

# 苏州大学实验报告

院系：材料与化学化工学部 年级专业：2022 级化学 姓名：何昱锐 学号：2209401051  
课程名称：物理化学实验（上） 成绩：  
指导教师：陆澄容 同组实验人：无 实验日期：2024 年 12 月 10 日

## 实验名称：邻甲基苯甲醛红外光谱的密度泛函理论计算

### 一、实验目的：

- 1、熟悉使用 Gaussian 程序进行简单密度泛函理论计算，熟悉 GaussView 量化处理软件、Editplus 编辑软件以及 Origin 作图软件；
- 2、掌握分子结构优化、热力学数据和红外光谱的理论计算方法；
- 3、熟悉 Gaussian 程序计算结果的简单分析。

### 二、实验原理：

量子化学密度泛函理论计算中使用最多的方法是 B3LYP 方法。分子轨道（MO）常采用原子轨道（AO）基函数的线性组合（LCAO-MO），原子轨道基函数的集合称为基组，常用的基组有：STO-3G、3-21G、6-31G、6-31G\*、6-311++G\*\*等，本实验采用的基组是 6-31G\*。

Gaussian 程序可以用来研究分子和化学反应的很多性质，包括：分子的能量、结构优化、振动频率分析、红外和拉曼光谱、热力学性质、分子轨道、电荷分布、反应路径等。Gaussian 程序除了计算振动频率的强度之外，还同时给出零点振动能（Zero-point vibration energy）、焓、吉布斯自由能和熵等热力学参数。基态分子不能有虚频，过渡态分子有且只有一个虚频。

### 三、实验仪器和软件：

软件：GaussView 软件，Editplus 软件，Origin 软件，Gaussian 量子化学计算软件

仪器：微机一台

### 四、实验步骤：

#### 1、邻甲基苯甲醛分子初始结构的构建

打开 GaussView 软件，双击“苯环”图标，在弹出的界面中选择苯环，然后在窗口中点击鼠标左键，即出现苯环分子，然后双击“C”图标，在弹出的界面中选择 C 原子，然后选择醛基，在紫色背景工作窗口中选择苯环上面的一个 H 原子，即用醛基取代了此处的 H 原子，然后按照同样步骤，在双击“C”图标后，在弹出的界面中选择 C 原子，然后选择 sp<sup>3</sup> 杂化的甲基，然后选择苯环上醛基对位 C 原子上的氢原子，即此处 H 原子被甲基取代，同理用一个甲基取代刚接上去的甲基上的一个氢原子即可，如此邻甲基苯甲醛分子结构构建完成，然后点击二面角图标，选择包含醛基在内的四个原子，扭动一定角度，使得醛基与苯环不共平面以进行后续的计算。然后将构建好的分子选择后缀名为 .gjf，选中 Write Cartesians 保存到相应文件夹中，路径为 D:\Data\20241210。

#### 2、邻甲基苯甲醛分子 Gaussian 输入文件的修改

用 Editplus 软件打开刚才保存好的 Gaussian 输入文件。删去第一行的路径，第二行保留“#”，后面的改为“OPT FREQ B3LYP/6-31G\*”。删去 22-27 行的所有数据，最后空两行以让软件正常识别结束。编辑结束后保存文件。

