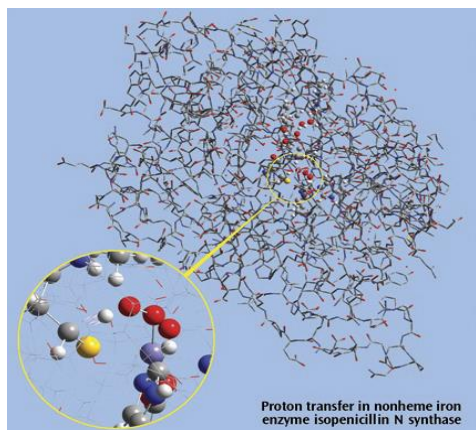


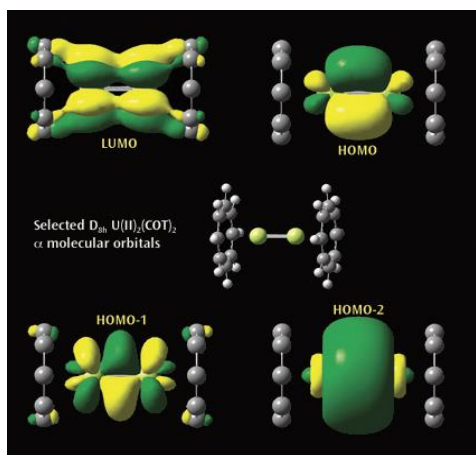
# GaussView 5.09

## 使用 GaussView 5 来查看分子和反应



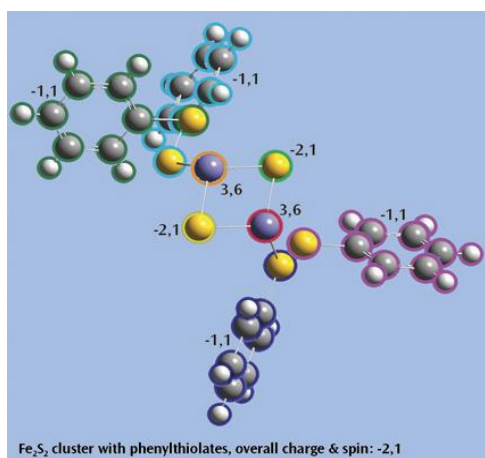
这是一个非亚铁血红素铁酶异青霉素 N 合成酶( nonheme iron enzyme isopenicillin N synthase IPNS ) 中质子转移 IRC 的动画特写。这个 5368 个原子的体系使用 Gaussian 中的 ONIOM 方法来研究, 使用 Gaussview 5 查看结果。为了说明清楚, 特写和全分子图中的低精度层氢原子忽略显示。ONIOM 高精度层用球棍方式显示, 低精度层的特写用网格线方式显示, 全分子图用管线方式显示低。

【参考文献】M. Lundberg, T. Kawatsu, T. Vreven, M. J. Frisch and K. Morokuma, *JCTC* 5 (2009) 222。



这是在  $U(II)_2(COT)_2$  的一个 Gaussian 计算结果中选择的  $\alpha$  分子轨道。每一个  $U(II)COT$  单体有 4U 个价电子可用于金属-金属键合:  $f\sigma$  类型分子轨道中 2 个电子和  $f\delta$  类型分子轨道中 2 个非成对电子。从左上角开始按顺时针方向, GaussView 5 显示的分子轨道依次为 LUMO、HOMO、HOMO 之下倒数第二低和次低能量分子轨道; 所有分子轨道都具有  $D_{8h}$  对称性。

【参考文献】Zhou, J. Sonnenberg and H. B. Schlegel, *in preparation*.

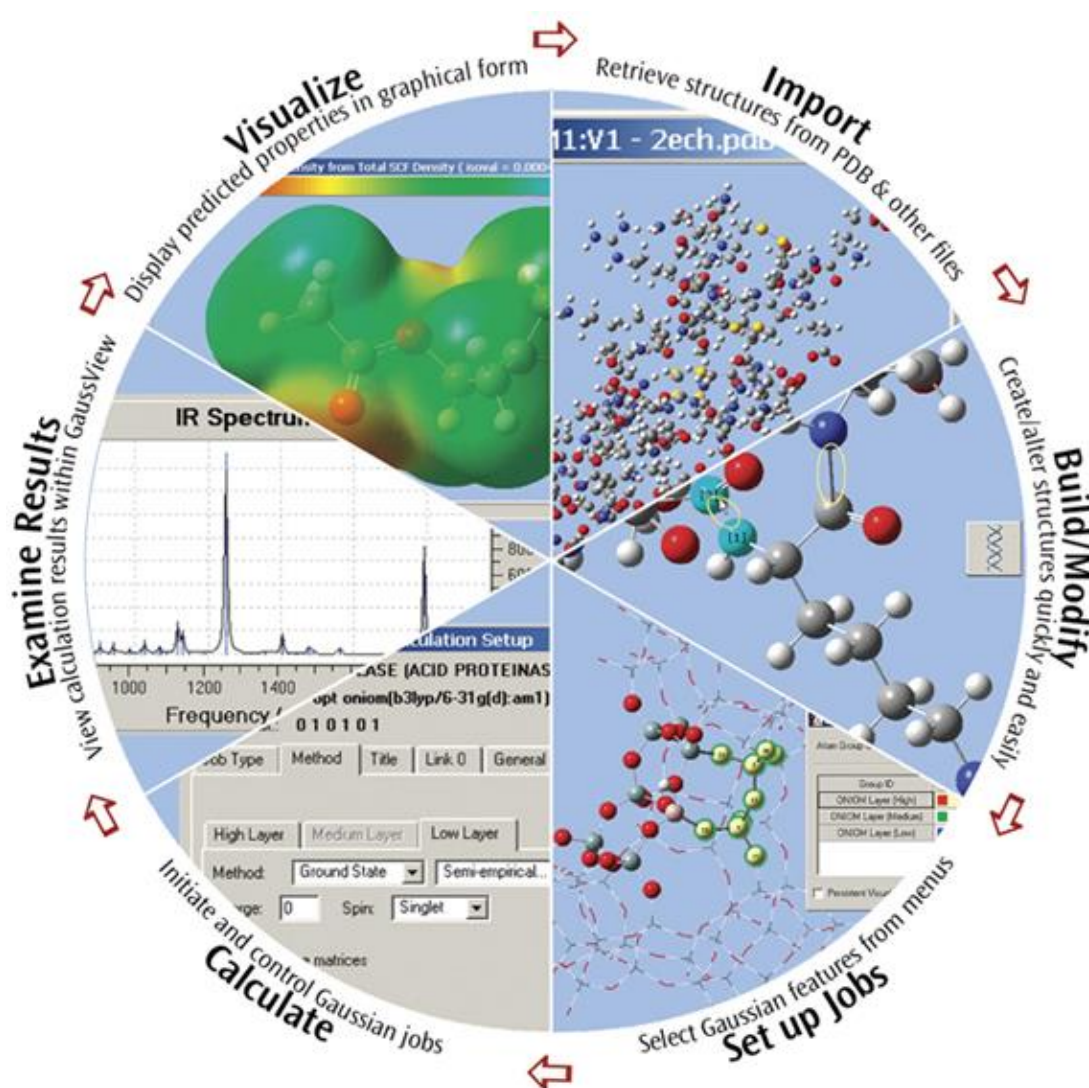


苯硫醇的  $Fe_2S_2$  簇——电荷为 -2 的开壳单线体系——使用 Gaussian 片断猜测计算来模拟反铁磁耦合。每个铁原子和桥连硫原子被放置在各自的片断中, 每个苯硫醇类似地形成一个片断, 总共有 8 个片断。各片断的电荷和多重度都在图中表明, GaussView 5 会自动把这些数值放在 Gaussian 任务的作业控制段中。

