C60-malonic ester 구조 제작

부제목 : 3d Structure DB에서 구조 파일 가져와서 진행하기

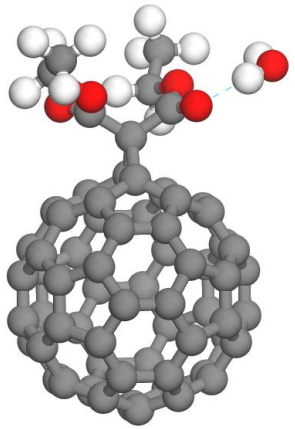
작성일자 : 2025 01 21

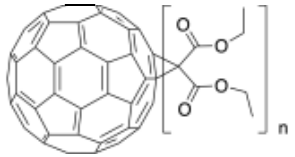
작성자 : 안용상

https://drive.google.com/drive/folders/1YW7PAbLm_rfhhtjExgnEx-pJsSxePLoR

실험 개요

실험 배경





C60-malonic ester derivative

KETI 황치현 박사님에게 C60-malonic ester를 대상으로한 몇 가지 양자화학 계산 작업을 받았다. 해야할 작업들은 다음과 같다.

1. C60-malonic ester에 슈퍼_옥사이드 라디칼을 여러 흡착사이트에 붙혀보며 흡착에너지를 확인하는 것
2. HOMO와 LUMO를 구하는 것

이를 달성하기 위해 가장 먼저 필요한 것은 C60-malonic ester의 구조 파일이다.

이를 만드는 것이 이번 실험의 목적이다.

간략한 실험 목적 및 계획

C60-malonic ester의 구조 파일을 만드는 것이 이번 실험의 목적이다.
3D 에디터로 비슷하게 만들 수 있지만 반드시 구조 최적화가 필요하다.
이번 실헝의 목적은 구조 최적화가 완료된 C60 – malonic ester를 구하고, 가능한 계산량이라면 전자밀도 계산과 함께 ESP도 확인한다

1. 초기 구조 파일 준비:
2. 구조 러프하게 합치기:
3. 파일 변환:
4. 구조 최적화 by Orca:
5. orca_plot으로 .gbw파일 처리 후 .cube파일 생성
6. Generate Surface
7. Jmol로 ESP 확인

목표 아웃풋

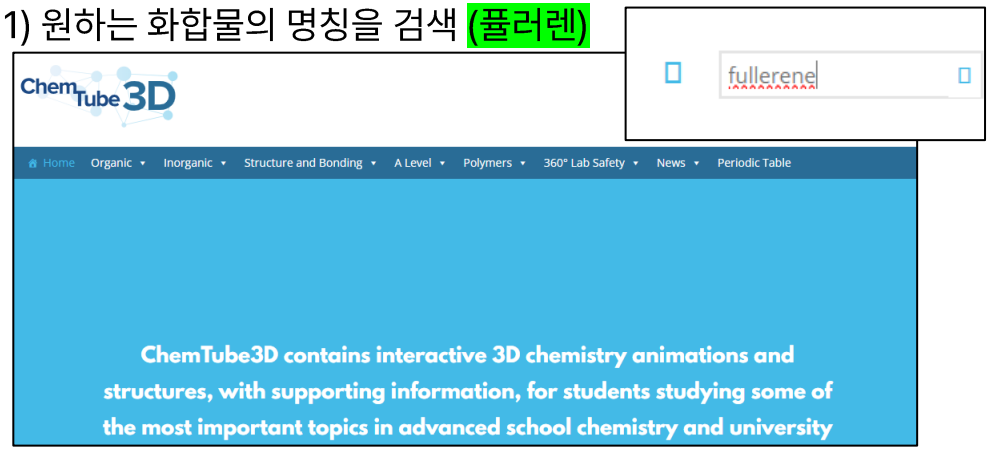
확장자	설명
.gbw	orca outpu중 하나
.xyz	최종 구조 최적화 완료된 구조 파일
.cube	ESP 정보가 담긴 파일
.mol2	jmol로 ESP를 보기위한 파일

Step 1. 초기 구조 파일 준비

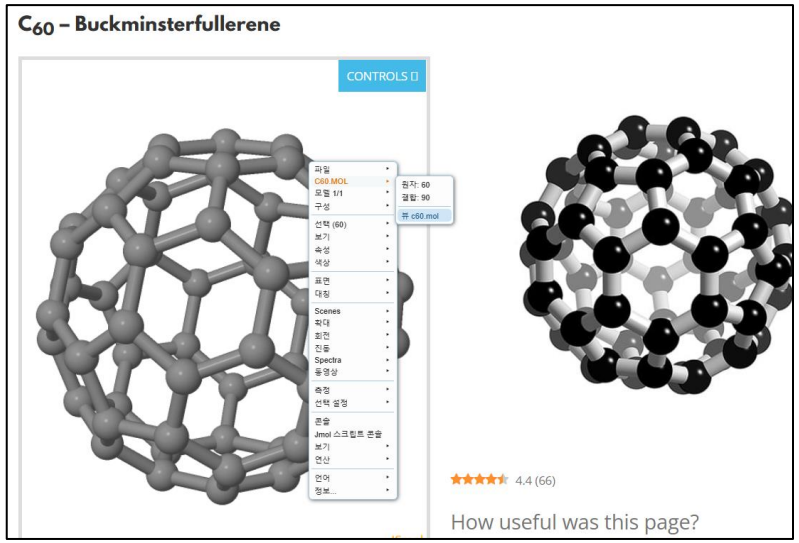
https://www.chemtube3d.com/category/gallery/

풀러렌 구하기 (chemtube3d)

