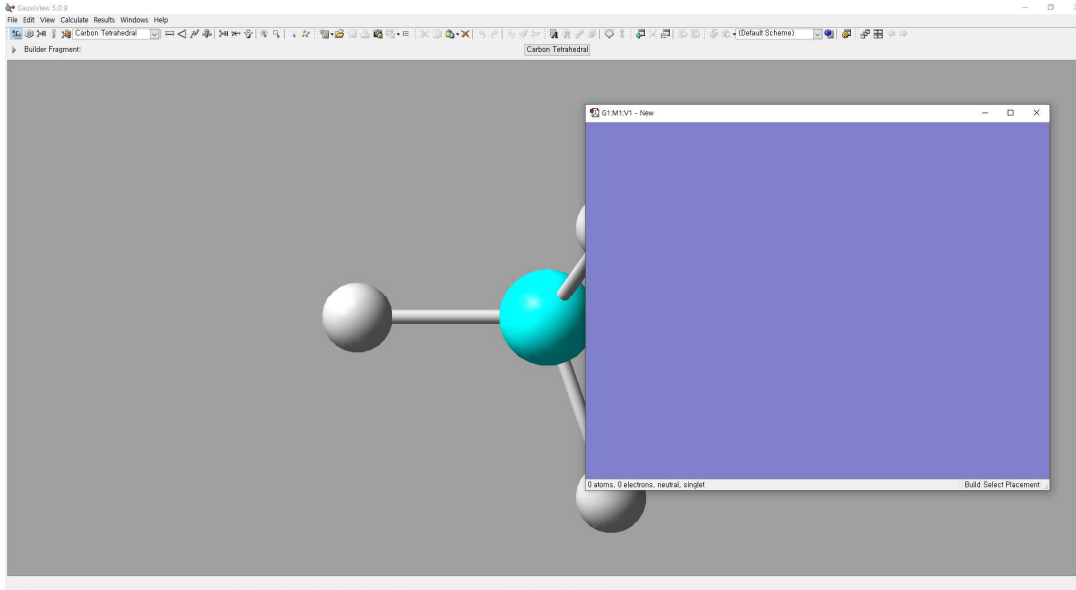


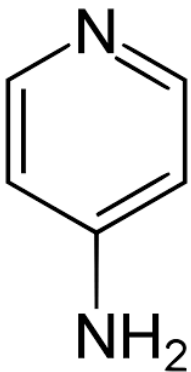
계산화학2 (IR 계산)

1. Gauss View 프로그램을 이용한 분자 모델링

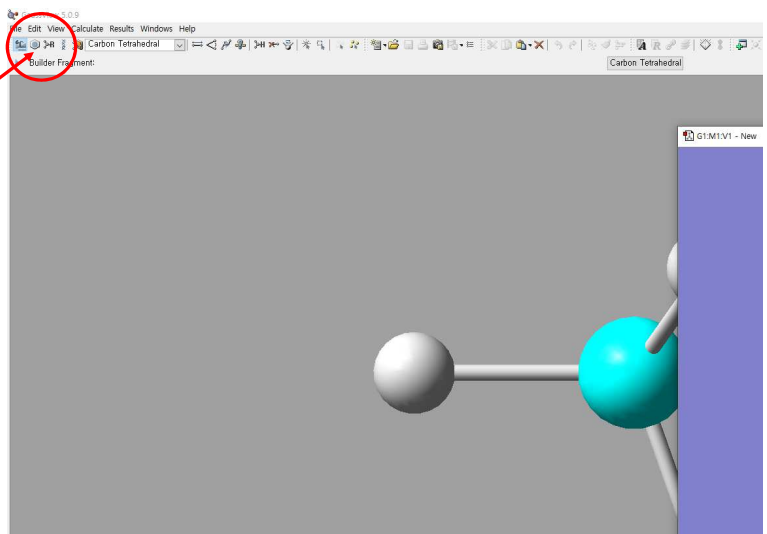


Gauss View 프로그램을 실행시키면 다음과 같은 창이 뜨는 것을 확인할 수 있다. 회색창에는 현재 모델링 할 분자에 대한 정보, 보라색 창은 실제로 모델링을 진행할 수 있는 공간이다.