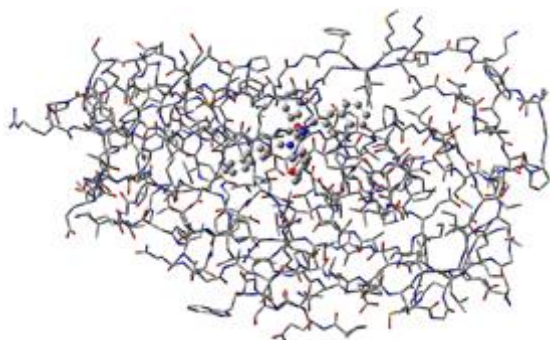
## GaussView 5 : 强化视图，延伸化学

GaussView 是 Gaussian 最先进而强大的图形接口。使用 GaussView，你可以导入或构建你感兴趣的分子结构、设置、启动、检测和控制 Gaussian 的计算、检索并查看结果，所有这些都离不开它的使用。

GaussView 5 包括许多为使处理化学方面的大体系变得方便直观而设计的新特性。它还提供 Gaussian 09 中所有新的建模方法和特性的全面支持。这份简单的介绍为你带来使用 GaussView 5 研究 Gaussian 09 计算的分子和反应的快速入门。我们邀请您尝试使用这些技术来研究您的分子。



## 操作和模拟大分子

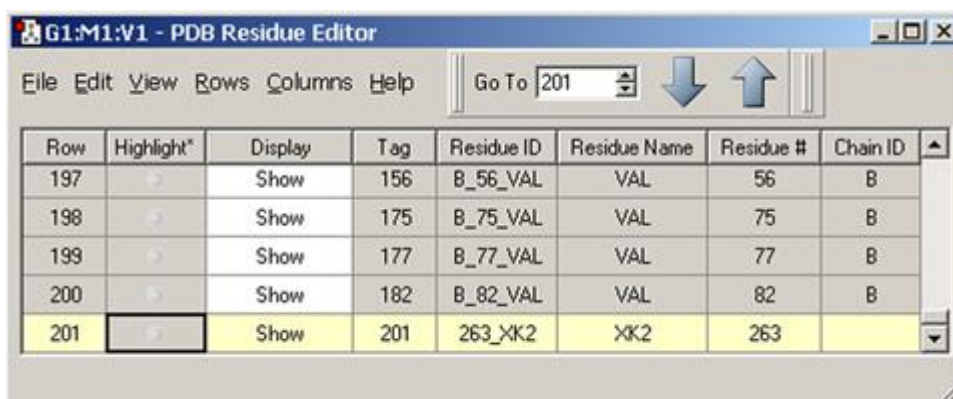


GaussView 5 提供了研究大分子体系的每一个阶段的特性，从自 PDB 文件中导入分子，修改结构特征和设置 Gaussian 09 的 ONIOM 计算，到对最终结果进行观察和作图。GaussView 还能够导入许多其他流行的结构交换格式。

### GaussView 5 为从 PDB 文件中导入和处理结构提供了综合支持：

- 从多结构文件中选择所需要的结构；
- 根据客户需求自动或手动对所有原子添加氢原子；
- 对单个或多个残基、肽链、螺旋或其他定义号的结构实体有选择地添加氢原子；
- 高亮显示/选择个别残基或二级结构中的原子；
- 对鼠标选择的任何一个原子快速确定残基归属；
- 根据许多可变条件轻易地指定 ONIOM 各层原子；
- 在 Gaussian 09 计算中获取残基信息和检索 Gaussian 09 的结果。

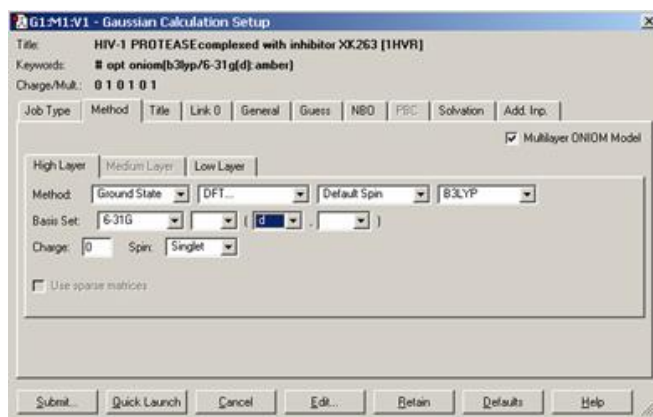
上面的分子是与一个抑制剂复合的 HIV 蛋白酶（类型 1），抑制剂用球棍方式显示。下面的对话框是 **PDB Residue Editor**，它提供了一个在残基基础上与大分子进行交互的便利方式。这里，按名字将残基进行排列，并处理抑制剂中的原子。我们将继续使用其他工具来指定 ONIOM 各层原子。



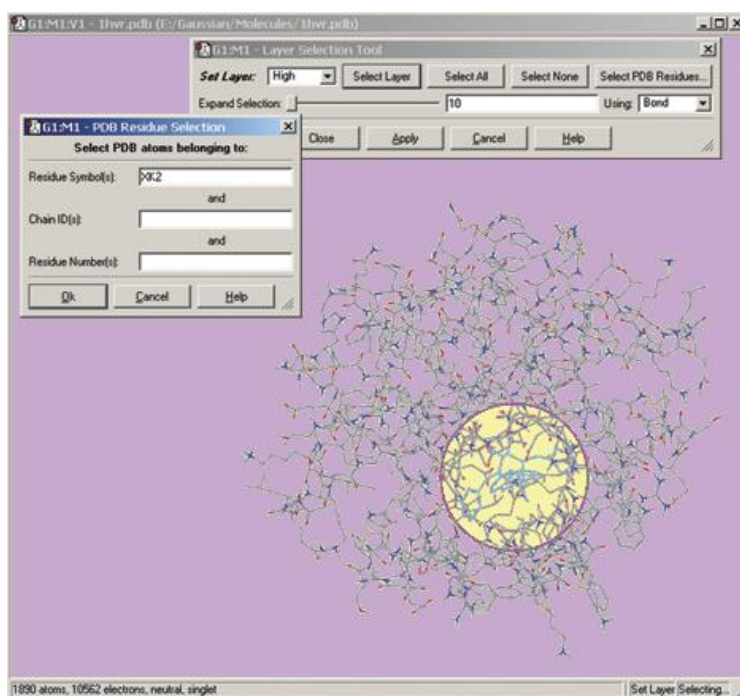
使用下面的对话框设置并运行 Gaussian 09 的计算。勾选了 ONIOM 计算的复选框，利用 **Method** 面板中



