

계산 화학

■ 실험목적

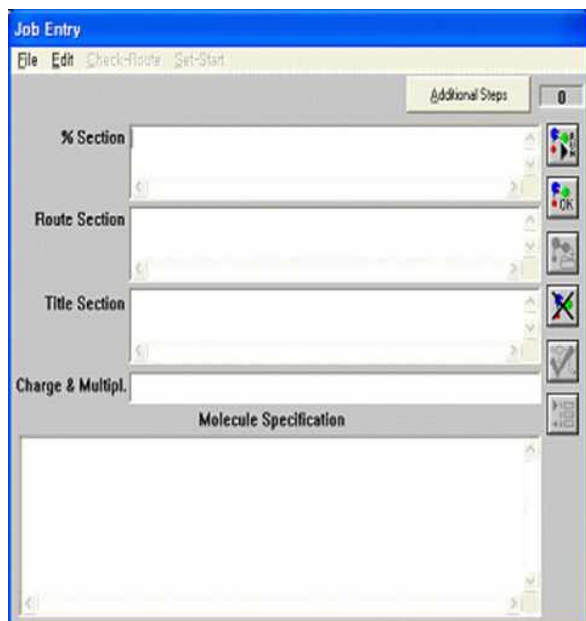
- Gaussian 09W라는 상업용 양자화학 계산 프로그램 패키지를 이용하여, 관심 대상 분자들에 대한 single point energy, optimized energy, frequency calculation 등을 계산을 함으로써 양자화학에 대한 이해를 돕는다.

■ 기구

- Gaussian 09, GaussView

■ 실험방법

※ G09 Input 파일 작성



Job Entry	
% Section	하드웨어적인 설정
Route Section	계산방법 HF, MP2, MP4, CI 등 원자크기 sto-3g, 6-31g, etc 계산옵션 opt, freq, etc. 입력
Title Section	제목입력
Charge & Multipl.	전하(S) 및 다중도(2S+1)를 입력
Molecular Specification	분자의 구조를 입력(Z-Matrix)

※ Z-matrix 구성방법

- 1) 분자를 그린다.
- 2) 1번 원자를 설정한다.
- 3) 1번 원자에서 다른 원자들의 연속적인 숫자를 지정한다.
(원자들의 번호 설정 시 사용하기 편한 순으로 지정하는 것에 유의한다.)
- 4) 1번 원자에서 시작하여 원자들을 순서대로 아래 방향으로 나열한다.
- 5) 1번 원자는 origin으로 어떠한 측정값을 지니지 않는다.
- 6) 2번 원자를 확인하기 위해, 1번 원자로의 결합길이만을 설정한다.
- 7) 3번 원자를 할당하기 위해, 1번 원자로부터의 결합길이와 3번 원자와 1번, 2번 원자들 사이의 결합각을 설정한다. (결합각은 세 원자들 사이의 각이다.)
- 8) 현재의 원자를 설정할 때 이전의 설정된 원자들을 사용할 수 있음을 기억하라.
(예, 이것은 5번 원자를 정의할 때, 7번 원자를 참고할 필요 없음)
- 9) 4번 원자와 모든 다른 원자들을 설정하기 위해, 결합길이와 결합각과 이면각을 포함하여야 한다.
※ 이면각 : 원자와 3개의 다른 원자들로 형성된 평면 사이의 각

예시 : H₂O₂

① 수소원자를 H1로 설정한다.

z-matrix는 다음과 같이 작성한다.

H1

② 나머지 산소원자하나를 O2로, 그리고 나머지는 O3, H4로 명명한다.

③ O2원자는 H1원자와의 거리를 작성한다. (원자가 두 개일 때 결합길일까지 작성)

H1

O2 1 0.96

④ 원자 O3은 O2와의 결합길이를 작성하고, H1과의 결합각을 작성한다. (원자가 세 개일 때, 결합길이, 결합각까지 작성)

H1

O2 1 0.96

O3 2 1.48 1 120.0

⑤ 마지막 H4는 O3와 결합길이, O2와 결합각, H1과의 이면각을 작성한다. (원자가 네 개이상일 때, 결합길이, 결합각, 이면각까지 작성)