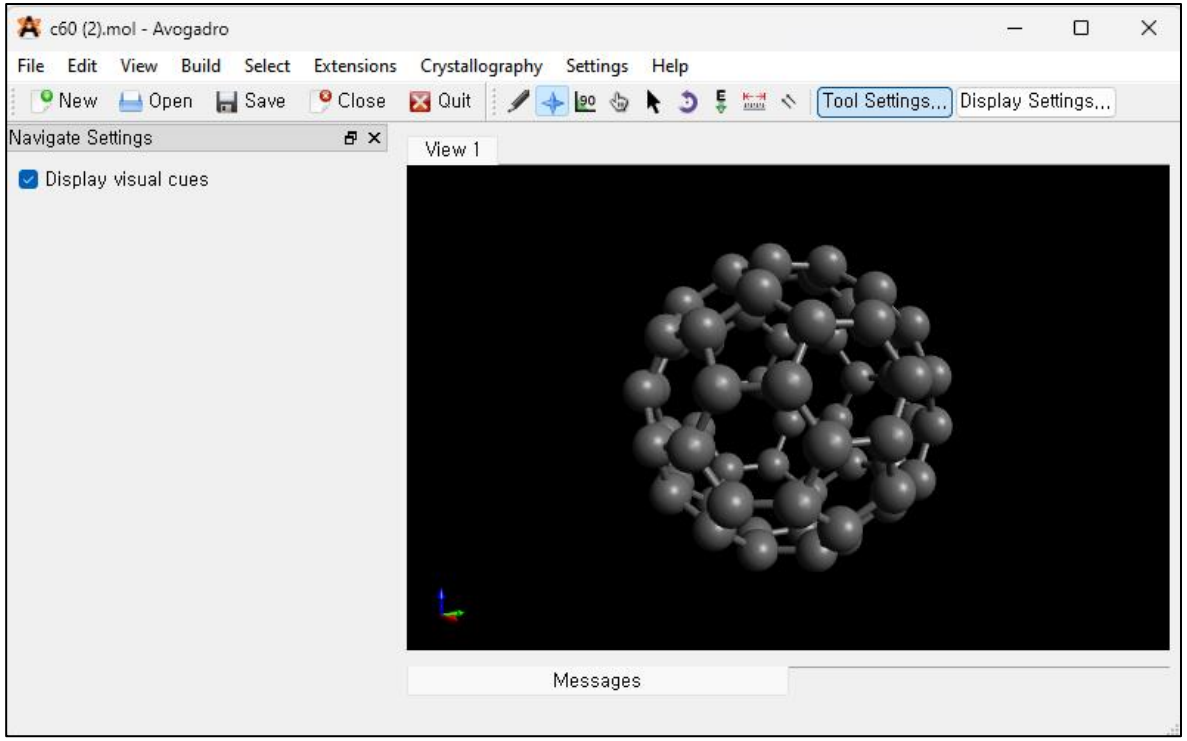
1) 원하는 화합물의 명칭을 검색 (풀러렌)



2) 우클릭 >> view <화합물 명칭.mol>버튼 클릭



3) 3D 뷰어 프로그램으로 열어서 확인



Step 1. 초기 구조 파일 준비

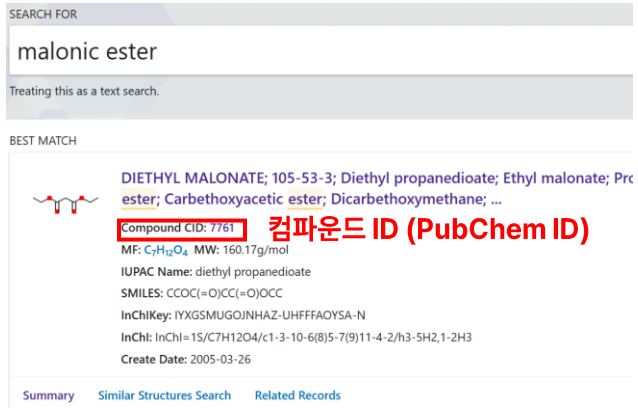
https://jcheminf.biomedcentral.com/articles/10.1186/1758-2946-3-32

https://ftp.ncbi.nlm.nih.gov/pubchem/Compound_3D/

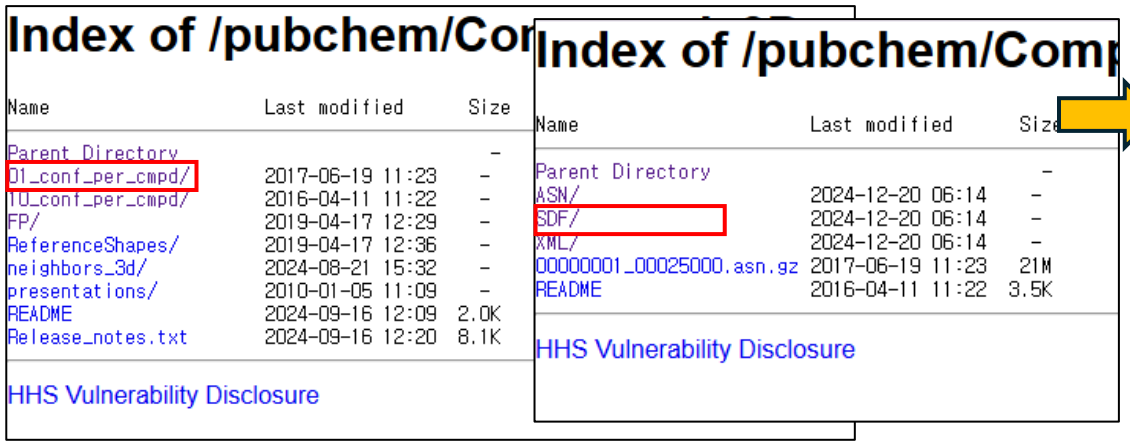
https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/

malonic ester 구하기 (pubchem 3d)