的各层组件选择合适的化学模型。准备好后，点击 **Submit** 按钮，将启动 Gaussian 09 的计算。

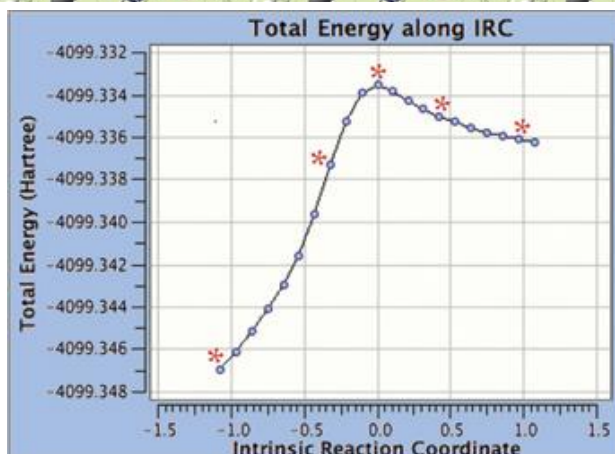
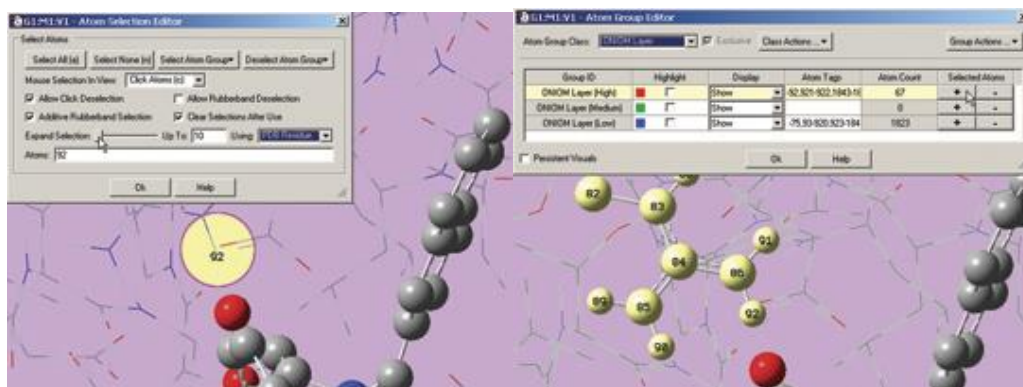


Gaussian 09 的 ONIOM 方法是专门用来研究生物方面的大分子的。GaussView 5 包含了多种指定 ONIOM 不同层原子的方法，从而使问题划分到不同建模精度/计算代价的区域。下面的插图描述了那个熟悉的 **Layer Selection Tool**。使用它在复合物中选择特定的残基。

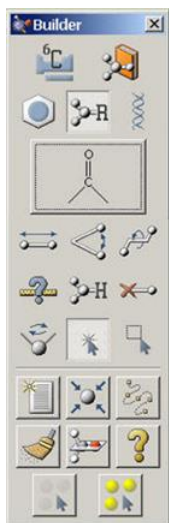


下面两幅插图描述了 GaussView 5 中引入的特性，利用这些特性把靠近抑制剂的残基添加到高层（High layer）。首先，放大复合物中相关部分，用鼠标选择附近的一个原子（中间的插图）。使用 **Atom Selection Editor** 的 **Expand Selection** 滑动条，将选择扩大到包含那个原子的整个残基。一旦选好合适原子，使用

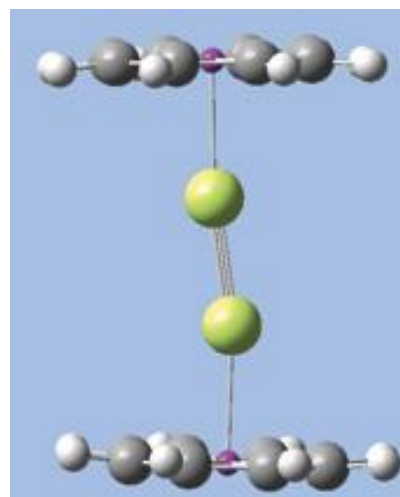
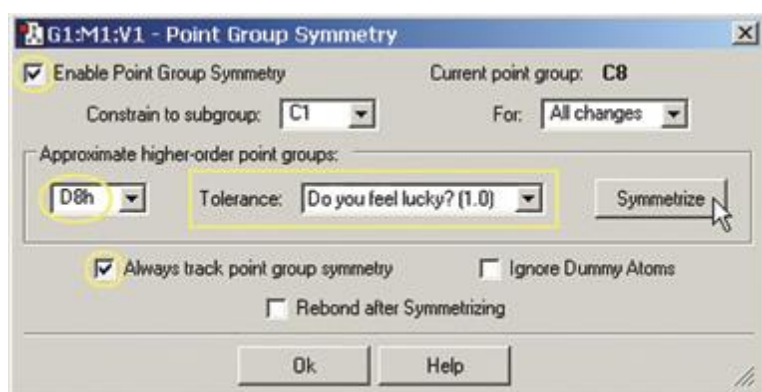
用这种方式继续选择并添加附近的残基，直到完成高层。



## 构建分子：比以往更容易



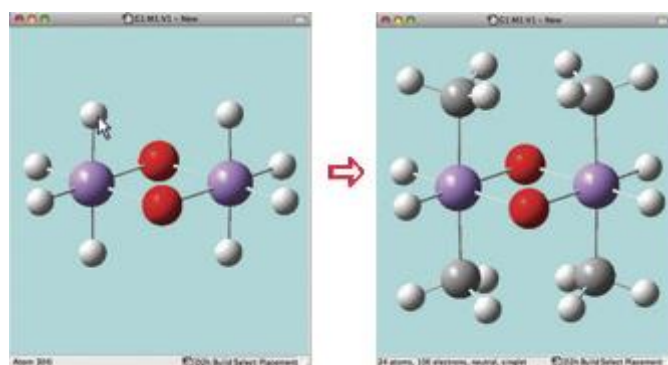
GaussView 早已提供了强大的分子构建特性，而 GaussView 5 则大大地扩充了这一技能。我们将示范性地介绍其中的一些特性，我们在这个小册子的封面左下方构建了一个双铀茂络化合物（diuranium metallocene）体系： $\text{U(II)}_2(\eta^8\text{-COT})_2$  [bis( $\eta^8$ -cyclooctatetraene) diuranium]。这个分子具有  $D_{8h}$  对称性。Gaussian 计算预测的分子轨道也展示在封面插图上。