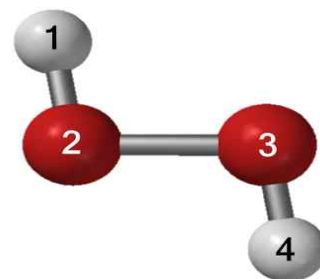
H1

O2 1 0.96

O3 2 1.48 1 120.0

H4 3 0.96 2 120.0 1 180.0

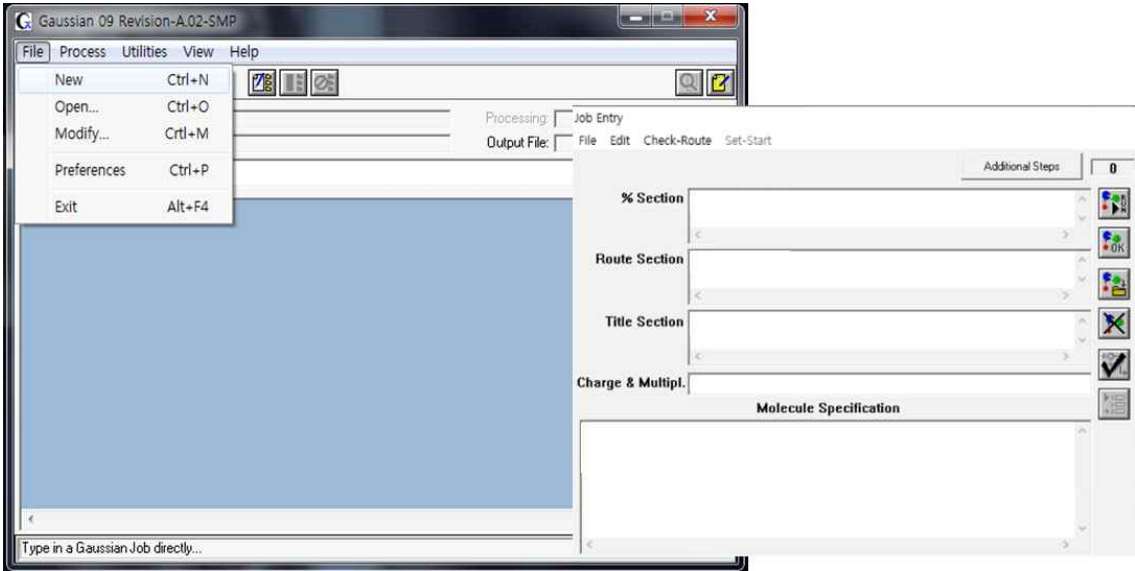
※ 참고 : 길이 단위는 Å, 결합각은 소수점까지 적어야 한다.



Bond Lengths (pm)							
Bond	Length	Bond	Length	Bond	Length	Bond	Length
Single Bonds							
H—H	74	N—H	101	Si—H	148	S—H	134
H—F	92	N—N	146	Si—Si	234	S—S	204
H—Cl	127	N—P	177	Si—O	161	S—F	158
H—Br	141	N—O	144	Si—S	210	S—Cl	201
H—I	161	N—F	139	Si—F	156	S—Br	225
		N—Cl	191	Si—Cl	204	S—I	234
C—H	109	N—Br	214	Si—Br	216		
C—C	154	N—I	222	Si—I	240	F—F	143
C—Si	186					F—Cl	166
C—N	147	O—H	96	P—H	142	F—Br	178
C—O	143	O—P	160	P—Si	227	F—I	187
C—P	187	O—O	148	P—P	221	Cl—Cl	199
C—S	181	O—S	151	P—F	156	Cl—Br	214
C—F	133	O—F	142	P—Cl	204	Cl—I	243
C—Cl	177	O—Cl	164	P—Br	222	Br—Br	228
C—Br	194	O—Br	172	P—I	246	Br—I	248
C—I	213	O—I	194			I—I	266
Multiple Bonds							
C=C	134	N=N	122	C≡C	121	N≡N	110
C=N	127	N=O	120	C≡N	115	N≡O	106
C=O	123	O ₂	121	C≡O	113		

1. Single point energy 계산 (예, H₂O)

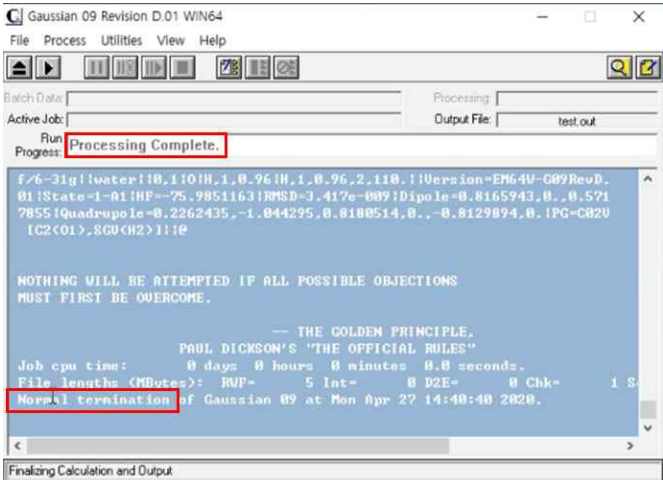
- 1) gaussian 09w 프로그램을 실행한다.
- 2) File > New를 눌러 input정보를 넣을 창을 띄운다.



- 3) 정보를 입력한다.

하드웨어적인 설정	% Section	%chk=H2O.chk
계산방법 HF, MP2, MP4, CI 등 원자크기 sto-3g, 6-31g, etc 계산옵션 opt, freq, etc. 입력	Route Section	#hf/6-31g
제목입력	Title Section	H2O sp
전하(S) 및 다중도(2S+1)를 입력	Charge & Multipl.	0 1
분자의 구조를 입력(Z-Matrix)	Molecular Specification	O1 H2 1 0.96 H3 1 0.96 2 110.0

- 4) %Section 옆의 Run 버튼 클릭한다.
- 5) output file 저장 : 저장위치를 지정하고 파일 저장한다.
- 6) 프로세스가 완료되면 Processing Complete가 뜬다.



