**Схема расчета частот и форм нормальных колебаний многоатомной молекулы с использованием результатов квантово-механического расчета.**

Цель работы – получить отнесение теоретических частот во внутренних (естественных) координатах. Для этого необходимо преобразовать теоретическую матрицу силовых постоянных из декартовых координат во внутренние. При использовании зависимых (> 3N-6) внутренних координат такой переход неоднозначен. В программе Wdisp-dir реализованы две схемы преобразования квантово-механический матрицы из декартовых координат во внутренние:

1. В т.н**. каноническую** матрицу (ближайшую по норме к нулю) – такая матрица определяется однозначно
2. В матрицу с **минимальной недиагональной нормой** (имеющую максимальные величины диагональных элементов) – отвечает химическим представлениям о силах в молекуле.

**Этап I: формирование входного файла для работы Wdisp-dir.exe**

1. Перейти в директорию Wdisp-dir и запустить программу Wdisp-dir.exe. В окне программы в разделу Input File кликнуть кнопку (>>>). Появляется дополнительное окно , показывающее в директории файлы с расширением « mol».
2. В нижней части дополнительного окна в разделе Тип файлов выбрать опцию All files (\*.\*). В окне появляется список всех файлов, находящихся в директории Wdisp-dir.
3. Выделить мышкой файл test .out (результат квантово-механического расчета) и нажать кнопку «Открыть». Программа переходит в первоначальное окно. В разделе Package выбрать строку Gaussian Output и нажать кнопку «Start»

Поверх начального окна программы появляется окно Gaussian conversion, в разделе Input File высвечивается путь к файлу test .out. В разделе Conversion Mode выбрать опцию Gaussian Standard (.out). В разделе Output file выписан путь к образуемому файлу test.mol

1. Нажать кнопку Convert. Второе окно исчезает, а в рабочем окне программы WDisp

появляется информация

Trying to convert Caussian.out format… All done, 1 mol file(s) generated

Программа на основе введенного выходного файла сформировала макет входного файла test.mol для программы WDisp-dir.exe.

В разделе Input File кликнуть кнопку (>>>),появляется окно Открыть.

Выбираем файл test.mol и нажимаем кнопку Открыть.

Программа возвращается к основному окну, в разделе Input file выписан путь к файлу test.mol.

1. Кликнуть кнопку Edit input. В текстовом редакторе открывается файл test.mol.

Файл содержит следующие основные разделы:

([Atoms] // INPUT ORIENTATION!!!) (декартовы координаты оптимизированной геометрической структуры молекулы )

[Coordinates] (тип координат , единицы, число координат)

Type=Cartesian

Length=Angstroms

Count=6

//No x y z Name Mass(amu)

1 -0.668756 0.955917 -0.000049 C 12

….

[Frequencies] (теоретические частоты колебаний (в порядке убывания))

Count=12 // число частот

//No Symmetry Value Error

1 A 3297.365 1.0

…

[Matrix Z] (Матрицу силовых постоянных в декартовых координатах)

Coordinates=Cartesian

Units=Hartree

**Этап II**

**Редактирование полученного файла и введение внутренних координат**

Может быть проведено двумя путями – с помощью ручного ввода в раздел [Coordinates],

при этом тип координат необходимо заменить на Type=internal

Далее координаты вводятся в соответствии с инструкцией, находящейся в директории.

Второй путь – автоматический ввод «плоских» координат (координат растяжения связей и изменений валентных углов) и ручной ввод «неплоских» координат.

1. Для нахождения полного списка «плоских» координат выбирается тип координат auto,

(см. приведенный ниже фрагмент файла). В разделе надо указать встречающиеся в молекуле варианты валентных связей между различными атомами и максимальные длины связей (определить из визуализированной геометрии).. Например, если в молекуле есть два типа связей СС (одинарная и двойная), то в качестве максимального расстояния между атомами следует привести округленную (в сторону увеличения) длину одинарной связи.

[Coordinates]

Type=Auto

Count=3

//No Pair Max Distance

1 C-C 2.0

2 C-H 1.4

3 C-Cl 1.9

Подготовленный файл, например, testauto.mol запускается кнопкой Symmetry Analysis.

Программа построит систему «плоских» внутренних координат, состоящую из связей и углов. При этом координаты растяжения связей соответствуют заданным парам атомов в разделе, а координаты для валентных углов вводятся все, какие существуют между полученными связями. Внутренние координаты запишутся в файл с тем же именем testauto.mol, а первоначальный файл сохранится как testauto.bak

Полученный таким образом список внутренних координат следует дополнить «неплоскими» координатами (соответственно, изменить общее число координат).

Для решения прямой задачи расчета частот и форм нормальных колебаний следует вызвать сформированный файл в полной системе внутренних координат и запустить решение задачи в опции Spectroscopy. Результат запишется в файл с расширением res.

В конце выдачи печатается итоговая таблица, в которой сопоставляются теоретические частоты колебаний с рассчитанными с сформированной матрицей силовых постоянных во внутренних координатах и распределение потенциальной энергии для рассчитанных частот.