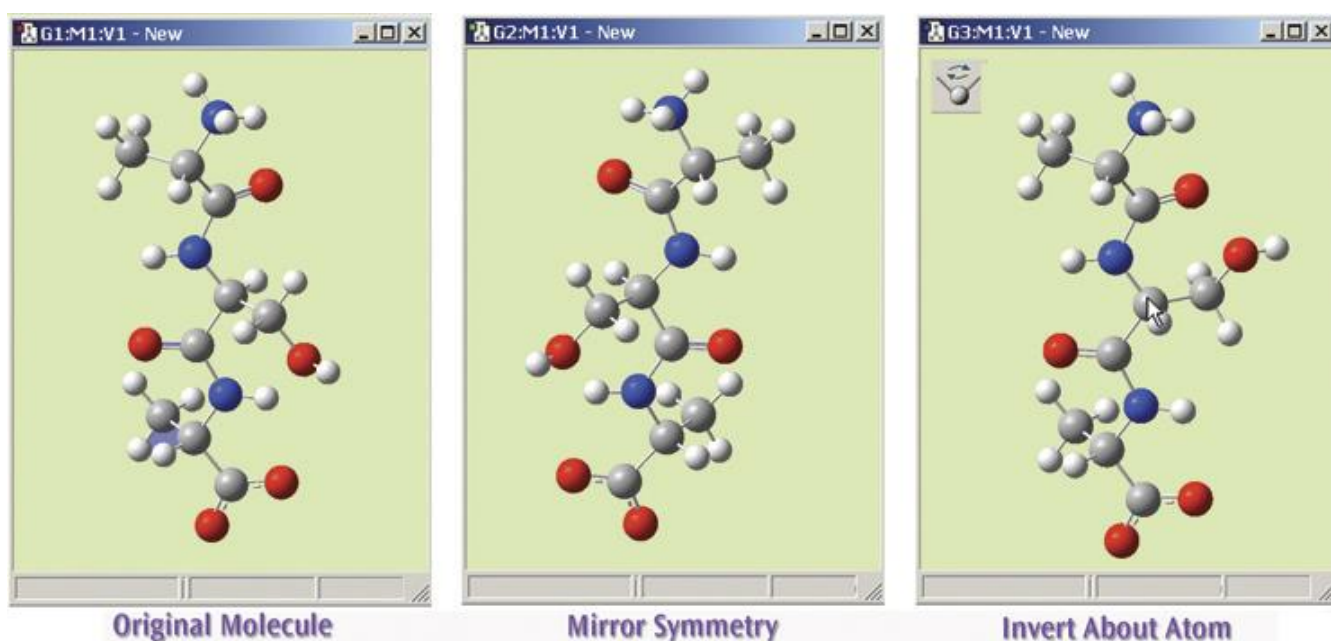
设置对称性以及最终的结构

## 下面的插图描述了 GaussView 5 提供的其他高级构建特性

在下面的插图中，我们看到 GaussView 5 点组对称性另一方面的特性。这里我们对这个桥铁复合物 ( $D_{2h}$ ) 实行点组对称性连续跟踪。点击左边铁原子上方的氢原子同时选择四面体碳原子，甲基会自动添加到四个等价对称的氢原子上。



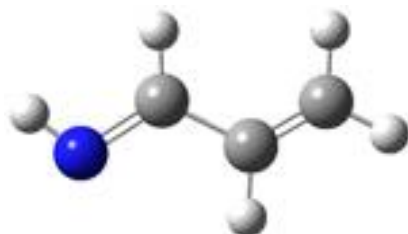
最后一副插图显示 Mirror Symmetry 和 Invert About Atom 的操作特性，该功能分别翻转整个分子的对称性或者关于一个已选原子进行倒置。原来的分子显示在左边，中间的图片显示了使用 Mirror Symmetry 后的三肽分子。右边的图片则显示了通过点击中心碳原子(光标所示)使用 Invert About Atom 后的结果。





## 考察分子轨道和其他表面

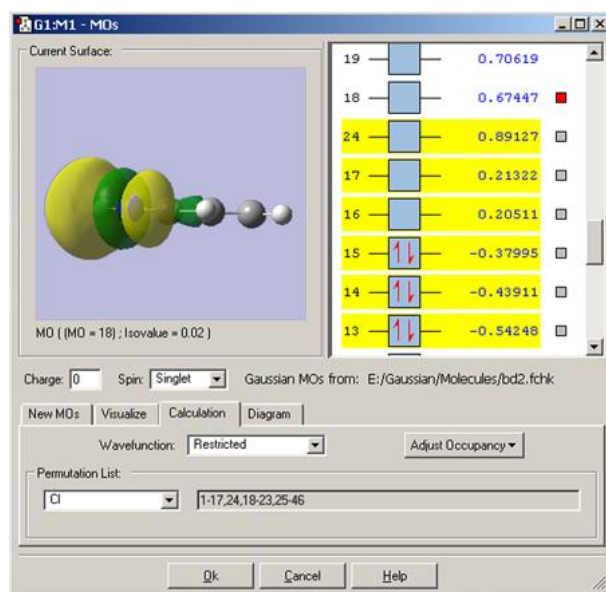
考察分子轨道和其他分子性质的空间分布在很多时候都非常有用。MOs 对话框能够提供关于键连和其他化学性质的重要信息。将它们可视化对修改随后的 Gaussian 09 计算初始猜测和为 CASSCF 方法选择活性空间都非常有用。



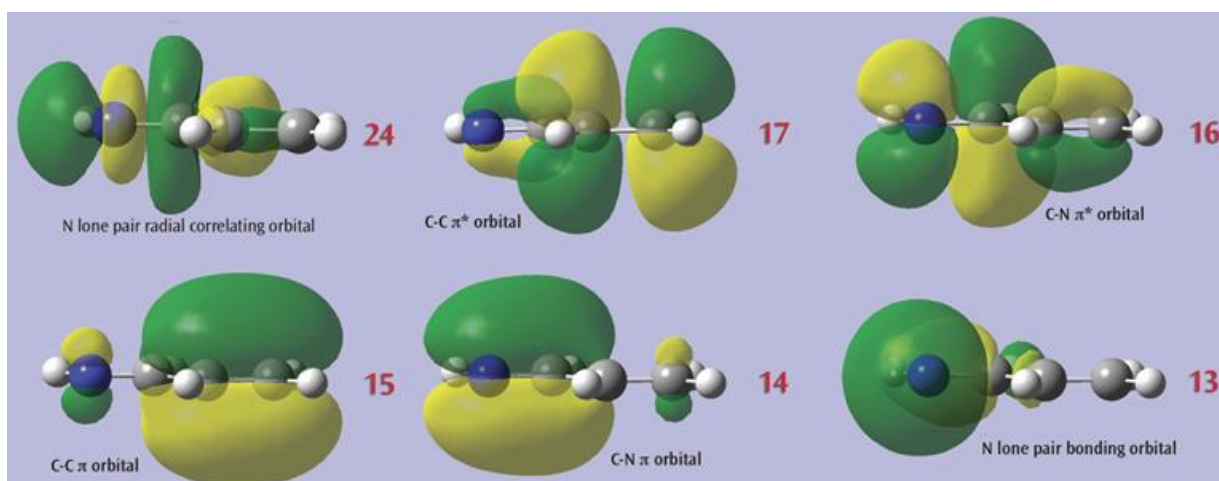
在这个例子里，我们来看看  $C_3H_4NH$  的分子轨道。我们打算使用 6 个轨道和 6 个电子的活性空间对这个分子进行 CASSCF 计算。由于我们对  $n-\pi^*$  过渡态感兴趣，因此我们需要选择对应于  $C=C$  和  $C=N$  键的  $\pi$  和  $\pi^*$  轨道，一个是对应于氮单电子对的键轨道，另一个是与之相关的轨道（在右上角标记了“radial correlating”的轨道）。