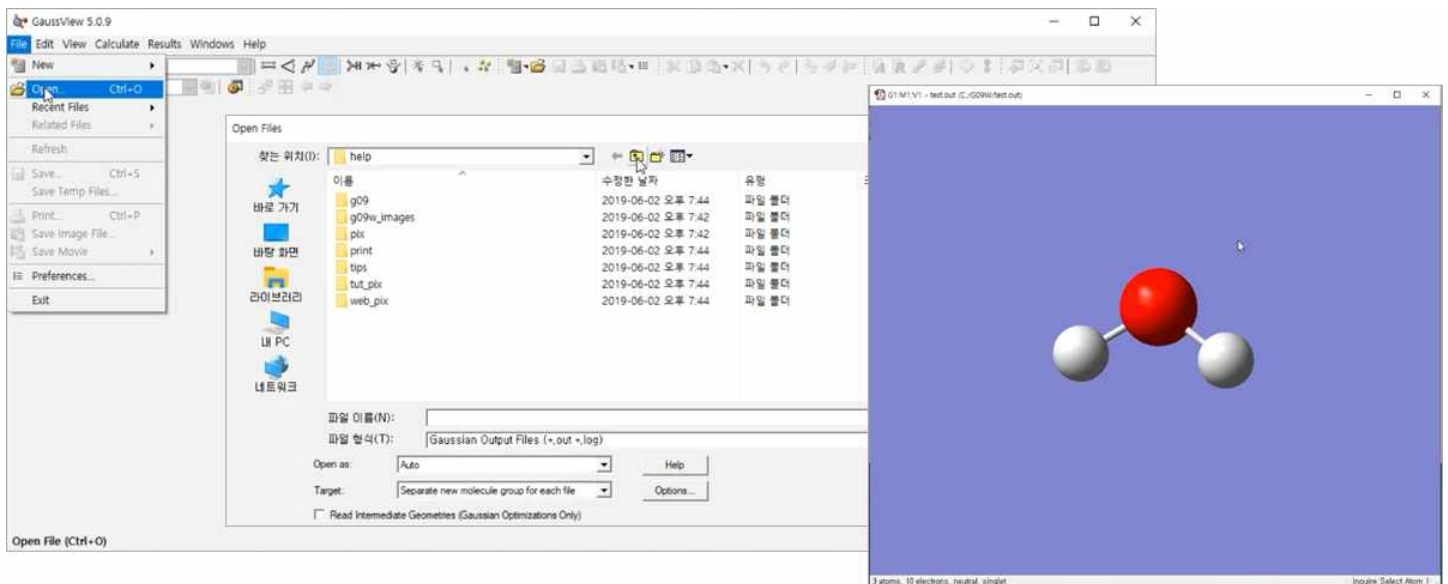
7) 저장한 output 파일을 연다.

① 메모장에서 열기

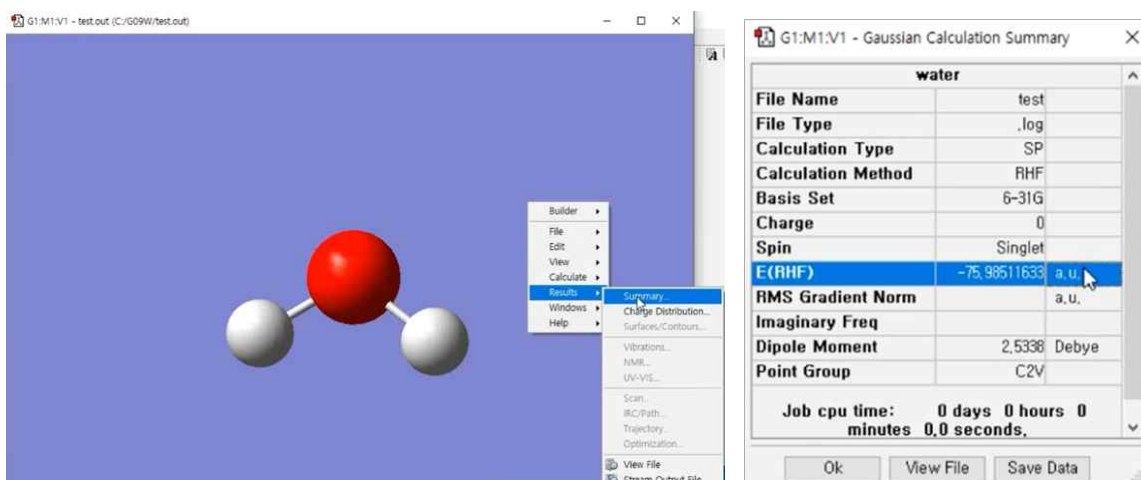
```
single point - 메모장
파일(F) 편집(E) 설정(S) 도움말(H)
Charge= 0.0000 electrons
Dipole moment (Debye):
  X= -3.7116  Y= 2.2783  Z= 0.0000  Tot= 4.3551
Quadrupole moment (Debye-Ang):
  XX= -16.6833  YY= -17.8568  ZZ= -16.6437
  XY= -1.5518  XZ= 0.0000  YZ= 0.0000
Octapole moment (Debye-Ang**2):
  XXX= -13.4372  YYY= 1.6873  ZZZ= 0.0000  XYY= 0.4780
  XXY= -1.3402  XXZ= 0.0000  XZZ= 0.0711  YZZ= -0.2600
  YYZ= 0.0000  YXZ= 0.0000
Hexadecapole moment (Debye-Ang**3):
  XXXX= -71.2217  YYYY= -42.1911  ZZZZ= -12.6814  XXXY= -10.4100
  XXXZ= 0.0000  YYYYX= -12.5465  YYYZ= 0.0000  ZZZX= 0.0000
  ZZZY= 0.0000  XXYY= -21.9634  XXZZ= -15.7658  YYZZ= -9.8116
  XXVZ= 0.0000  VVXX= 0.0000  ZZXY= -3.7756
N=H= 7.391378791640+01  E=N= -5.9389642182780+02  KE= 1.8933957935290+02
Symmetry A'  KE= 1.8109884883860+02
Symmetry a'' KE= 0.248720512220+00
1|1|UNPC-UNPC|SP|RHF|6-31G|C1H2O2|PCUSER|11-Har-2005|0|HF/6-31G|Formic acid single point|0,1|H|C,1,1,2|O,2,1,1,1,120,0,2,1,3,1,120,3,180,0|H,4,0,2,105,1,0,0|Version-x86-Win32-G98RevA.11|State=1-A'|HF=-188.6116718|RHS0=5.743e-005|Dipole=-1.0535741,0,-1.3512121|PG-CS [SG(C1H2O2)]|0
SCIENCE AND PEACE WILL TRIUMPH OVER IGNORANCE AND WAR
-- PASTEUR
Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 9.0 seconds.
```