계산화학2 (IR 계산)



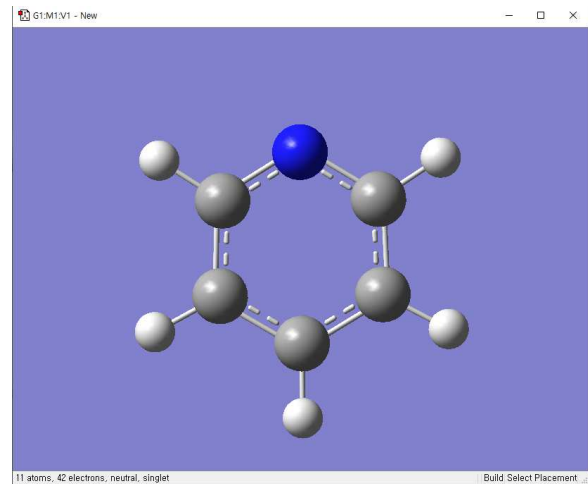
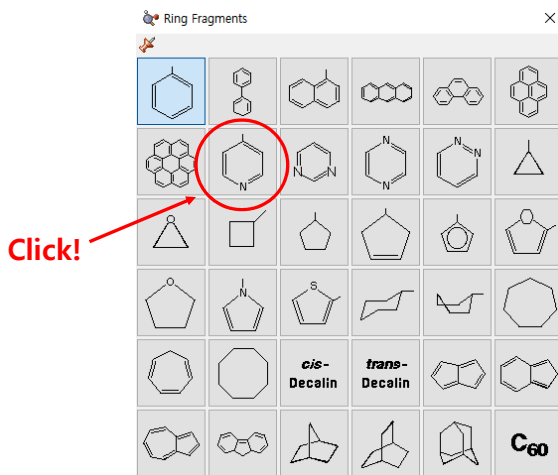
Double Click!



예시에 사용할 분자구조는 왼쪽 그림과 같다 (4-aminopyridine). 모델링 할 분자의 구조를 보면 벤젠과 유사한 육각 고리가 존재함을 확인할 수 있다. Gauss View에서는 이미 모델링 된 다양한 작용기들을 사용할 수 있다.

좌측 상단의 아이콘들 중에서 벤젠고리 모양의 아이콘을 더블 클릭한다.

계산화학2 (IR 계산)

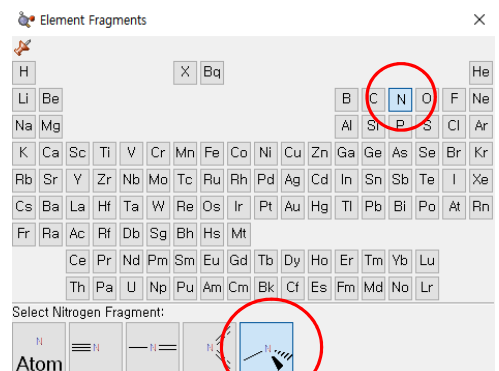
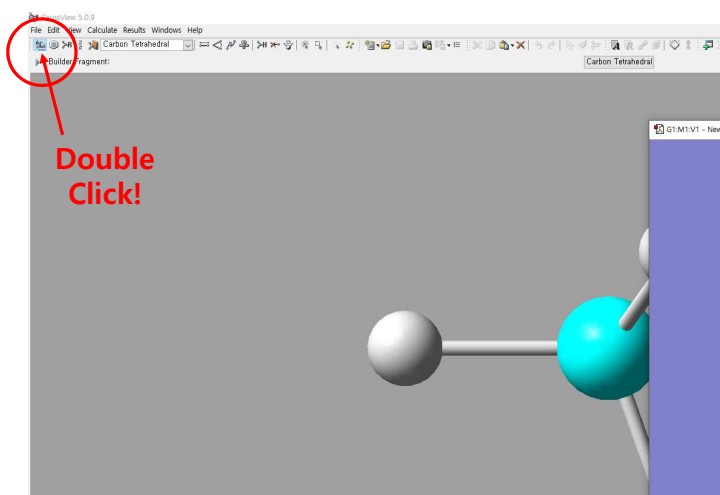


그러면 좌측과 같은 창이 뜨는 것을 확인할 수 있다. 여기서 모델링할 분자와 가장 유사한 구조를 찾고 클릭한다.