我们使用 GaussView 5 的 MOs 对话框的功能来考察多重分子轨道：LUMO (16)、HOMO (15) 和附近的轨道。我们在 5 个与 HOMO 和 LUMO 有关的邻近轨道找到  $\pi$ ,  $\pi^*$  and N 单电子对键轨道 轨道 13-17。然而，轨道 12 和轨道 18 都没有在能够描绘相关轨道的分子平面内出现节点（轨道 18 显示在下图中）。我们接着考察更高的轨道，在轨道 24 找到了我们想要的。然后对轨道进行重排序。因为这是一个闭壳体系，我们不需要在轨道间移动任何电子，但是如果合适的话，对话框允许你这样做。

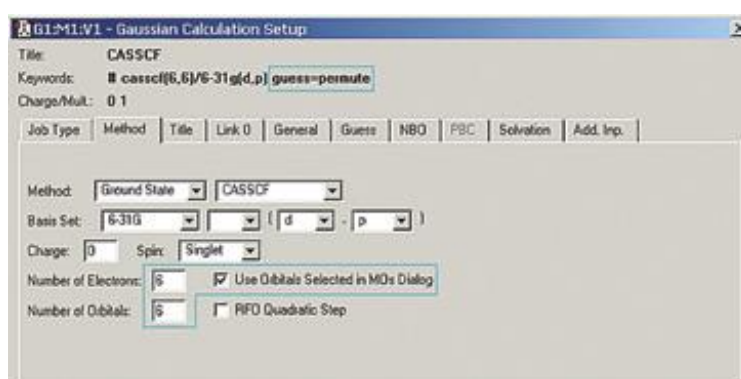




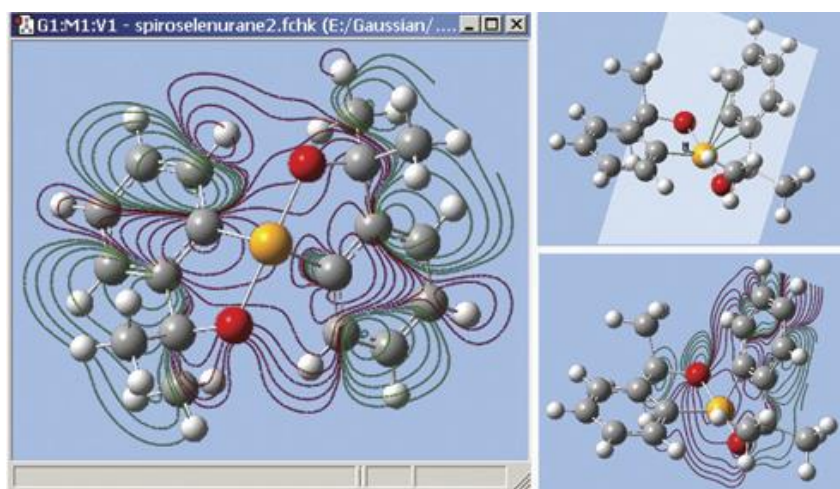
下面展示最后一组选为活性空间的轨道：



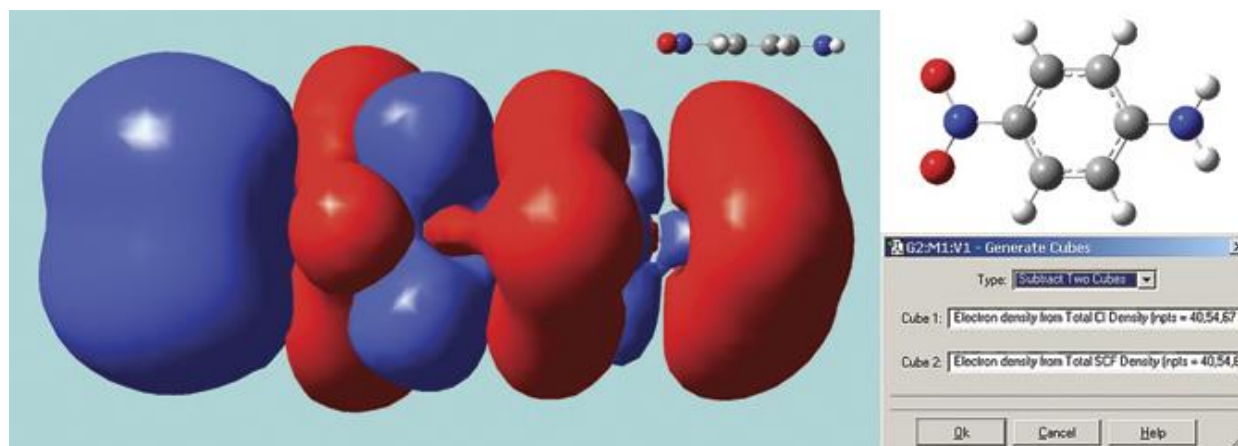
当在 Method 面板中勾选 Use Orbitals Selected in MOs Dialog 复选框，Gaussian 任务中将会保留这些轨道重排，并且相关关键词和附加的输入部分也将会自动添加。我们还可以使用它所提供的场（fields）为计算任务设置活性空间特征：



将我们刚刚考察的轨道可视化成透明表面图，我们就能够同时看到分子中的原子。这里还有几种其他方法来显示这种体积结果。例如，左上角的图片展示了通过 spiro-selenurane 的一个分子轨道的等高线平面。这一特性是高度可控的；两个小图说明了不同投影平面的选择——由三个中心原子和其包含的环所定义——和结果等高线的展示：



下面是固态模式的表面图。这是对-硝基苯胺的激发态和基态总原子密度的差密度，由 GaussView 5 使用它内置的立方操作工具计算得来（见对话框）。这个分子有一个平面构型；我们使用 B3LYP/6-31G(d)化学模型优化结构。激发态计算是在 Gaussian 09 中使用 Hirao 的 LC-BLYP 泛函进行的，它是一种正确处理电荷转移态的长程校正泛函，传统泛函在处理这种态时往往出现问题。生成的表面图显示激发态中的电荷转移，电子移向 NO<sub>2</sub> 基团（分子左侧）。