② GaussView에서 확인

i) GaussView → File → Open



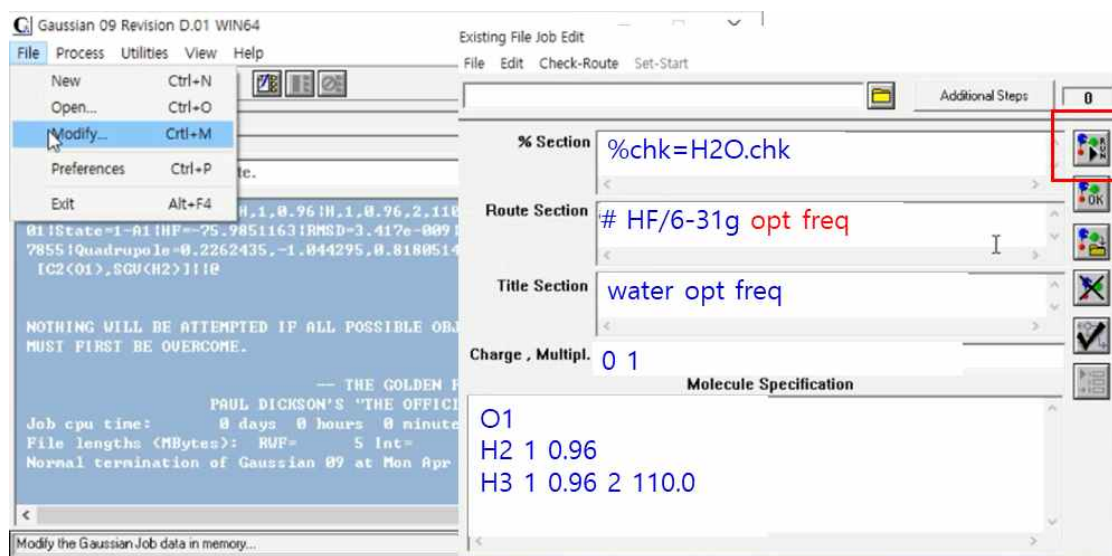
ii) 마우스 우클릭 → Results → Summary



Single point E: -75.98511633 a.u.

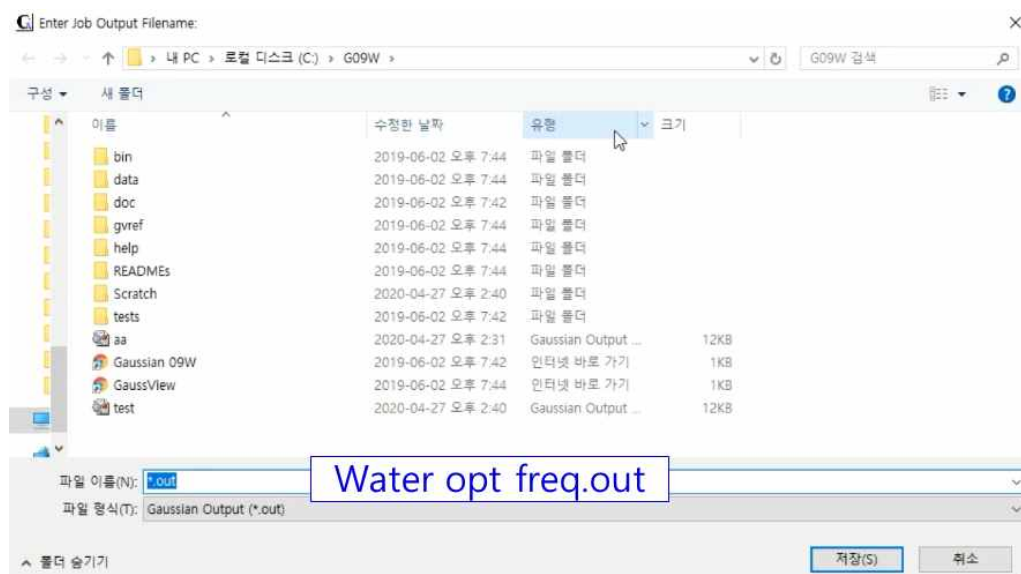
2. Optimization and Frequency energy 계산 (예, H₂O)

