

계산화학2 랩노트

서울대학교 전기정보공학부 2018-12432 박정현*
(Dated: 실험일자: 11/14/2023)

I. 실험 과정

EDISON에 접속한 뒤 C212512432를 입력하고 비밀번호는 아이디와 동일하게 입력한다. ORCA를 검색한 뒤 RUN을 눌러 ORCA를 실행한다. 그 뒤 Avogadro 프로그램을 실행한 뒤 CH₄는 Element에서 Carbon을, NH₃, H₂O는 각각 질소, 산소를 선택한다. 그 뒤 화면의 아무 부분을 클릭하여 분자를 배치한다. 그 뒤 Extensions에서 Orca에서 Generate Orca Input file을 선택하여 input file을 만든다.

이 때 Calculation은 Geometry Optimization으로 바꾸고 아래의 ! 코드에 ! HF OPT 6-31g(d) LargePrint를 입력하여 하트리 폭 방식으로 가우시안 기저를 통해 문제를 풀도록 설정한다. 그 뒤 input file을 Orca에서 Menu를 눌러 입력한 뒤 Submit을 눌러 파일을 제출한다. 5분 가량 기다린 뒤 결과가 나타나면 Download에서 .out파일을 저장한다. 이후에 .out파일을 Avogadro를 통해 연 뒤 View, Properties에서 각각의 계산값을 확인한다.

* alexist@snu.ac.kr