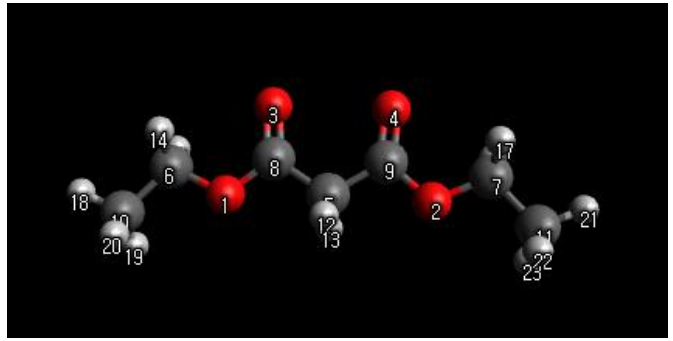
1) 원하는 화합물의 명칭을 PubChem에 검색



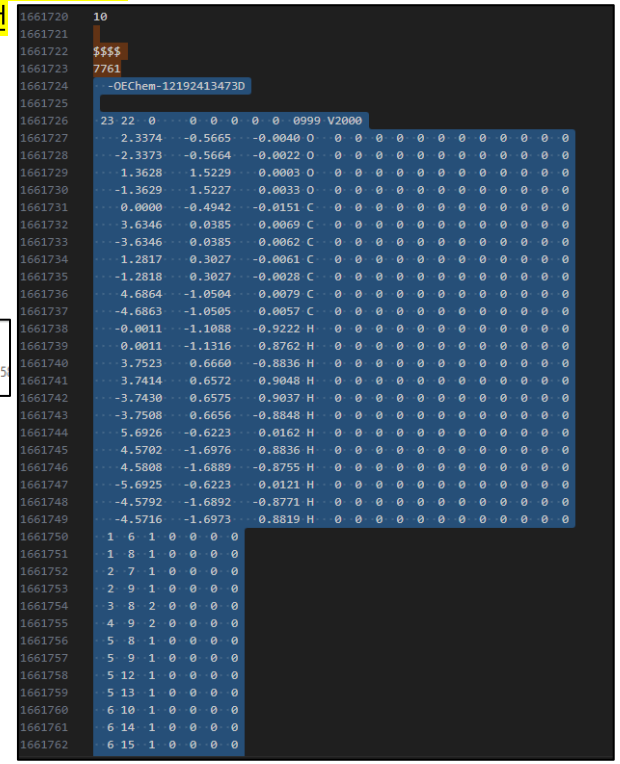
2) pubchem3d 데이터베이스에 접속해서 원하는 화합물의 번호가 있는 .sdf.gz 파일을 찾아 다운로드

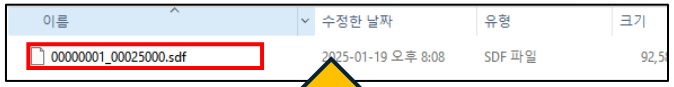


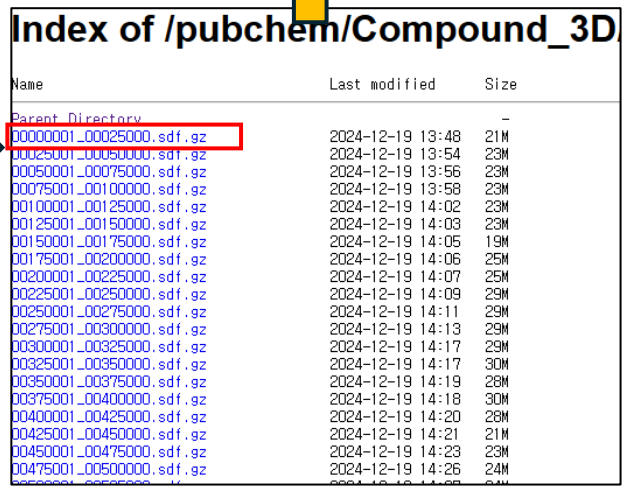
3) 해당 파일을 메모장 혹은 vscode와 같은 텍스트 에디터로 열어 Compound ID의 .mol 정보를 확인



malonic ester는 7761번



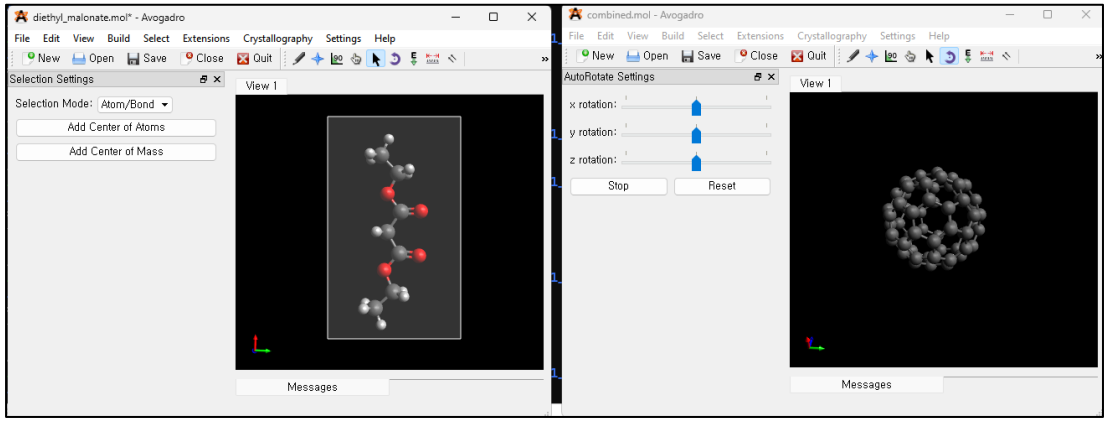




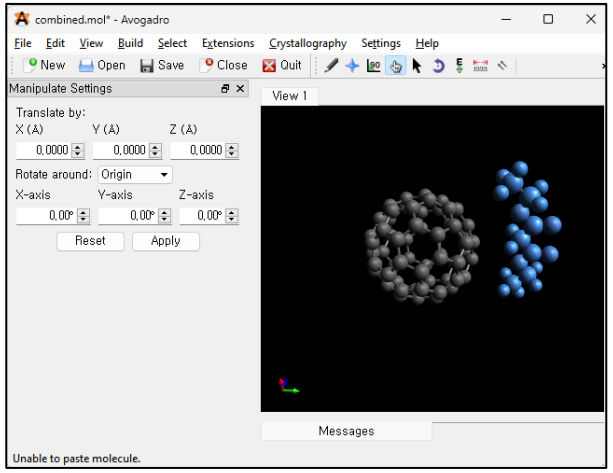
Step 2. 구조 러프하게 합치기:

풀러렌과 malonic ester 합치기

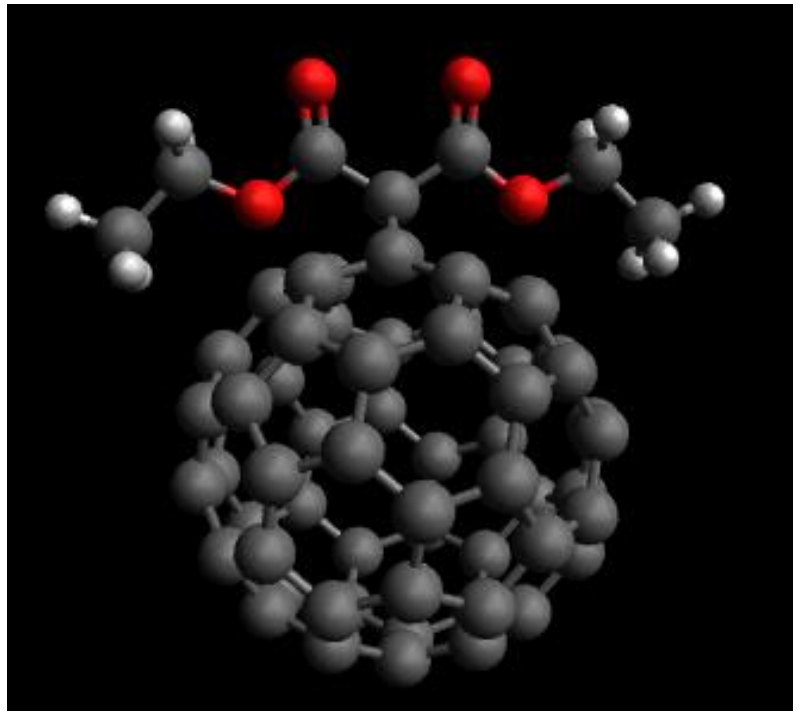
1) 두 구조를 동시에 볼 수 있게 두 창 띄우기



2) malonic ester를 복사 붙혀넣기



3) 3D 에디터로 화합물들을 적절하게 돌려가며 원하는 구조로 러프하게 합체



4) 사라지지 않게 저장

Step 3. 파일 변환

.mol -> xyz -> .inp

1) openbabel로 .xyz로의 변환

c60malonicester.mol 2025-01-20 오후 2:27

리눅스 명령 실행 (open-babel)

```
obabel c60malonicester.mol -o xyz -O c60malonicester.xyz
```

c60malonicester.xyz 2025-01-20 오후 2:31

2) .xyz 상의 내용을 선택해 복사

```
81

C        3.27420       -1.42970       -0.06200
C        3.57140       -0.01920       -0.08500
C        3.31190        0.79090        1.07890
C        2.71820       -2.02920        1.12330
C        2.77020       -1.79900       -1.36120
C        3.25070        0.48310       -1.39920
C        2.73320        2.10420        0.93000
C        2.75590        0.19130        2.26420
C        1.65740       -2.99890        1.01110
C        2.45860       -1.21920        2.28720
C        1.70930       -2.76870       -1.47340
```

```
H       -1.69650        5.02610        4.36630
C       -0.88390        5.35280       -0.67510
H        0.21690        3.88990       -4.17550
O       -0.76940        4.61040       -1.81740
H       -0.14430        6.11340       -3.09990
O       -1.09530        6.55610       -0.62510
C       -0.91480        5.33650       -3.04240
C       -0.76260        4.37830       -4.20450
H       -0.86840        4.90130       -5.15900
H       -1.51530        3.58470       -4.15080
H       -1.90550        5.80330       -3.07470
```

3) c60malonicester.inp라는 파일을 만들어 다음과 같이 입력후 그 아래에 아까 복사한 내용도 이어 붙히기

```
! B3LYP def2-SVP Opt TightSCF ALLPOP KEEPDENS

%pal
num_procs 8
end

* xyz 0 1
C        3.27420       -1.42970       -0.06200
C        3.57140       -0.01920       -0.08500
C        3.31190        0.79090        1.07890
C        2.71820       -2.02920        1.12330
C        2.77020       -1.79900       -1.36120
C        3.25070        0.48310       -1.39920
```

병렬CPU 사용 구문
(open mpi 설정 하지 않았다면 사용 못 함. 이 경우 이 줄들은 제거하고 실행)

- **B3LYP**: DFT 계산을 위한 함수.
- **def2-SVP**: 기저 세트.
- **OPT**: 최적화 계산 수행.
- **ALLPOP**: 모든 전자 Population 분석 데이터를 출력.
- **KEEPDENS**: 계산 중 밀도를 유지.

c60malonicester.inp 2025-01-20 오후 2:32

Step 4. Orca로 구조 최적화

Orca 명령어 실행

1) Orca 명령어 실행

```
(base) [yongsang@ga04 inp]$ orca c60malonicester.inp > c60malonicester.out
```

2) 계산 완료될 때까지 기다리기..

다루는 화합물에 원자 수가 많고 복잡하며, ALLPOP, KEEPDENS 키워드까지 이용했으므로 계산시간이 다소 걸림,,,

~~개인적으로 CPU 8개를 병렬 처리해 9시간이 걸렸다.~~

https://drive.google.com/drive/folders/1YW7PAbLm_rfhhtjExgnEx-pJsSxePLoR
파일들은 여기에 저장해두었다.

3) 완료 후 아웃풋들 확인

```
(base) [yongsang@ga04 inp]$ ls
c60malonicester.bibtex          c60malonicester.engrad  c60malonicester.out
c60malonicester.densities       c60malonicester.gbw     c60malonicester.property.txt
c60malonicester.densitiesinfo   c60malonicester.inp     c60malonicester_trj.xyz
c60malonicester.eldens.cube     c60malonicester.opt     c60malonicester.xyz
```