1) G09W → File → Modify → opt freq 입력 → RUN

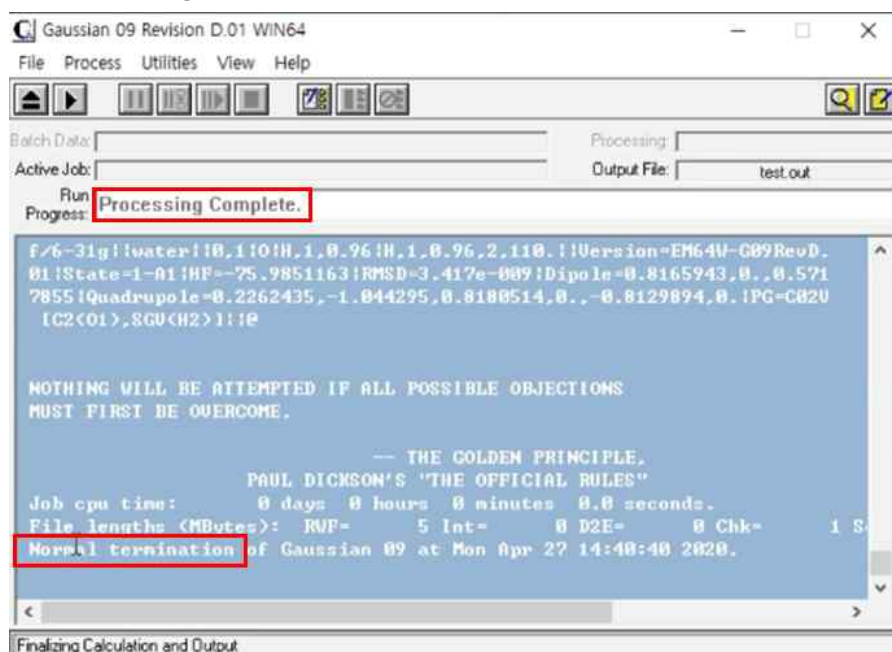


RUN클릭

2) output file 저장

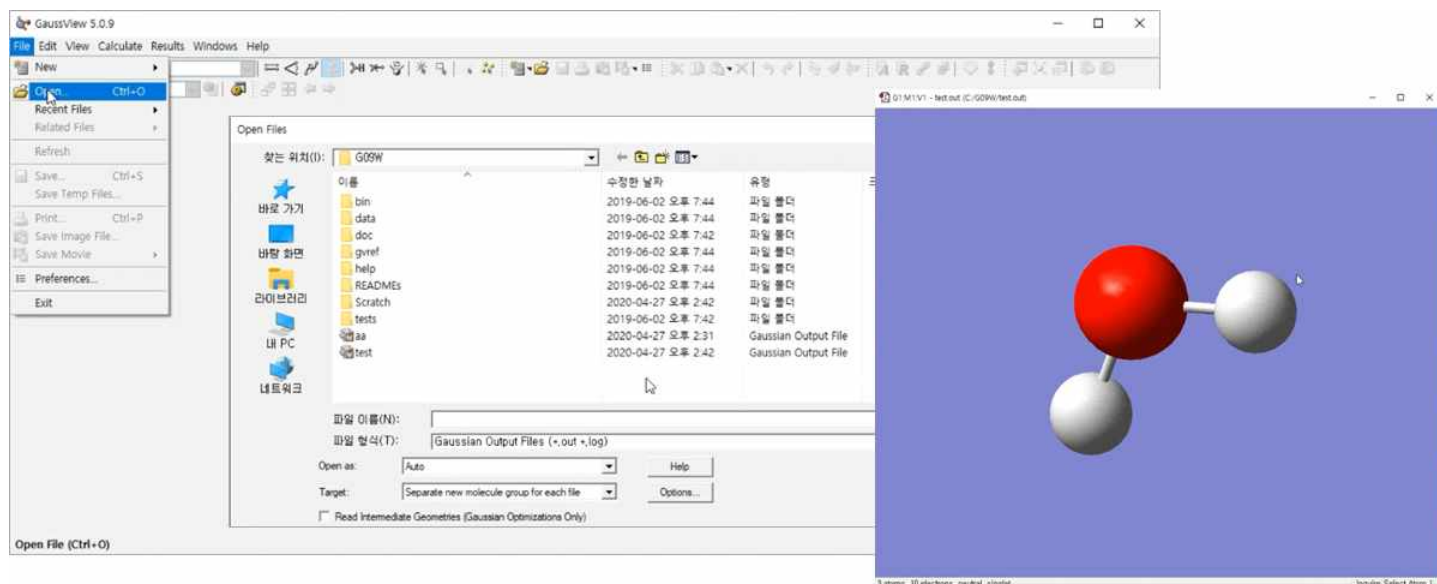


3) Processing Complete

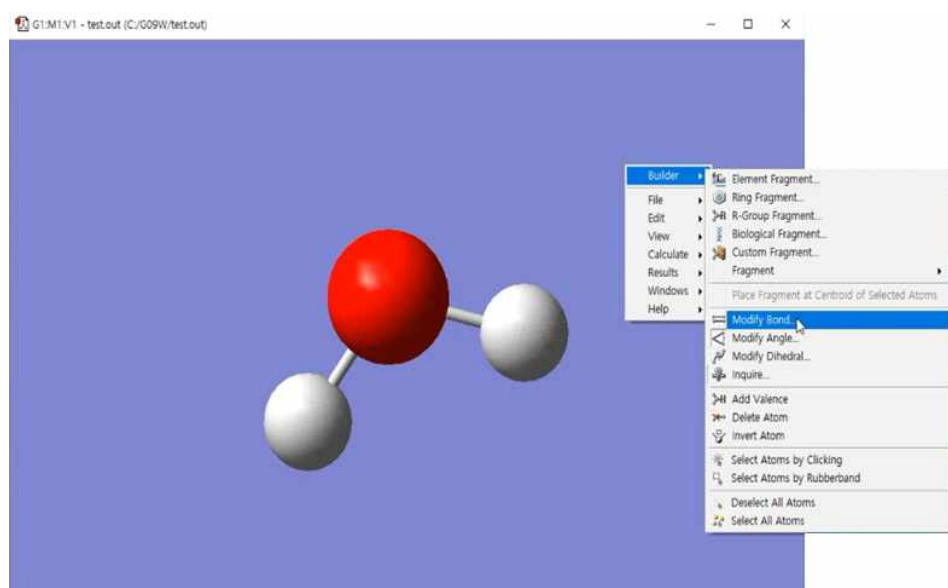


3. Optimized 결과확인

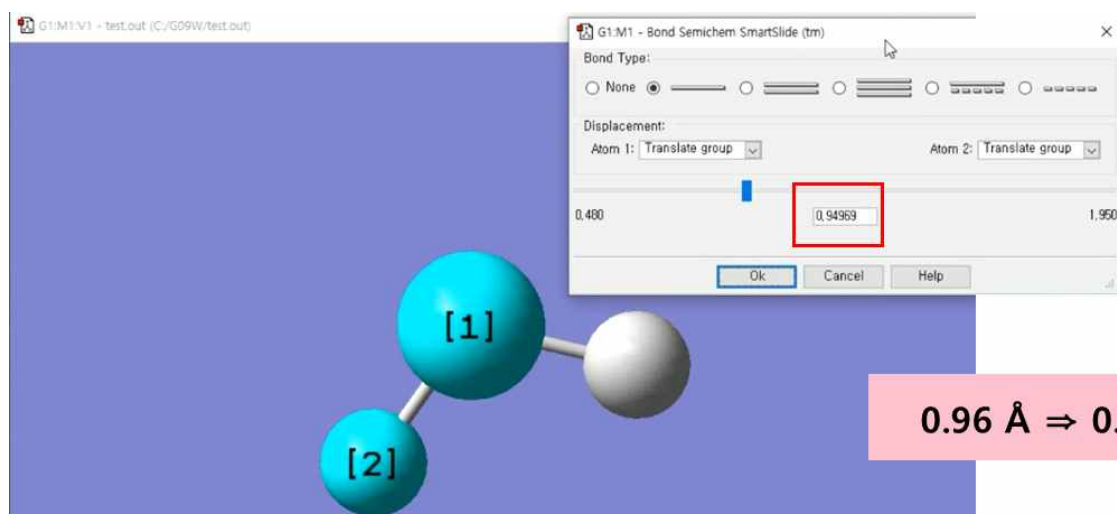
1) GaussView에서 저장한 output 파일 열기



2) Optimized bond 확인 : 마우스 우클릭 → Builder → Modify Bond

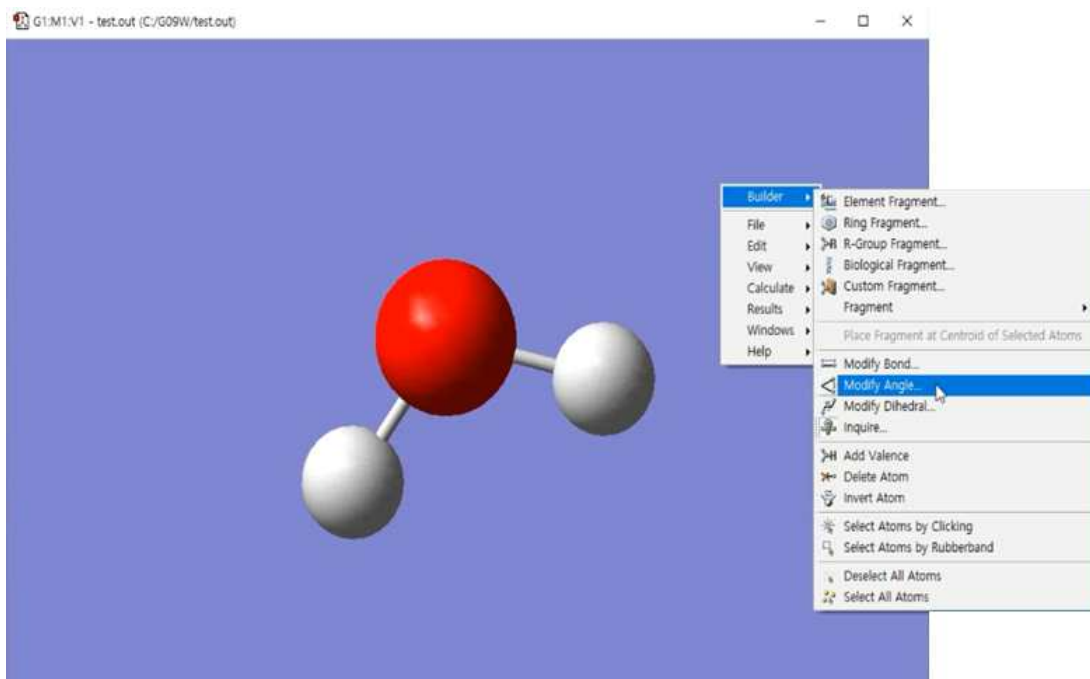


3) Optimized bond 확인 : 원하는 길이의 원자 선택

