,0841 |
| 134,5 | -76,0284 |
| 164,5 | -75,9932 |
| 194,5 | -75,9922 |
| 224,5 | -76,027  |
| 254,5 | -76,0817 |

Di seguito è riportato grafico dell'energia per passare dalla configurazione eclissata alla configurazione sfalsata del perossido di idrogeno (5 step da 36) variando il diedro.

```
%NProcShared=4
# mp2(SDTQ) opt=z-matrix output=wfn
```

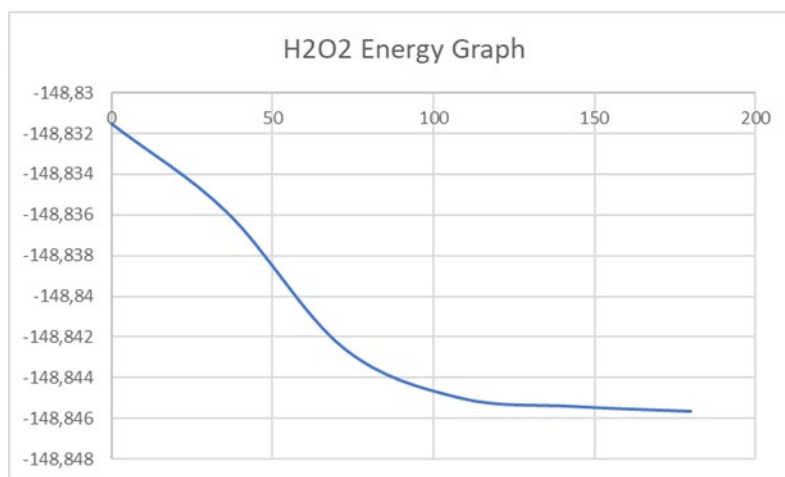
HydrogenPeroxide

```
0 1
X1
O2 1 r1
O3 2 r2 1 a2
H4 2 r3 3 a3 1 d1
H5 3 r4 2 a4 4 ds
```

Variables:

```
r1= 1.0
r2= 1.4
r3= 1.0
r4= 1.0
a2= 96.5
a3= 96.5
a4= 96.5
d1= 0.0
ds= 0.0 s 5 36.0
```

HydrogenPeroxide.wfn

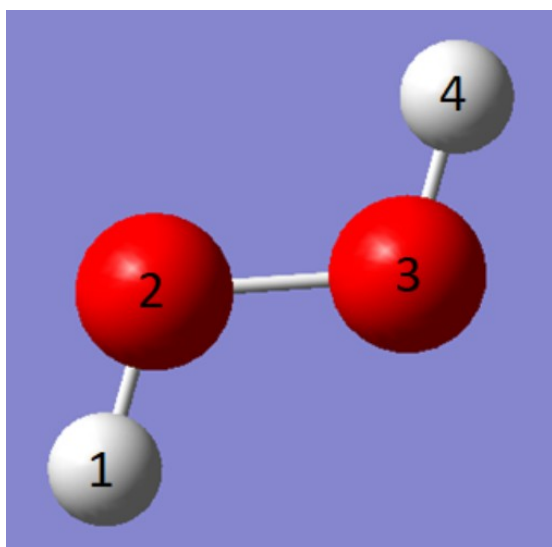


|     |          |
|-----|----------|
| 0   | -148,832 |
| 36  | -148,836 |
| 72  | -148,843 |
| 108 | -148,845 |
| 144 | -148,845 |
| 180 | -148,846 |

## RICAVARE LA Z-MATRIX O XYZ TRAMITE OPENBABEL

Utilizzando il programma open-source OpenBabel si possono convertire vari formati di file di chimica computazionale, infatti i file mol (scaricabili da diversi database scientifici), possono essere aperti con diversi programmi di chimica computazionale come Jmol oppure GaussView.