.inp 확장자를 제외하면 11개의 파일이 새로 생겼다

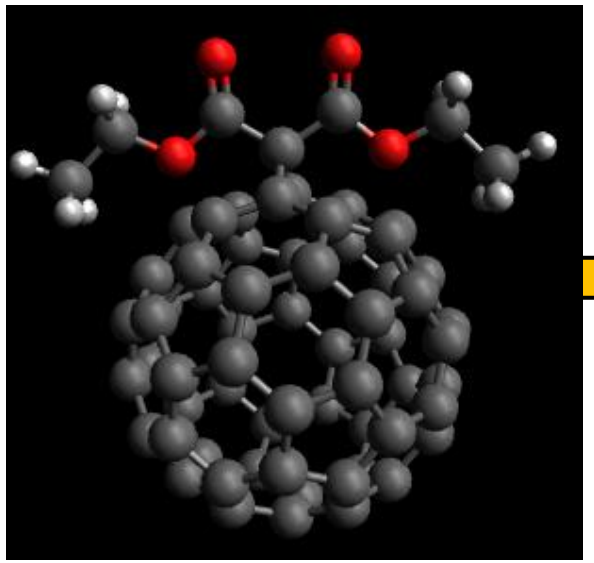
Step 4. Orca로 구조 최적화

계산 결과 시각화 및 올바르게 최적화 되었는지 체크

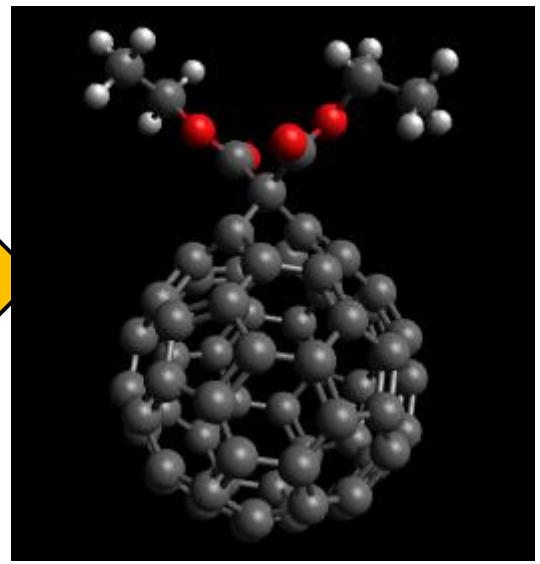
1) Avogadro로 새로 생긴 .xyz파일 열기

2) 최적화 전 / 레퍼런스 와 비교

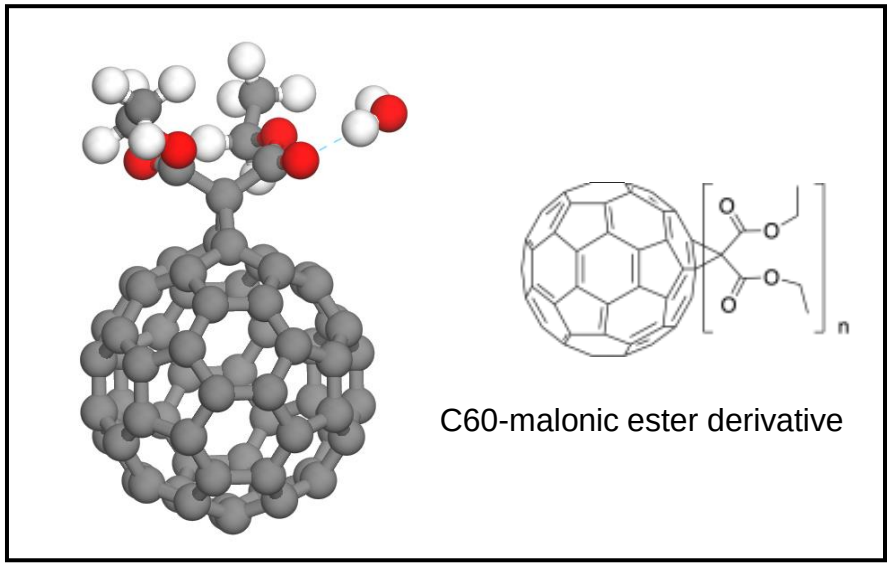
*최적화 전 .xyz파일



*최적화 후 .xyz파일



*레퍼런스



*최적화 전과 비교했을 때, 확실히 구조가 바뀐 것을 확인할 수 있으며
* 레퍼런스와 비교했을때 구조가 일치하는 것을 알 수 있다.

