

HOMO & LUMO 구하는 방법

부제목 : Orca를 이용해서 구하기

작성일자 : 2025 01 22

작성자 : 안용상

DFT configuration

구조 File 수집

- pubChem3D와 같은 사이트에서 구할 수 있으면 Best
- 없으면 직접 만들어야 한다.

구조 File 변환

- open-babel 프로그램 사용
- .mol 에서 .xyz 로 다시 이를 .inp파일로

구조 최적화 by DFT 진행

* DFT configuration

키워드	설명	특성
B3LYP	Becke's 3-parameter exchange and Lee-Yang-Parr correlation functional (DFT 함수)	하이브리드 밀도 범함수 이론(DFT)을 사용하여 전자 구조 계산을 수행하며, 정확성과 효율성 균형 제공
def2-SVP	분자 궤도 함수에 사용되는 기저 집합	분자 계산의 정확도와 효율성을 위한 중간 크기의 Split-Valence Polarized 기저 세트
OPT	최적화 (Optimization) 계산 수행	주어진 구조에서 에너지 최소화 상태를 찾고, 안정한 분자 구조를 계산
ALLPOP	모든 원자의 Mulliken 인구 분석(Mulliken population analysis) 포함	전하와 궤도 기여를 포함한 모든 원자의 전자 분포 정보를 제공
KEEPPDENS	밀도 행렬(density matrix) 보존	최적화 과정 후에도 초기 계산에서 얻은 전자 밀도 정보를 유지

DFT configuration

구조 최적화된 .xyz로 Single Point Calculation을 통한 추가 계산 진행

* DFT configuration

키워드	설명	특성
MP2	Møller-Plesset 2차 Perturbation Theory	전자 상호작용을 더 정확히 계산하기 위한 비결합 상관 에너지 포함 방법으로, HF(Hartree-Fock)보다 정확하지만 계산 비용이 더 큼
SP	Single Point Energy 계산	구조 최적화 없이 주어진 고정된 구조에서 에너지를 계산하여 전자 상태 분석에 집중
def2-SVP	분자 궤도 함수에 사용되는 기저 집합	분자 계산의 정확도와 효율성을 위한 중간 크기의 Split-Valence Polarized 기저 세트

Single Point 계산 후 나온 .out 파일에서 "ORBITAL ENERGY"라는 부분 검색 및 필요한 부분 파싱

추가 시각화 필요 시)

1) iboview 프로그램 설치

2) orca_2mkl <원하는 아웃풋파일 이름> -molden 명령

계산 후 나온 .gbw를 .molden.input 파일로 변환하기 위해 (.molden.input 파일이란 iboview에서 오비탈 정보를 볼 수 있게 만들어진 확장자를 뜻한다)

3) .molden.input 파일을 iboview로 open한다.

주의사항) 윈도우의 경우 파일 경로상에 한글 경로가 있으면 오류가 났다. 인코딩 문제로 보이며 영어 경로로 옮긴뒤 여는 것이 좋다.