最后，下面的插图使用了映射表面特征。



在这里，21-噻吡啉的电子密度表面与电子势能一起显示。

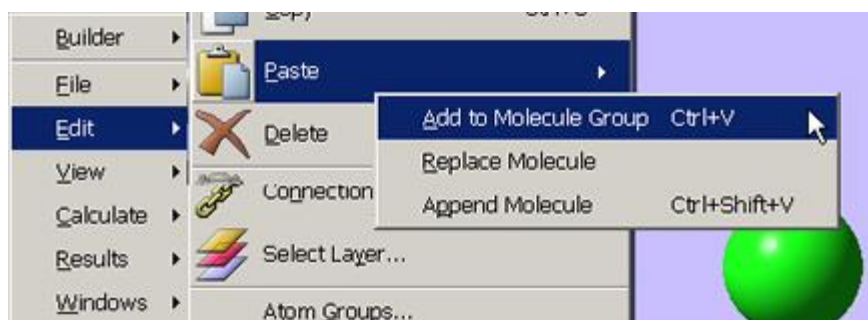
【参考文献】 E. P. Zovinka and D. R. Sunseri, J. Chem. Ed. 79 (2002) 1331

## 为 Gaussian 09 计算做准备

GaussView 5 通过大量针对特定计算类型进行图形化设置的设备，为所有 Gaussian 09 特性提供了综合支持。它能让您：

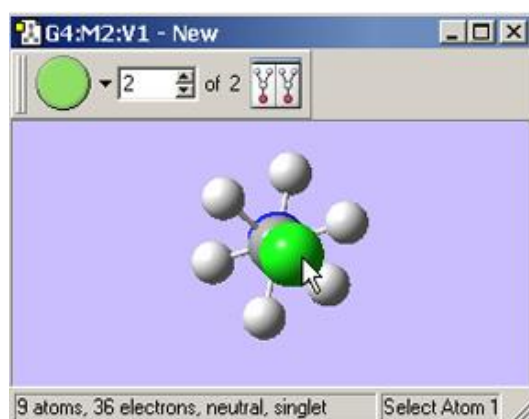
- 采用多种方式（就我们所知）为 ONIOM 层指定原子。GaussView 5 使指定分子力学原子类型和电荷也变得容易。
- 为 CASSCF 和其他任务重排和重现分子轨道。
- 添加和重定义冗余内坐标（redundant internal coordinates）。
- 在优化过程中指定冻结原子/坐标。
- 为 STQN 过渡态优化设置原子等价性（Set atom equivalence for STQN transition optimizations.）（见下面）。
- 为片断猜测/平衡计算定义片断，包括指定特定与片断的电荷和自旋多重度（见第 9 页）。
- 为简正分析选择原子（频率计算）。
- 为 NMR 自旋-自旋耦合指定原子。
- 为聚合物、2D 表面和晶体结构构建单元格，用于周期边界条件（periodic boundary conditions, PBC）计算（见第 13 页）。

我们使用过渡态结构优化右边的分子作为这个 SN2 反应的例子。在 GaussView 5 中创建计算是非常容易的事情。首先，我们构建反应物。然后使用 Edit=>Copy=>Add to Molecule Group 将结构复制到同一分子组里的第二个框。正如 Opt=QST3 所需的，这样生成了第二个有着相同的原子顺序的分子：



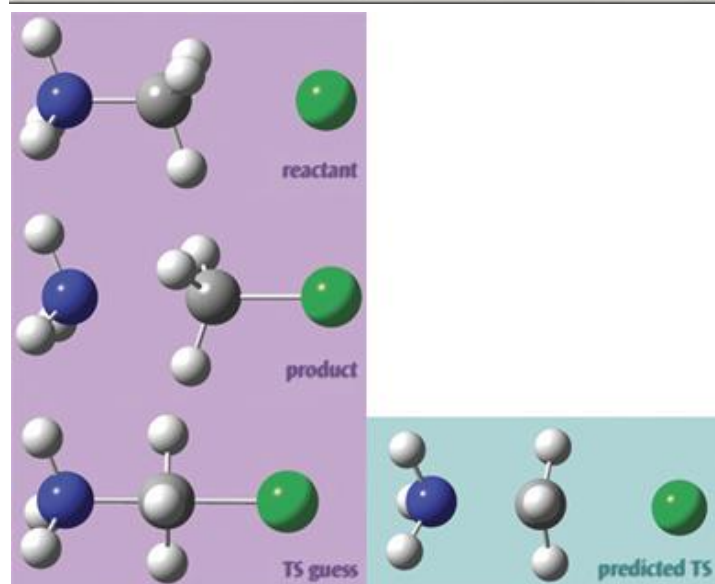
我们接着将那个结构转成产物。提示：旋转至端视图是一种确保合适的片断叠合和氢原子定位的便捷方式：



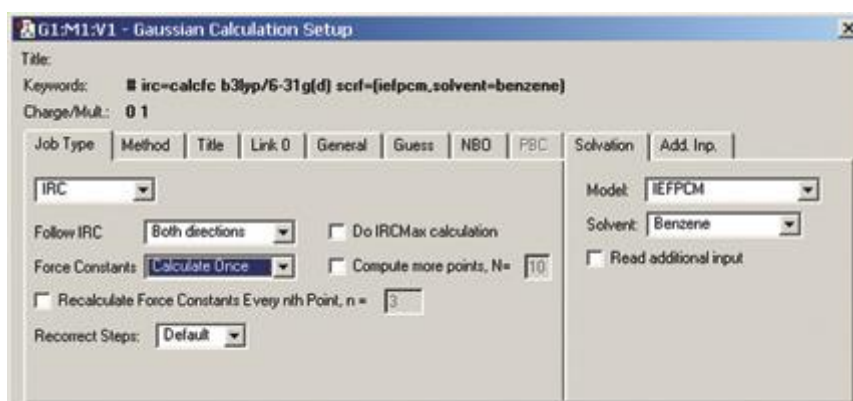


最后，我们用同样方法创建过渡态猜测结构。

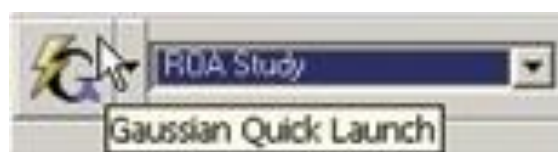
Gaussian Calculation Setup 对话框提供了一个基于菜单的 Gaussian09 关键词与选项的接口。下面的对话框显示了用于 TS 优化的设置：



**Gaussian Calculation Setup** 对话框会对你所做的任何选择自动显示相关设置，可变选项栏提供了所有主要的 G09 特性的访问（参见下面的溶液中 IRC 计算的例子）：

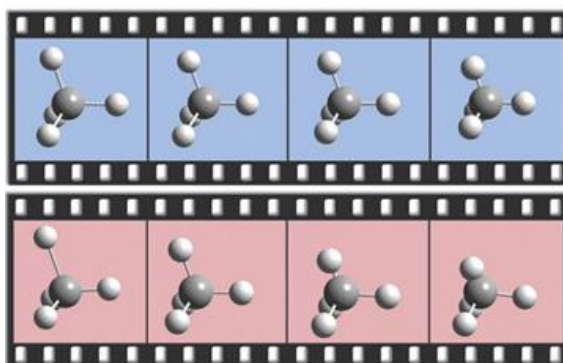


QST3 任务的设置对话框也说明了 GaussView 5 另一个 Gaussian 09 便捷特性：计算方案。从 **Scheme** 菜单中选择一个项目，一步设置即可将一组保存好的关键词和选项用于当前的任务中。与 **Gaussian Quick Launch** 特性同时使用方案，能让您单击即可启动当前分子的计算：