Di seguito è riportato il file mol del perossido di idrogeno scaricato da KEGG:



Dal file mol può essere ricavata la Z-Matrix utilizzando OpenBabel (oppure può essere usato come aiuto), selezionando come input il file mol e come output il file gzmat (Gaussian Z-Matrix Input) specificando la voce 'Add Hydrogen', 'Canonicalize the atom order' 'Generate 3D coordinates'.

```
0 1
H
O 1 r2
O 2 r3 1 a3
H 3 r4 2 a4 1 d4
Variables:
r2= 0.9941
r3= 1.2348
a3= 112.38
r4= 0.9941
a4= 112.59
d4= 180.00
```

Oppure possiamo ricavare le coordinate xyz:

|   |         |         |         |
|---|---------|---------|---------|
| H | 0.99060 | 0.00597 | 0.12828 |
| O | 1.98184 | 0.00245 | 0.05255 |
| O | 2.53773 | 0.05369 | 1.15398 |
| H | 3.52920 | 0.05034 | 1.08187 |



Di seguito è riportata la Z-Matrix del perossido di idrogeno:

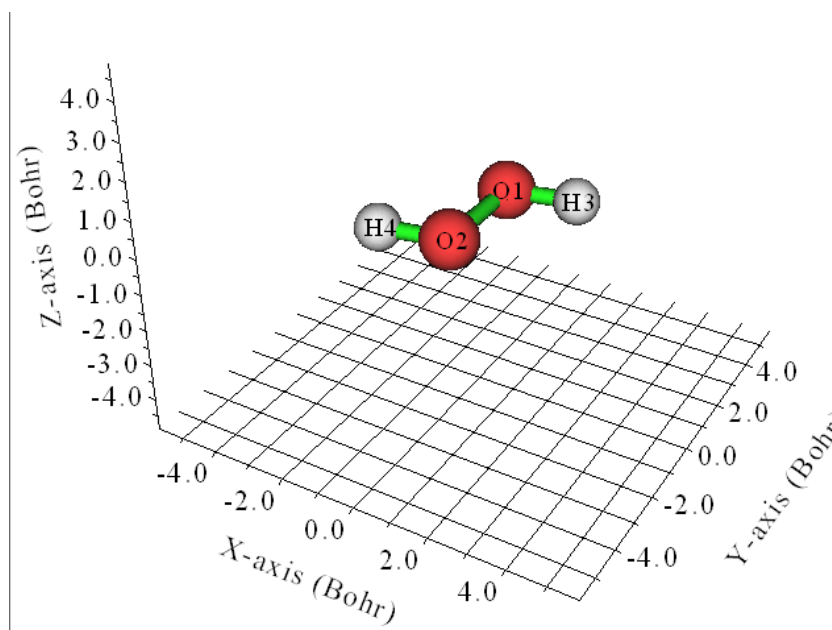
```
%NProcShared=4
# hf/6-31g opt pop=nbo out=wfn

hf/6-31g optimization of Hydrogen peroxide; H2O2; Oxydol

0 1
0
0 1 r2
H 1 r3 2 a3
H 2 r4 1 a4 3 d4
Variables:
r2= 1.4533
r3= 0.9762
a3= 96.57
r4= 0.9762
a4= 96.57
d4= 180.00

H2O2.wfn
```

Si può controllare se il file H2O2.wfn è corretto con il programma Multiwfn:



### INPUT

```

1  OO
2  JME 2017-02-08 Sat Dec 21 17:03:25 GMT+100 2019
3
4  2  1  0  0  0  0  0  0  0999 V2000
5  0.0000  0.7000  0.0000 O  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
6  1.2124  0.0000  0.0000 O  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
7  1  2  1  0  0  0  0
8  M END
9

```

### Options

Input format  
smi -- SMILES format

Output format\*  
gzmat -- Gaussian Z-Matrix Input

Generate coordinates None ▾  
Allows to generate 2D or 3D coordinates

Add / Delete hydrogens Add ▾

pH to add hydrogens   
Specify a pH at which the molecule should be protonated

**Convert**

### OUTPUT

```

1  #Put Keywords Here, check Charge and Multiplicity.
2
3
4
5  0 1
6  O
7  O 1 r2
8  H 2 r3 1 a3
9  H 2 r4 1 a4 3 d4
10 Variables:
11 r2= 0.0000
12 r3= 0.0000
13 a3= -nan
14 r4= 0.0000
15 a4= -nan
16 d4= 180.00
17
18

```

### Draw a molecule and generate the molfile

Use [open babel](#) to convert most of the chemical formats.

**How to proceed ?**

1. Enter an input value, for example a SMILES like "CCCC"
2. Select the "Input format", for example "smi"
3. Select an output format, for example "mol"
4. Click on "Convert"

### Log

```

1 molecule converted
32 audit log messages

```