Step 5. orca_plot으로 .gbw파일 처리 후 .cube파일 생성

orca_plot으로 gpwfile을 처리 > .cube파일 생성

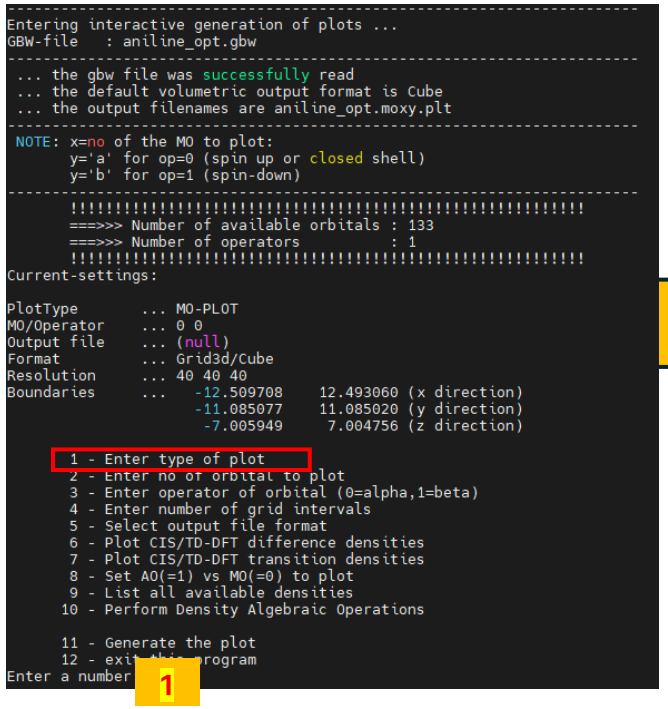
1) orca_plot 명령을 이용한 .cube 파일 생성

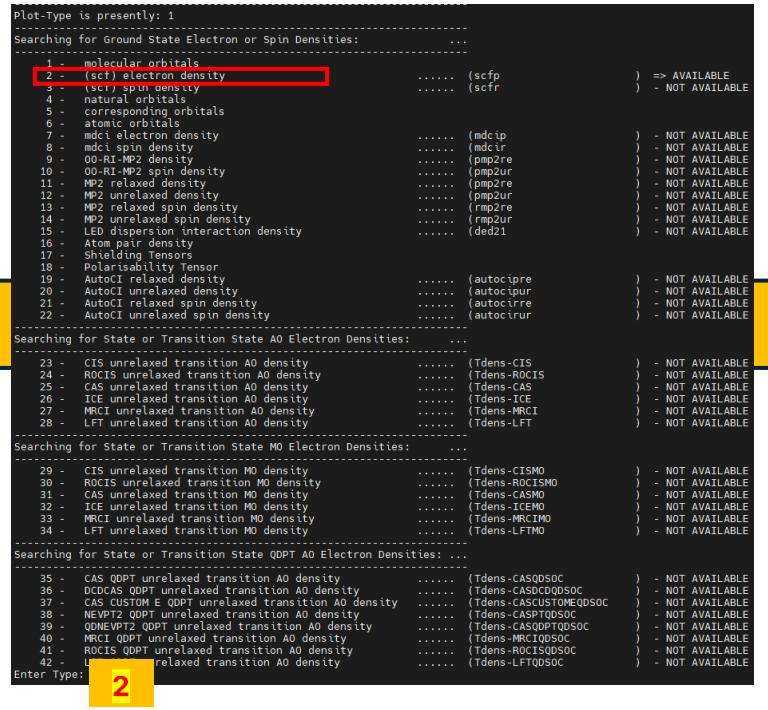
다음 명령을 이용해 gbw파일을 처리한다

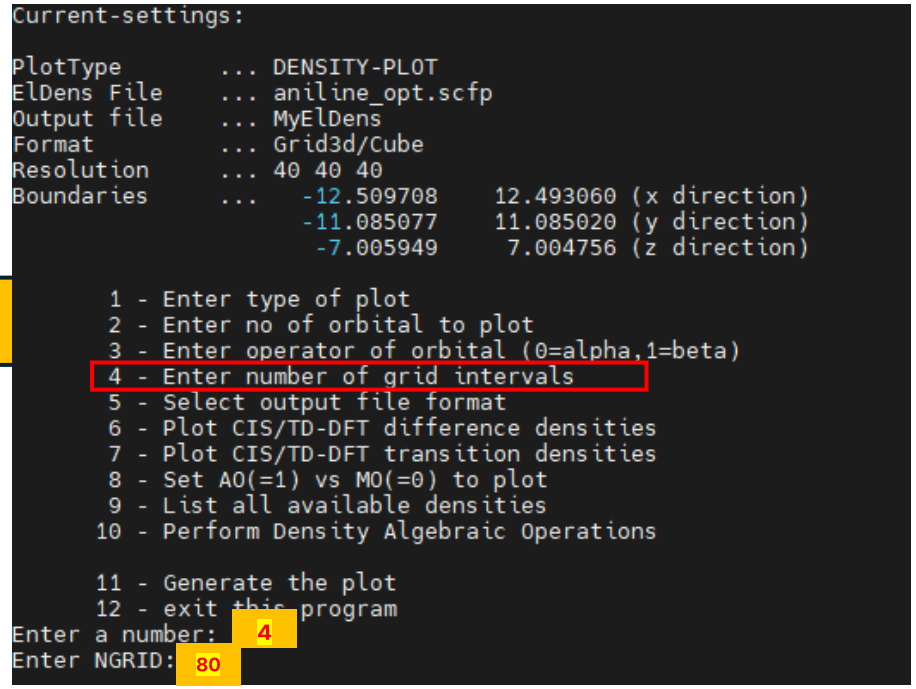
```
orca_plot [redacted] -i
```

c60malonicester.gbw 2025-01-20 오후 11:34

아래와 같은 command line UI가 나오며 필요한 번호를 입력해 설정을 바꾼다.
ESP를 위한 설정은 다음 사진들을 따라오면 된다.







Step 2: orca_plot 명령으로 gpwfile을 처리

orca_plot으로 gpwfile을 처리 > .cube파일 생성

...이어서

```
Current-settings:

PlotType        ... DENSITY-PLOT
ElDens File     ... aniline_opt.scfp
Output file     ... MyElDens
Format          ... Grid3d/Cube
Resolution      ... 80 80 80
Boundaries      ...    -12.509708    12.493060 (x direction)
                       -11.085077    11.085020 (y direction)
                        -7.005949     7.004756 (z direction)

       1 - Enter type of plot
       2 - Enter no of orbital to plot
       3 - Enter operator of orbital (0=alpha,1=beta)
       4 - Enter number of grid intervals
       5 - Select output file format
       6 - Plot CIS/TD-DFT difference densities
       7 - Plot CIS/TD-DFT transition densities
       8 - Set AO(=1) vs MO(=0) to plot
       9 - List all available densities
      10 - Perform Density Algebraic Operations

      11 - Generate the plot
      12 - exit this program
Enter a number: 5
```

```
Enter a number: 5
File-Format is presently: 7
     1 -  2D   Origin format
     2 -  2D   HPGL format
     3 -  2D   Gnuplot binary format
     4 -  2D   Gnuplot ascii format
     5 -  3D   Grid data binary (Fortran number format!)
     6 -  3D   Grid data ASCII
     7 -  3D   Gaussian cube
     8 -  3D   simple format
Enter Format: 7
```

```
Current-settings:

PlotType        ... DENSITY-PLOT
ElDens File     ... aniline_opt.scfp
Output file     ... MyElDens
Format          ... Grid3d/Cube
Resolution      ... 80 80 80
Boundaries      ...    -12.509708    12.493060 (x direction)
                       -11.085077    11.085020 (y direction)
                        -7.005949     7.004756 (z direction)

       1 - Enter type of plot
       2 - Enter no of orbital to plot
       3 - Enter operator of orbital (0=alpha,1=beta)
       4 - Enter number of grid intervals
       5 - Select output file format
       6 - Plot CIS/TD-DFT difference densities
       7 - Plot CIS/TD-DFT transition densities
       8 - Set AO(=1) vs MO(=0) to plot
       9 - List all available densities
      10 - Perform Density Algebraic Operations

      11 - Generate the plot
      12 - exit this program
Enter a number: 11
```

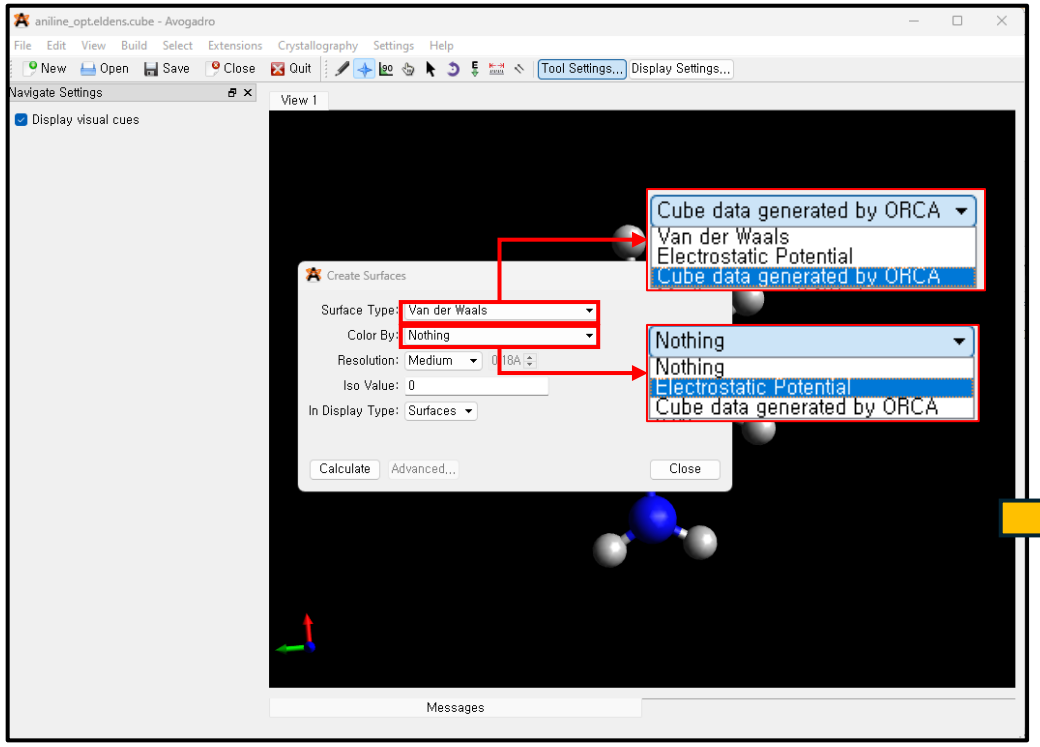
.cube 파일 생성!!