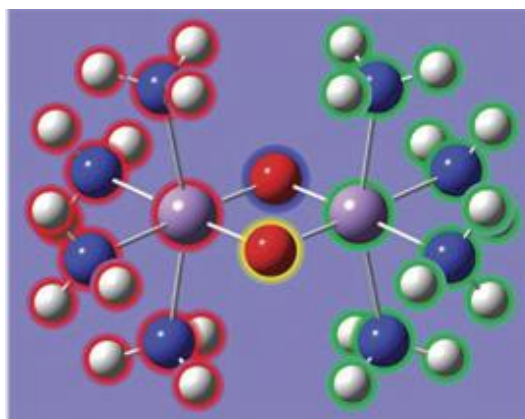


下面的对话框显示 GaussView 5 用于为分子中不同原子定义同位素的设施，包括多重同位素。他们能用于后续的频率分析中。在这个例子中，定义了两个同位素：一个是标准（最丰富的）同位素，另一个是其中一个氢原子被氚取代。右边的动画说明了在对称 H 拉伸简正模式中产生的变化；氚代原子是玫瑰色背景中各帧运动被延长的原子。

G2:M1:V1 - Atom List Editor					
File Edit View Rows Columns Help					
Row	Highlight	Display	Symbol	Mass (Isotope 0)	Mass (Isotope 1)*
1		Show	C	Default	Default
2		Show	H	Default	Default
3		Show	H	Default	3
4		Show	H	Default	Default
5		Show	H	Default	Default



下面的插图描绘了 GaussView 5 对用于 Gaussian 09 平衡、片断猜测和相关计算中定义片断的支持。为了用 Gaussian 09 模拟反铁磁耦合，我们将使用 **Atom Group Editor** 来定义片断和设定特定于片断的电荷与自旋多重度。关于这个计算的详细讨论请参见这个网页：[www.gaussian.com/g\\_tech/afc.htm](http://www.gaussian.com/g_tech/afc.htm)。



G1:M1:V1 - Atom Group Editor

Atom Group Class: Gaussian Fragment ☒ Exclusive Class Actions ... Group Actions ...

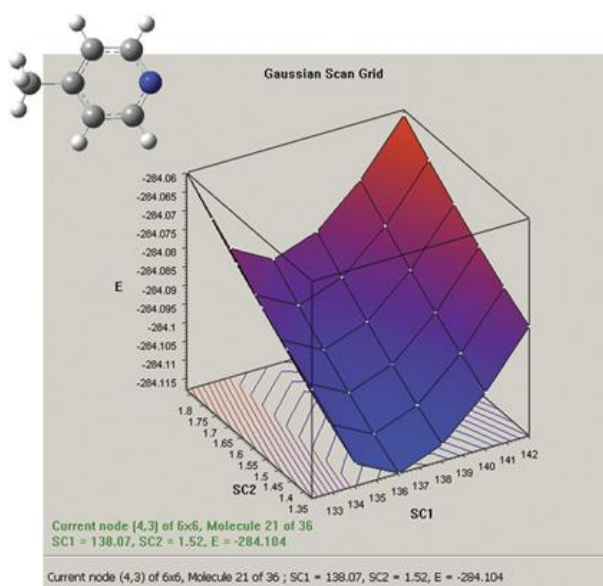
Group ID	Highlight	Atom Tags	Atom Count	Charge	Electrons	Spin Mult	Unpaired Spins	Selected Atoms
Gaussian Fragment (1)	<input checked="" type="checkbox"/>	10,14-16,20-25,30,3	17	2	63	Sextet	Alpha	+ -
Gaussian Fragment (2)	<input checked="" type="checkbox"/>	11-13,17-19,26-29,3	17	2	63	Sextet	Beta	+ -
Gaussian Fragment (3)	<input checked="" type="checkbox"/>	3	1	-2	10	Singlet	Alpha	+ -
Gaussian Fragment (4)	<input checked="" type="checkbox"/>	2	1	-2	10	Singlet	Alpha	+ -

☐ Persistent Visuals Ok Help

## 绘图和光谱处理

除了我们已经看到过的各种表面图，GaussView 5 还提供预测光谱和其他用于图表的数值结果（比如第 3 页的例子）。线图与视图/动画关联，从而在线图或谱图上点击一个点或峰，将显示动画中对应的帧或改变该分子的当前视图。

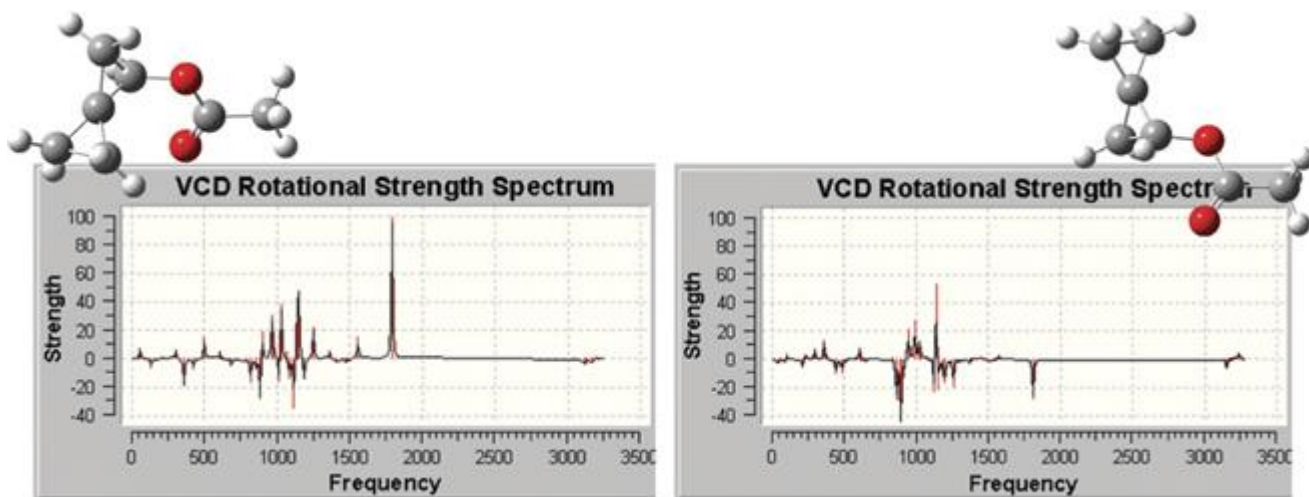
下面的图描绘了一个二元势能面扫描的结果如何制作一个三维表面图。这里的扫描变量是 C-甲基键长和 C-N-C 键角。图可以使用常规的鼠标操作进行旋转和缩放，点击表面上的一个点将激活相关分子组里对应的一帧。图片和数据都能保存成外部文件。