회색창에 클릭한 구조의 분자가 뜨는지 확인하고 보라색 창에 대고 클릭하면 오른쪽 그림과 같이 회색창의 구조가 복사가 된다.

* 참고 : 보라색 창에서 마우스 왼쪽버튼을 누른 상태로 드래그를 하면 분자를 회전, 마우스 휠을 돌리면 확대 또는 축소를 할 수 있다.

계산화학2 (IR 계산)

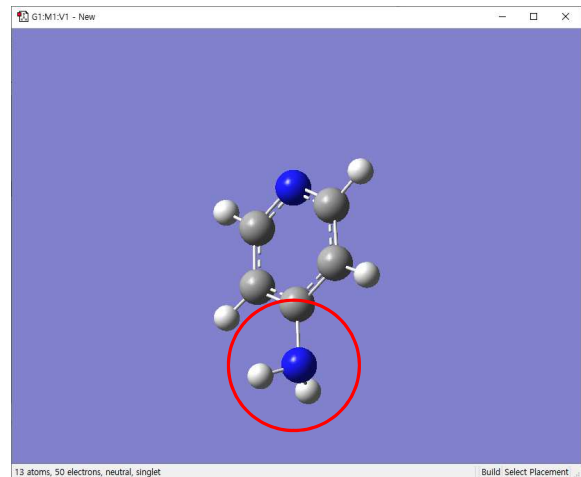
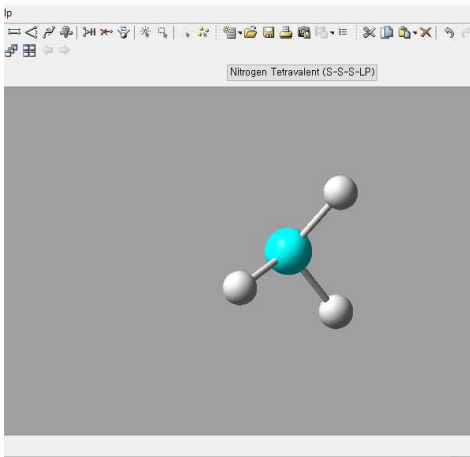


모델링 할 분자에 존재하는 치환기를 만들기 위해서는 벤젠모양 아이콘 옆의 탄소 원소기호가 적힌 아이콘을 더블 클릭한다(왼쪽그림).

그러면 오른쪽 그림과 같이 주기율표가 뜨는 것을 확인할 수 있으며 필요한 원소인 질소를 클릭한다.

이때 질소가 가질 수 있는 다양한 구조가 하단에 표시되며 맨 오른쪽에 있는 NH_3 형태를 클릭한다.

계산화학2 (IR 계산)



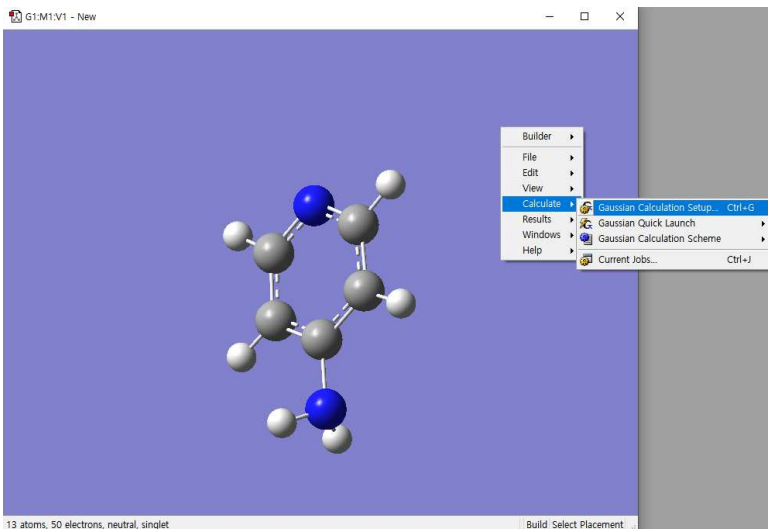
회색창에서 NH_3 가 잘 나타나는지 확인한다. 특히 N 부분이 형광색으로 빛나고 있는지 확인한다.