### 3、上传邻甲基苯甲醛 Gaussian 输入文件

打开 FileZilla 软件，连接服务器，找到刚刚保存好的 Gaussian 输入文件，拖动上传到服务器。

### 4、邻甲基苯甲醛 Gaussian 输入文件的计算

打开 PuTTY 软件，找到 WLHX 选项，点击 load 连接到 Linux 虚拟机。登录用户名为：wlhx，回车，输入密码 5506，回车。输入 Linux 命令“ls”，列出当前目录下的文件夹，输入 Linux 命令“cd data”，回车；输入 Linux 命令“ls”，列出当前目录下的文件夹，确保自己上传的文件存在。然后输入作业提交命令“g16 Gaussian 输入文件名 &”，回车，即提交文件进行运行。接着输入 Linux 命令“ls”，如果运行正常会出现后缀名为.log 的文件，接着输入 Linux 命令“tail Gaussian 输出文件名（后缀为.log 的文件名）”，回车，显示最后十行的内容，如果出现“Normal Termination of Gaussian 16”说明作业已经结束，输入“exit”退出即可，如果未出现，输入 Linux 命令“top”，观察 CPU 运行情况，当 CPU 使用率为 0%左右时，按 Ctrl+Z 退出，然后再次输入 Linux 命令“tail Gaussian 输出文件名（后缀为.log 的文件名）”，出现“Normal Termination of Gaussian 16”说明作业已经结束，输入“exit”退出即可。

### 5、下载 Gaussian 输出文件

打开 FileZilla 软件，连接服务器，找到刚才完成的 Gaussian 输出文件，拖动下载到微机相应的文件夹中，路径为 D:\Data\20241210。

## 五、实验数据处理：

### 1、邻甲基苯甲醛分子的优化构型图（带原子编号）

打开 GaussView 软件，打开刚下载的 Gaussian 输出文件，在紫色背景的工作窗口中单击鼠标右键，菜单中选择“view-Label, Symbol”，然后将分子构型调整到合适角度，单击鼠标右键，在菜单中选择“edit-Image Capture”，然后将复制好的图片粘贴到新建 word 文档中。

见附页

### 2、邻甲基苯甲醛分子的键长、键角和二面角数据：

分别点击 GaussView 工具栏里面测量键长、键角、二面角的图标，记录优化后的键长（单位为 Å，小数点后保留三位）、键角（单位为°，小数点后保留一位）和二面角数据（单位为°，小数点后保留一位）。

见附页

### 3、优化后邻甲基苯甲醛分子的 Cartesians 坐标和能量数据：

用 Editplus 软件打开刚才下载下来的 Gaussian 输出文件，然后按“Ctrl+F”选择“Standard orientation”进行查找，选择文件中最后一组数据复制保存，然后继续输入“HF=”进行查找，复制保存相关数据，最后输入“Zero-point correction”进行查找，复制保存相关数据。

见附页

### 4、绘制邻甲基苯甲醛分子的红外光谱图：

打开 GaussView 软件，打开刚下载的 Gaussian 输出文件，在 Result 菜单中选择 Vibrations，弹出的窗口中显示邻甲基苯甲醛分子的所有振动相关数据，点击对话框中的 Specutrum 键，弹出理论预测的 IR Spectrum，在光谱图上单击鼠标右键，选择 save data。保存好文件后，用 Editplus 软件打开刚才保存好的 txt 文件，删去除了红外光谱频率和能量之外的其他数据，保存，然后用 Origin 软件打开刚才编辑保存好的 txt 文件，进行绘图，绘制完毕后对谱图进行修正，标清横纵坐标，然后点击 Edit，保存图片。

见附页

## 六、思考题：

1、如何利用 Gaussian 程序开展分子构型优化和频率计算？

答：在利用 Gaussian 程序开展分子构型优化和频率计算的时候首先要在现有微机中借助 GaussView 软件完成相应分子构型的搭建，然后需要借助 Linux 虚拟机和 FileZilla 软件进行相关计算，借助远程终端控制和相应的 Linux 命令即可完成计算。

2、如何利用 GaussView 软件查看和修改分子构型？

答：在软件内部打开相应的 Gaussian 输入或 Gaussian 输出文件，然后就可以在一个紫色背景工作窗口中显示相应的分子结构，如果要对分子构型做出相应的改动可以在 GaussView 工具栏中点击“苯环”、“R 基”和“ $\text{C}=\text{O}$ ”，然后选择想要做出的改动在工作窗口中对想要改变的点用鼠标点击就可以。

3、如何利用 GaussView 软件开展分子振动分析、获得红外光谱？

答：打开相应的 Gaussian 输出文件后，在 Result 菜单中点击 Vibrations 弹出的窗口中就可以直接查看相应分子结构的频率分析，在弹出的窗口中点击 Spectrum 就可以获得该分子大致的 IR 图。