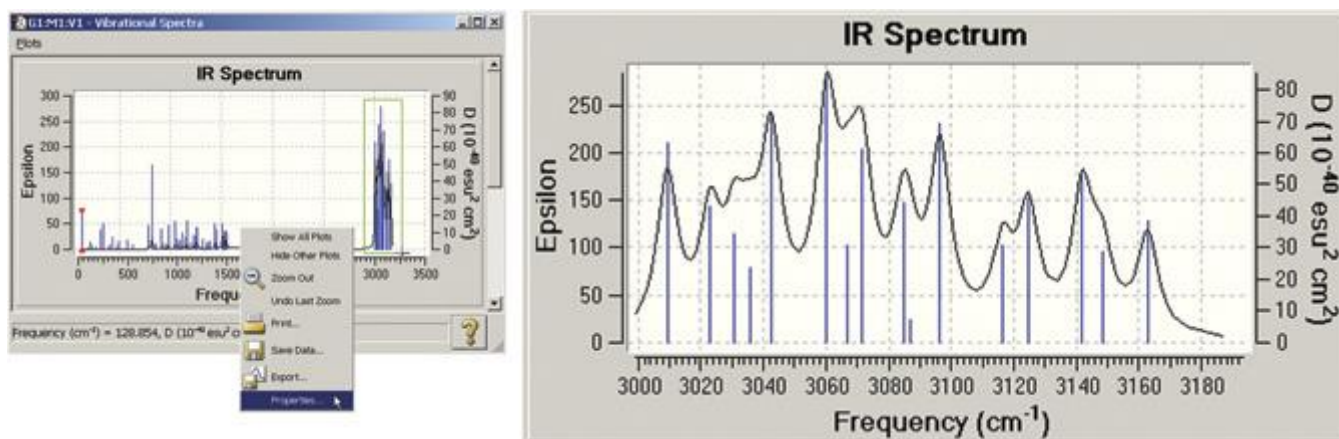
下面的图描述了由 GaussView 5 产生的光谱，包括 Gaussian 09 预测的所有类型。这里，我们看看一个手性 spiropentane 衍生物(R)-螺环戊烷醋酸((R)-spiropentyl acetate)的两个消旋体的 VCD 光谱。

【参考文献】F. J. Devlin, P. J. Stephens, C. Österle, K. B. Wiberg, J. R. Cheeseman and M. J. Frisch, J. Org. Chem. 67 (2002) 8090.



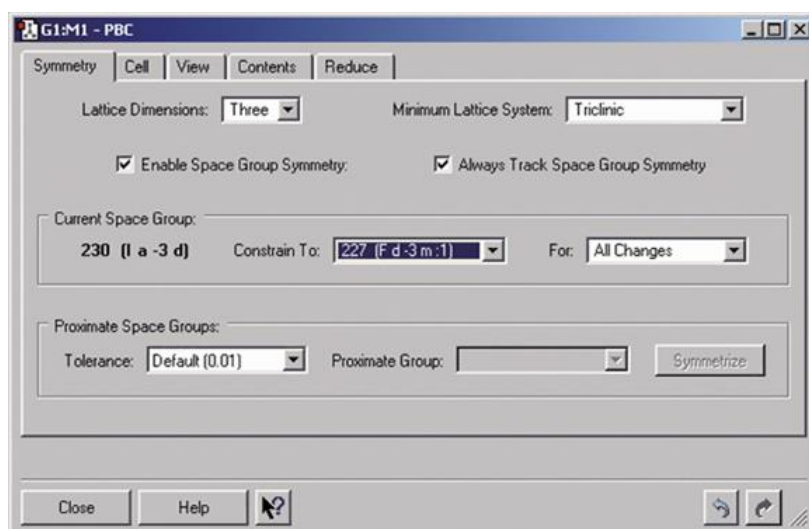


GaussView 5 还允许修改许多图表性质 ( 通过右键情景菜单 ): 倒置坐标轴、标准化数据 ; 等等。您还可以放大线图或谱图的局部。在下面的例子中 我们放大光谱上绿色标示的部分。左边的插图还显示了情景菜单。

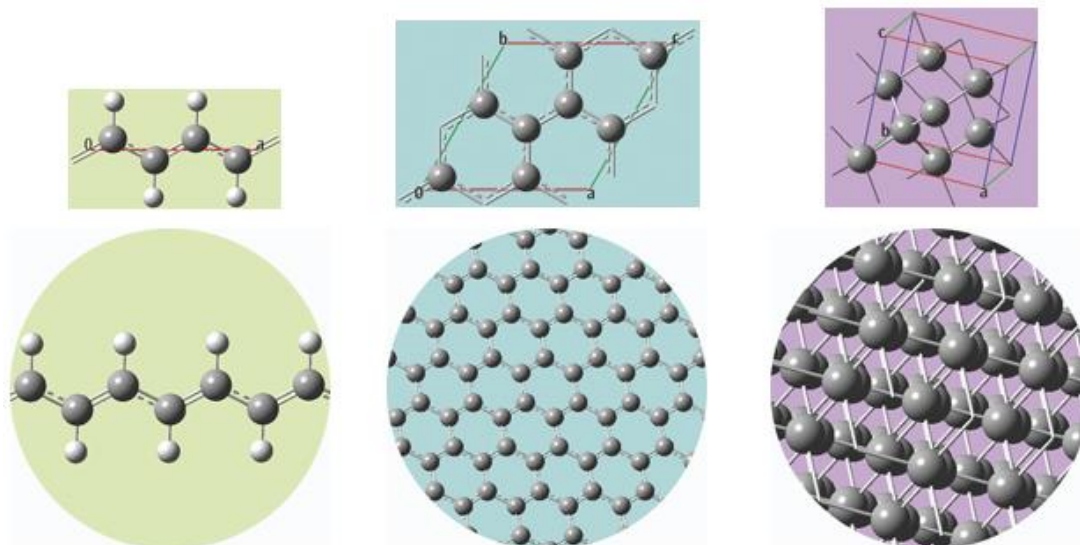


## 研究周期体系

Gaussian 09 能执行周期边界条件 ( Periodic Boundary Conditions , PBC ) 计算来模拟凝缩相周期体系：如聚合物、表面和晶体结构。GaussView 5 提供了一个强大的设备用于构建这样的体系和产生他们的原子坐标 ( molecule specification)。下面的对话框解释了空间群对称性能；金刚石的空间群则用于这个 3D 周期结构。



下面展示了基于碳原子的 1D、2D 和 3D 周期结构的单元格，以及他们模拟的反式聚醋酸乙烯酯聚合物、石墨片和金刚石晶体的多个单元。GaussView 5 会创建 PBC 计算，自动包括原子坐标 ( molecule specification)中的平移矢量。



## 联系我们

广州市墨灵格信息科技有限公司

地址：广州市天河区龙口东路 34 号龙口科技大厦 2002

邮编：510630

电话：020-38261356

电邮：[info@molcalx.com](mailto:info@molcalx.com)

主页：<http://www.molcalx.com.cn>

新浪微博：<http://weibo.com/molcalx>

腾讯微博：<http://t.qq.com/molcalx>

联系我们所要一个月的免费测试用软件