그 후 보라색 창으로 이동하여 모델링 할 분자와 동일한 위치에 있는 수소에 커서를 대고 클릭하면 N 원자로 치환이 일어난다.

* 참고 : 회색창에서 치환 시킬 부분을 변경할 수 있다. 예를 들어, 형광색으로 빛나는 부분을 수소로 변경하면 (회색창에서 수소 원자에 대고 클릭) 보라색 창에서 치환을 시킬 때 수소를 기준으로 변경된다.

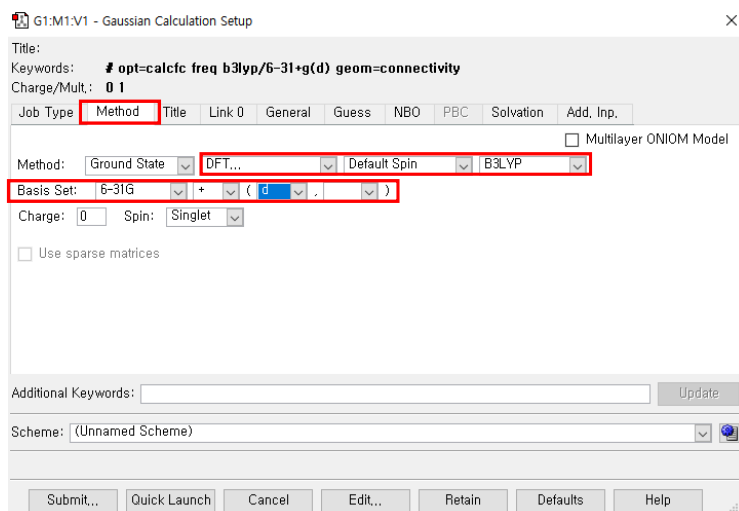
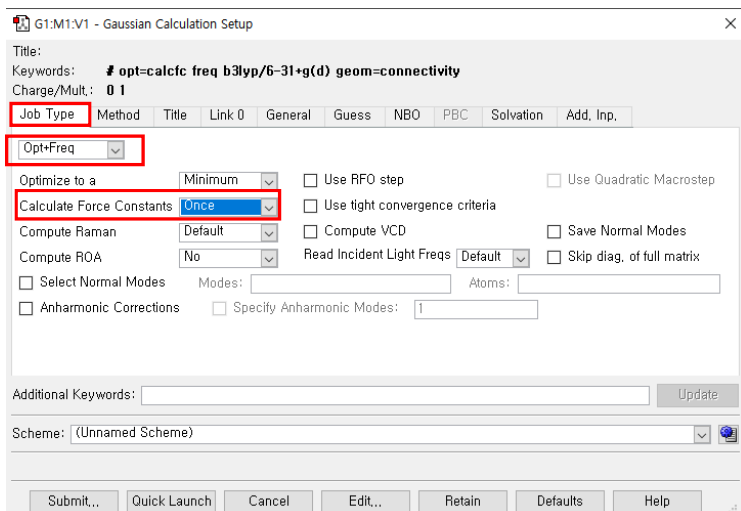
계산화학2 (IR 계산)

2. 계산 작업 제출



모델링을 완료한 보라색 창에 대고 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 뒤 "Calculate-Gaussian Calculation Setup" 을 클릭하면(왼쪽그림) 오른쪽 그림과 같은 창이 뜨는 것을 확인할 수 있다.