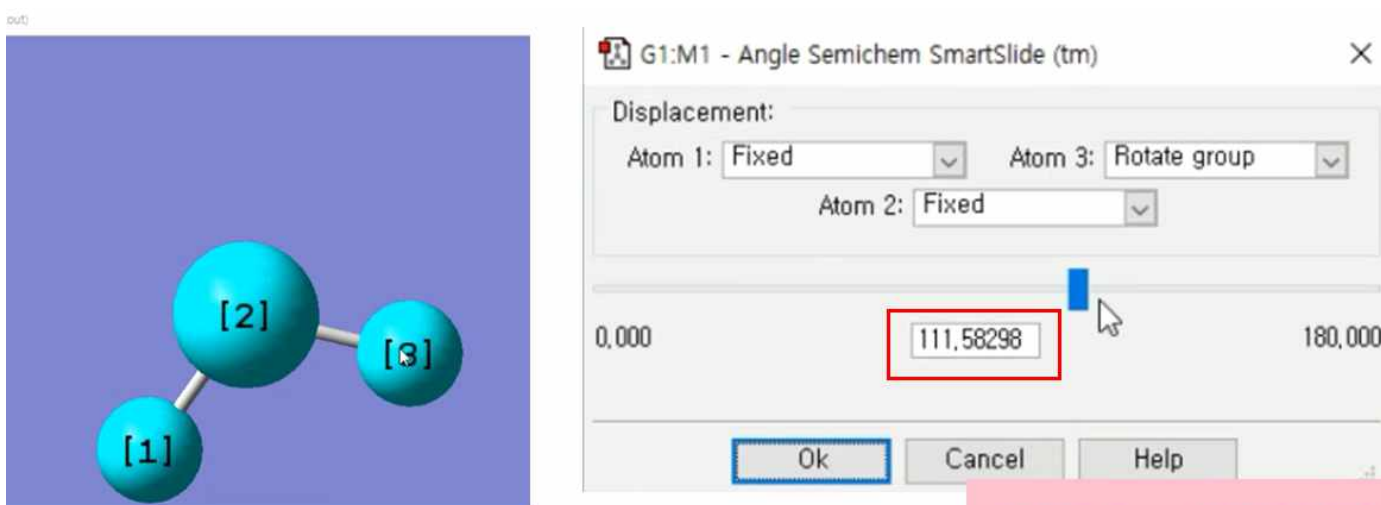


0.96 Å ⇒ 0.94969 Å

4) Optimized Angle 확인 : 마우스 우클릭 → Builder → Modify Angle

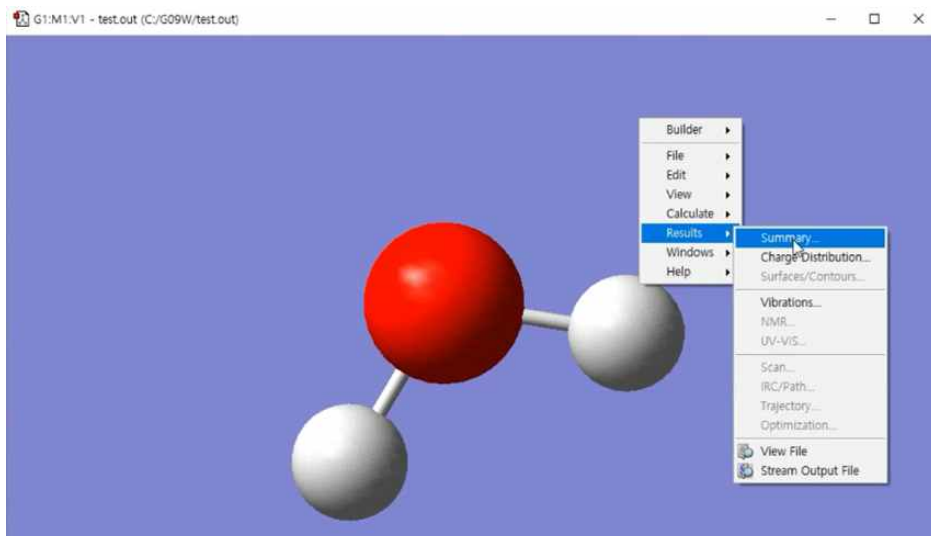


5) Optimized Angle 확인 : 원하는 각의 원자 선택

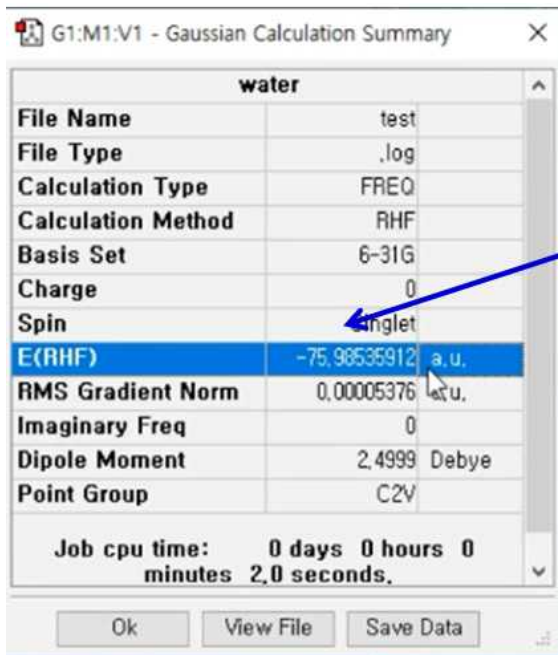


110.0 ° ⇒ 111.58298 °

6) Optimized Energy 확인 : 마우스 우클릭 → Results → Summary



7) Optimized Energy 확인 → Results → Summary



G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Summary

water	