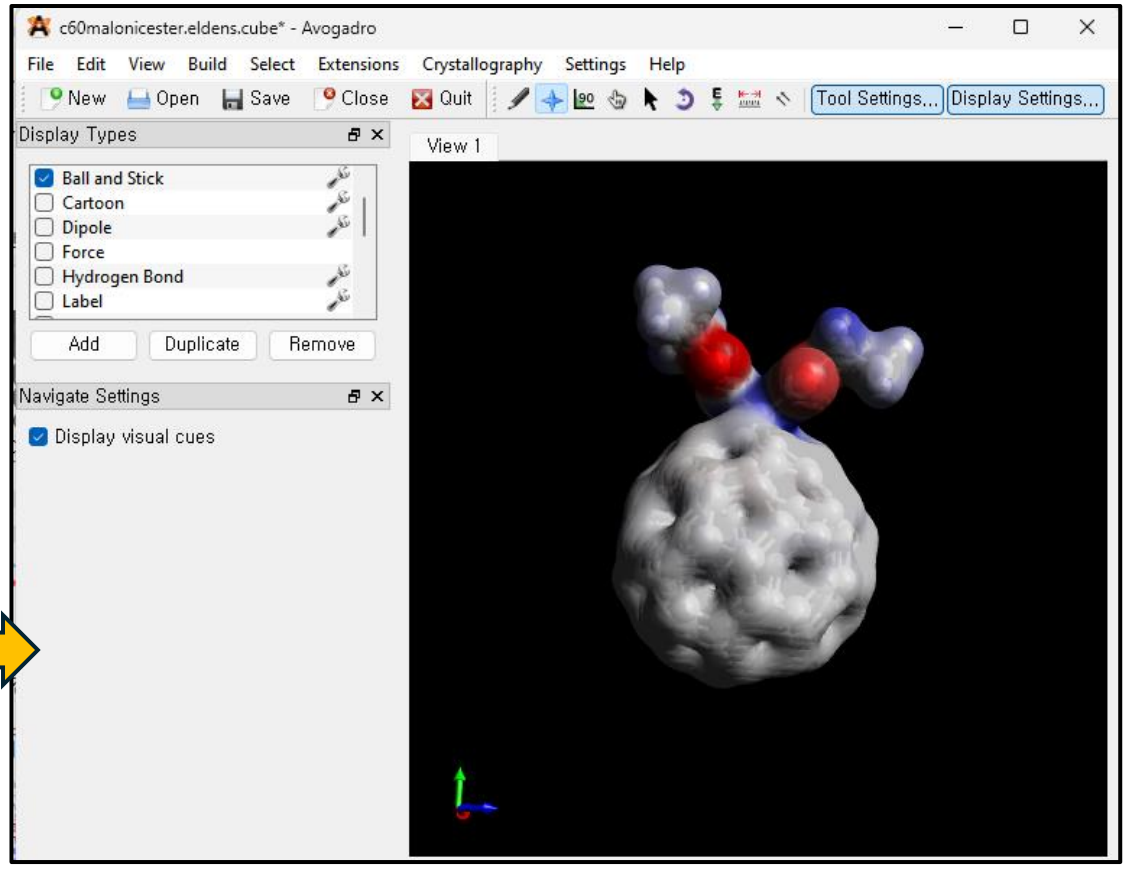
c60malonicester.eldens.cube 2025-01-20 오후 11:42

```
Calling PlotGrid3d with ATOM-A,B=0,0
Entering PlotGrid3d with Plottype =2
                *** PLOTTING FINISHED ***
 Output file: aniline_opt.eldens.cube
--------------------------------------------------------------------------------
Current-settings:

PlotType        ... DENSITY-PLOT
ElDens File     ... aniline_opt.scfp
Output file     ... aniline_opt.eldens.cube
Format          ... Grid3d/Cube
Resolution      ... 80 80 80
Boundaries      ...    -12.509708    12.493060 (x direction)
                       -11.085077    11.085020 (y direction)
                        -7.005949     7.004756 (z direction)

       1 - Enter type of plot
       2 - Enter no of orbital to plot
       3 - Enter operator of orbital (0=alpha,1=beta)
       4 - Enter number of grid intervals
       5 - Select output file format
       6 - Plot CIS/TD-DFT difference densities
       7 - Plot CIS/TD-DFT transition densities
       8 - Set AO(=1) vs MO(=0) to plot
       9 - List all available densities
      10 - Perform Density Algebraic Operations

      11 - Generate the plot
      12 - exit this program
Enter a number: 12
```