계산화학2 (IR 계산)

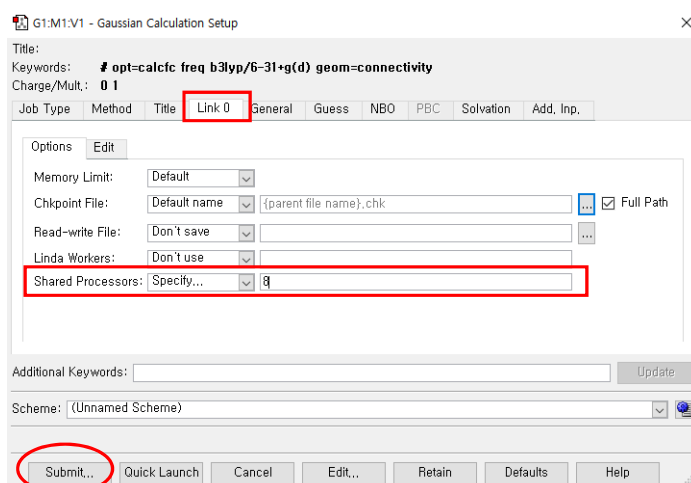


가장 처음 나타나는 “Job Type” 메뉴에서 왼쪽 그림의 빨간색 사각형으로 표시된 부분을 세팅해준다.

그 후 “Method” 부분으로 넘어가서 오른쪽 그림의 빨간색 사각형으로 표시된 부분처럼 세팅한다.

특히 “Method”에서 Basis set 부분은 오른쪽 그림과 같이 6-31G+(d)를 사용하면 좀 더 정확한 계산이 가능하지만 시간이 좀 더 걸린다. 너무 오래 걸린다고 판단되면 6-31G로 세팅하여 사용해도 된다.

계산화학2 (IR 계산)



“Link 0”라고 표시된 메뉴로 넘어와서 “Shared Processors” 부분에 8을 입력해준다 (8코어 사용).

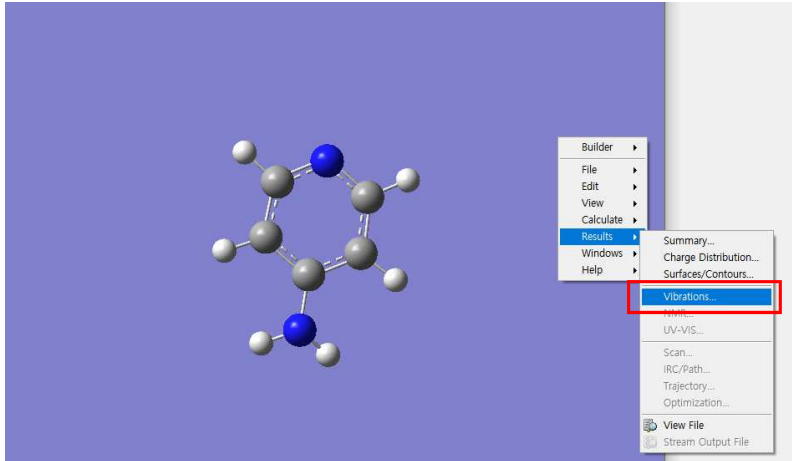
이후 하단의 “Submit” 버튼을 클릭하여 작업을 제출한다. 저장하라는 메시지가 뜨면 바탕화면에 분반, 조 번호가 포함된 폴더를 만든 후 그곳에 저장한다.

계산화학2 (IR 계산)