File Name	test
File Type	.log
Calculation Type	FREQ
Calculation Method	RHF
Basis Set	6-31G
Charge	0
Spin	singlet
E(RHF)	-75.98535912 a.u.
RMS Gradient Norm	0.00005376 a.u.
Imaginary Freq	0
Dipole Moment	2.4999 Debye
Point Group	C2V
Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 2.0 seconds.	

Ok View File Save Data

Single point Energy : -75.98511633 a.u.

VS

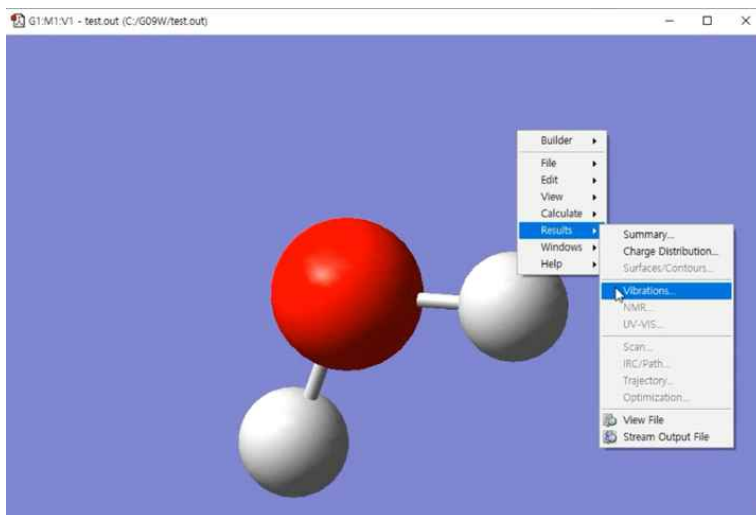
Optimized Energy : -75.98535912 a.u.