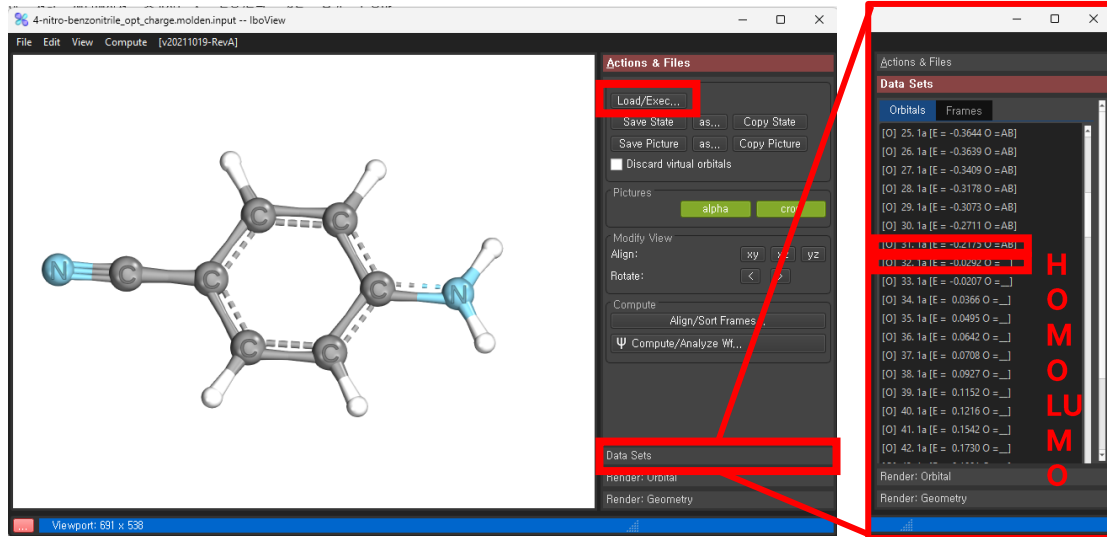
4) iboview 상에서 필요 정보 확인하기

다음 페이지 참조

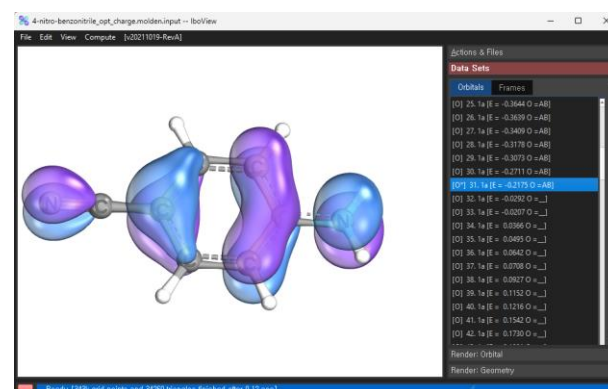
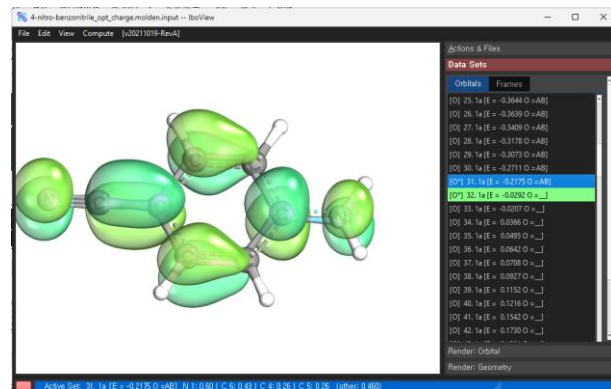
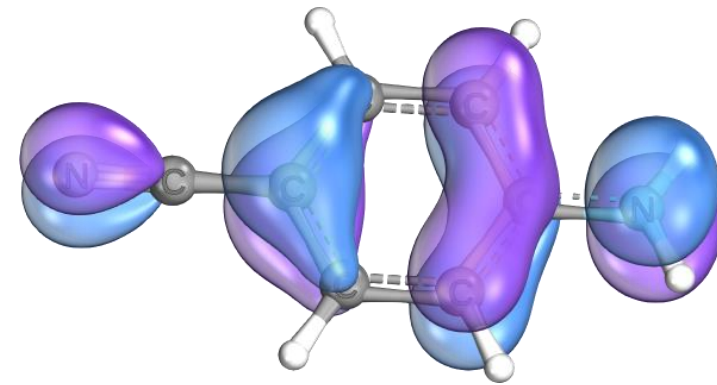
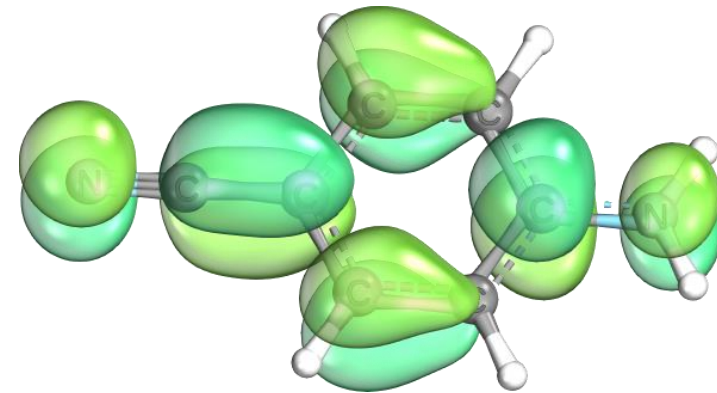
[O*] 31. 1a [E = -0.2175 O = AB]

[O*] 32. 1a [E = -0.0292 O = _]

구조 최적화된 .xyz로 Single Point Calculation을 통한 추가 계산 진행



* png로도 저장이 가능 (배경 없음)



참고 자료

||| 참고 자료

http://www.iboview.org/_bgBqyRo.html

<https://www.youtube.com/watch?v=TqSmmnqXWF8>