3. 계산 결과 확인

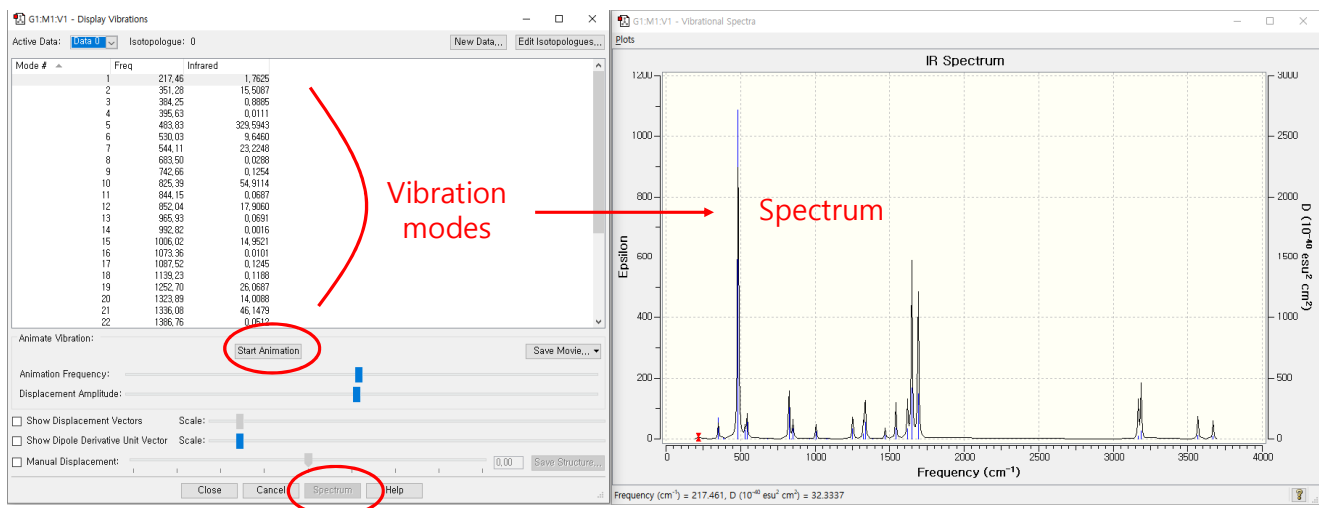
4-aminopyridine.chk	2021-03-09 오전 11:18	Gaussian Checkp...	2,540KB
4-aminopyridine	2021-03-09 오전 11:18	Gaussian Input File	1KB
4-aminopyridine	2021-03-09 오전 11:23	Gaussian Formatt...	1,010KB
4-aminopyridine	2021-03-09 오전 11:18	Gaussian Output ...	261KB

계산이 완료되면 저장한 폴더에서 **Gaussian output 형식(.log)**으로 된 파일을 실행시킨다.



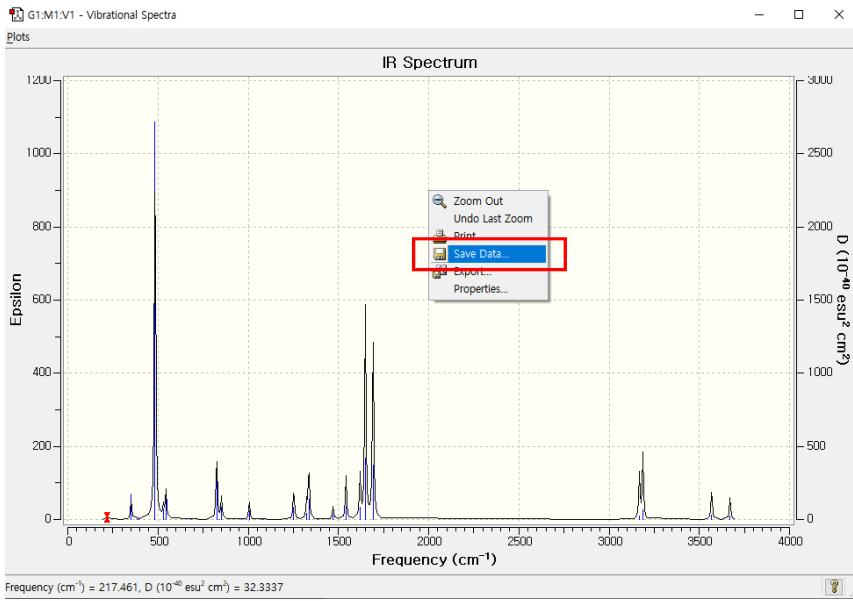
그러면 Gauss View에서 optimized 된 구조를 확인 가능하다. IR spectrum을 확인하기 위해서는 보라색 화면에서 마우스 오른쪽 버튼을 누른 후 "Result-Vibration" 으로 들어간다.

계산화학2 (IR 계산)



다음과 같이 **spectrum**과 각각의 **vibration mode**들을 확인할 수 있다. 특히, spectrum 상에서 위치 뿐 아니라 "Start Animation"을 클릭하면 해당 vibration mode가 어떻게 움직이는 mode인지 확인 가능하다.

계산화학2 (IR 계산)



Spectrum을 저장하기 위해서는 **IR Spectrum** 창에서 마우스 오른쪽 버튼을 누른 후 "Save Data"를 클릭하면 텍스트 (.txt)파일 형식으로 저장이 가능하다.

이 data는 추후에 excel로 불러와 같은 그래프를 그릴 수 있다.