a.u. of energy : Hartree energy

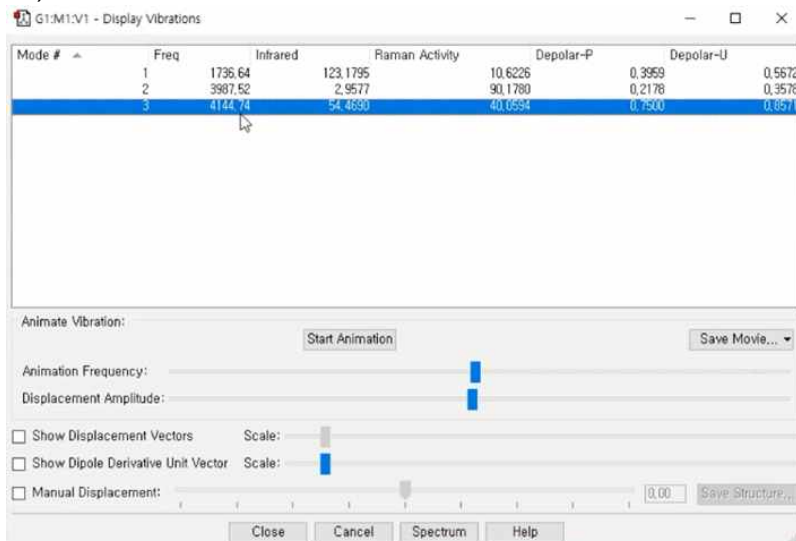
$$1HF = 4.65974394 \times 10^{-18} J$$

4. IR Resquency 결과확인

1) 마우스 우클릭 → Results → Vibrations



2) 진동모드수 확인



G1:M1:V1 - Display Vibrations

Mode #	Freq	Infrared	Raman Activity	Depolar-P	Depolar-U
1	1736.64	123.1795	10.6226	0.3959	0.5672
2	3987.52	2.9577	90.1780	0.2178	0.3578
3	4144.74	54.4650	40.0594	0.7400	0.0571

Animate Vibration: Start Animation Save Movie...

Animation Frequency: Displacement Amplitude:

Show Displacement Vectors Scale: Show Dipole Derivative Unit Vector Scale: Manual Displacement: 0.00 Save Structure...

Close Cancel Spectrum Help

진동모드수

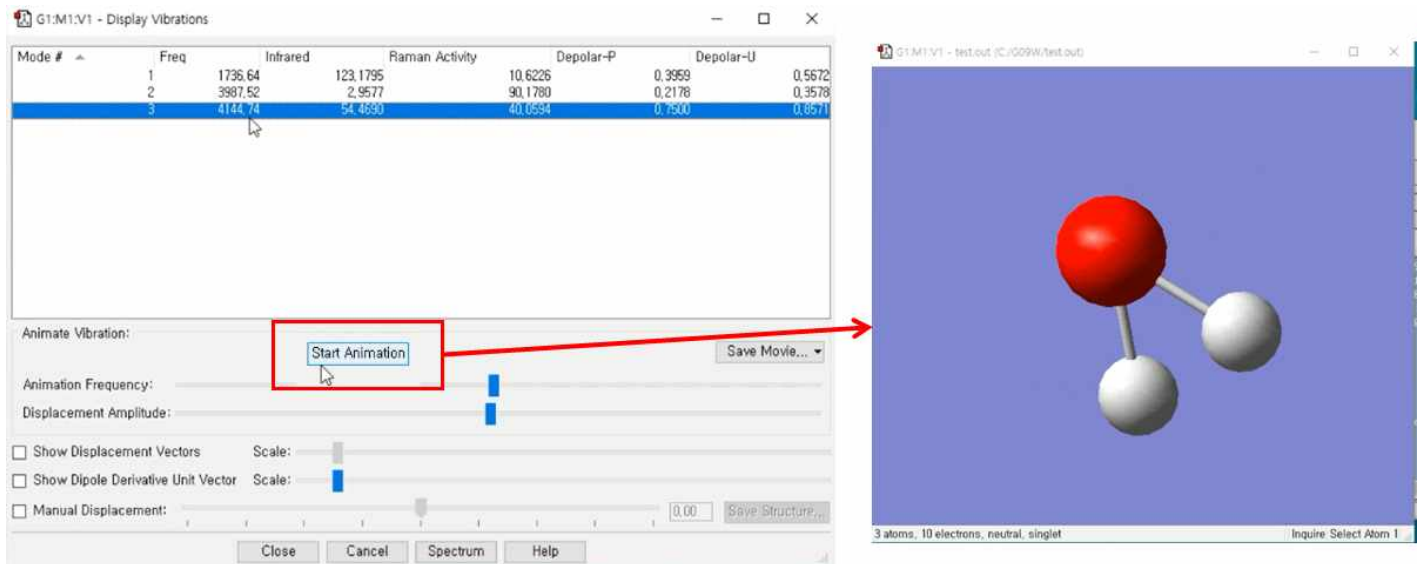
3N-6

선형분자 3N-5

N : 분자를 구성하는 원자수

예) $H_2O \Rightarrow 3 \times 3 - 6 = 3$

3) 진동모드 animation 확인



4) IR spectrum 확인