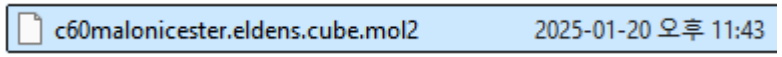
Step 6. Generate Surface

Avogadro 상에서 Generate Surface 실행하기





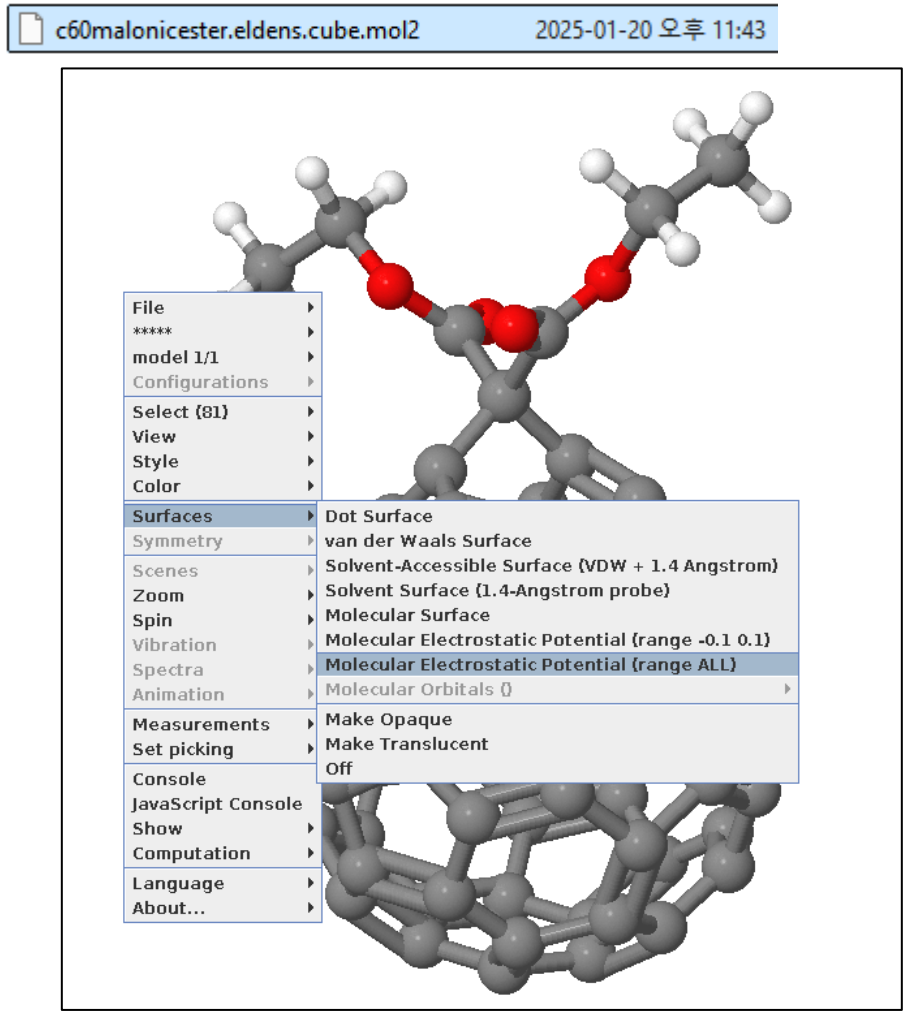
.mol2 파일로 저장!

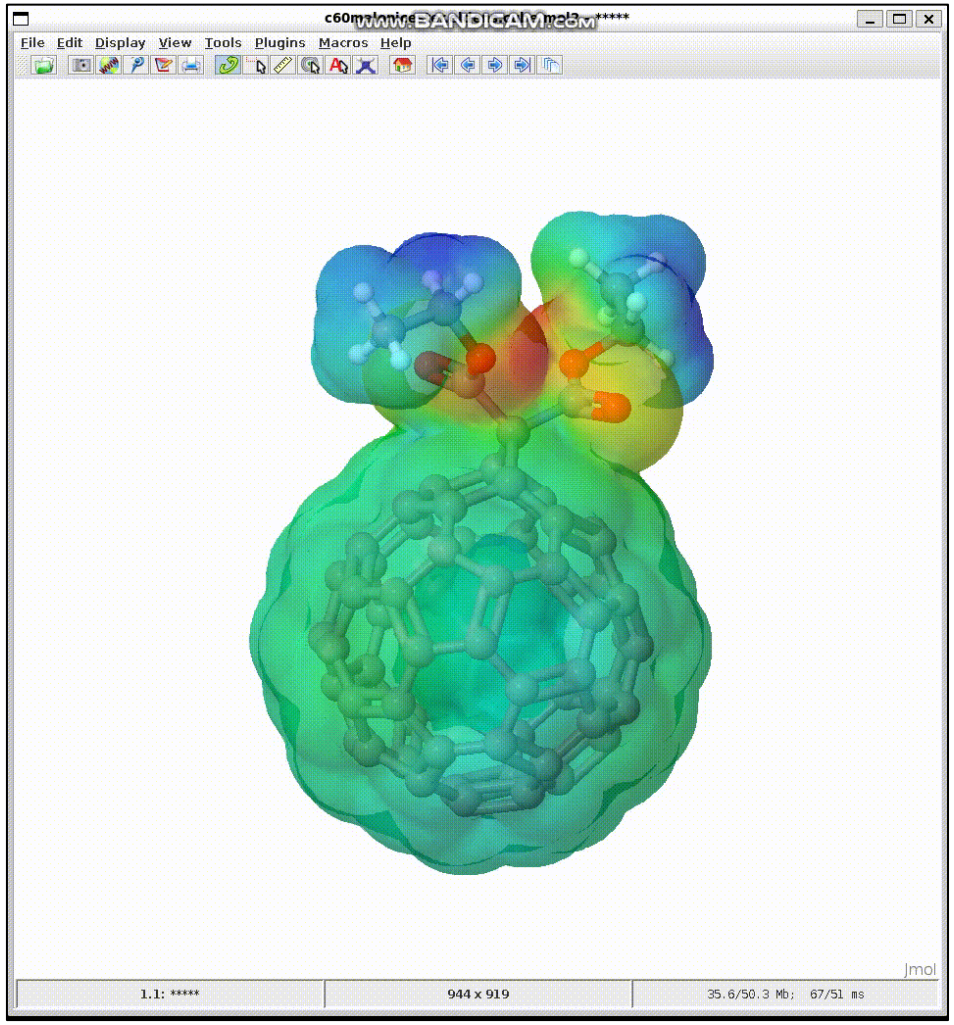


Step 7. Jmol로 ESP 확인

https://drive.google.com/drive/folders/1YW7PAbLm_rfhhtjExgnEx-pJsSxePLoR

jmol프로그램으로 ESP 확인





아웃풋 자료 공유

구조 최적화와 전자밀도 계산 과정에서 나온 Output파일들 공유 링크

https://drive.google.com/drive/folders/1YW7PAbLm_rfhhtjExgnEx-pJsSxePLoR