

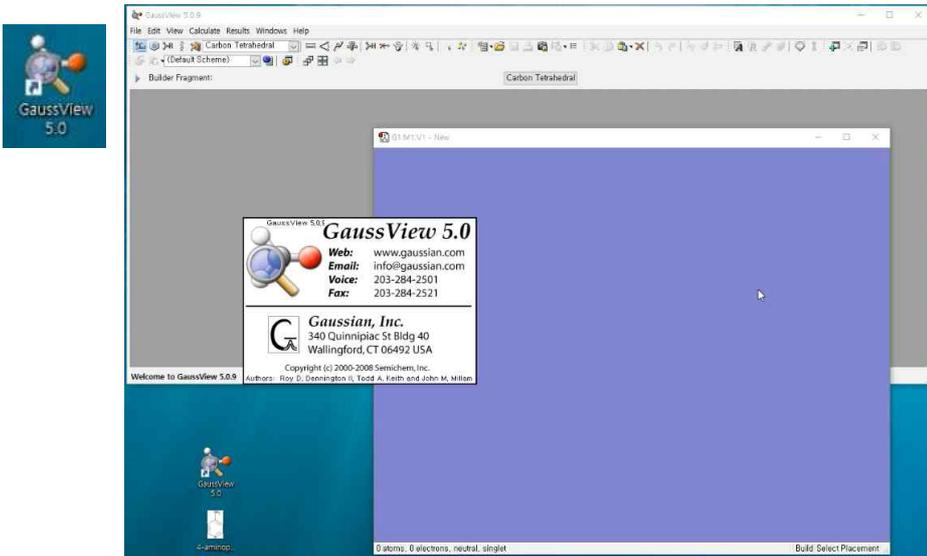
계산 화학2

-GaussView를 이용하여 분자의 IR 스펙트럼 구하기

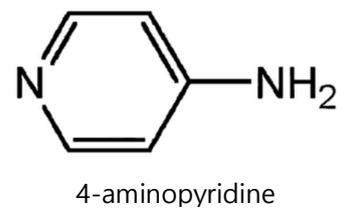
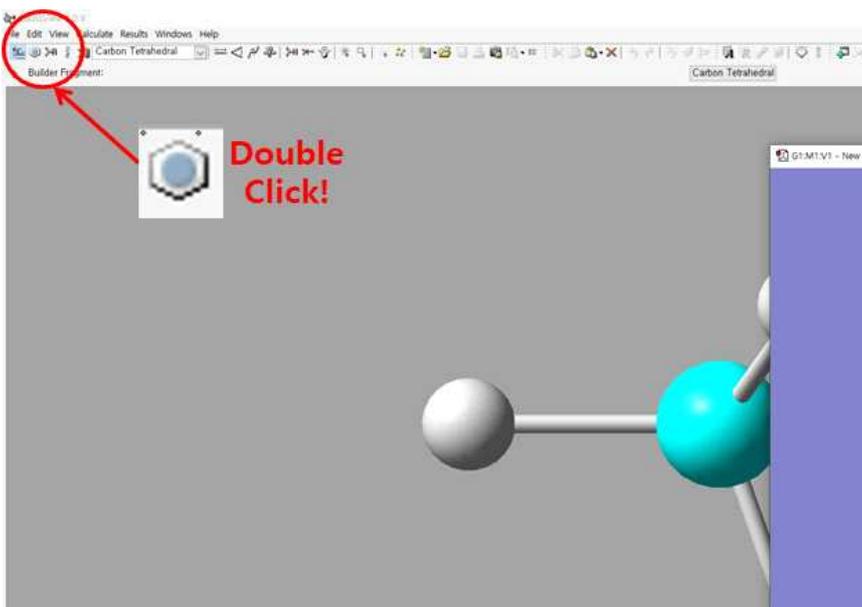
1. GaussView를 이용한 분자 모델링

1) GaussView 실행

회색창 : 현재 모델링 할 분자에 대한 정보, 보라색 창 : 실제로 모델링을 진행할 수 있는 공간

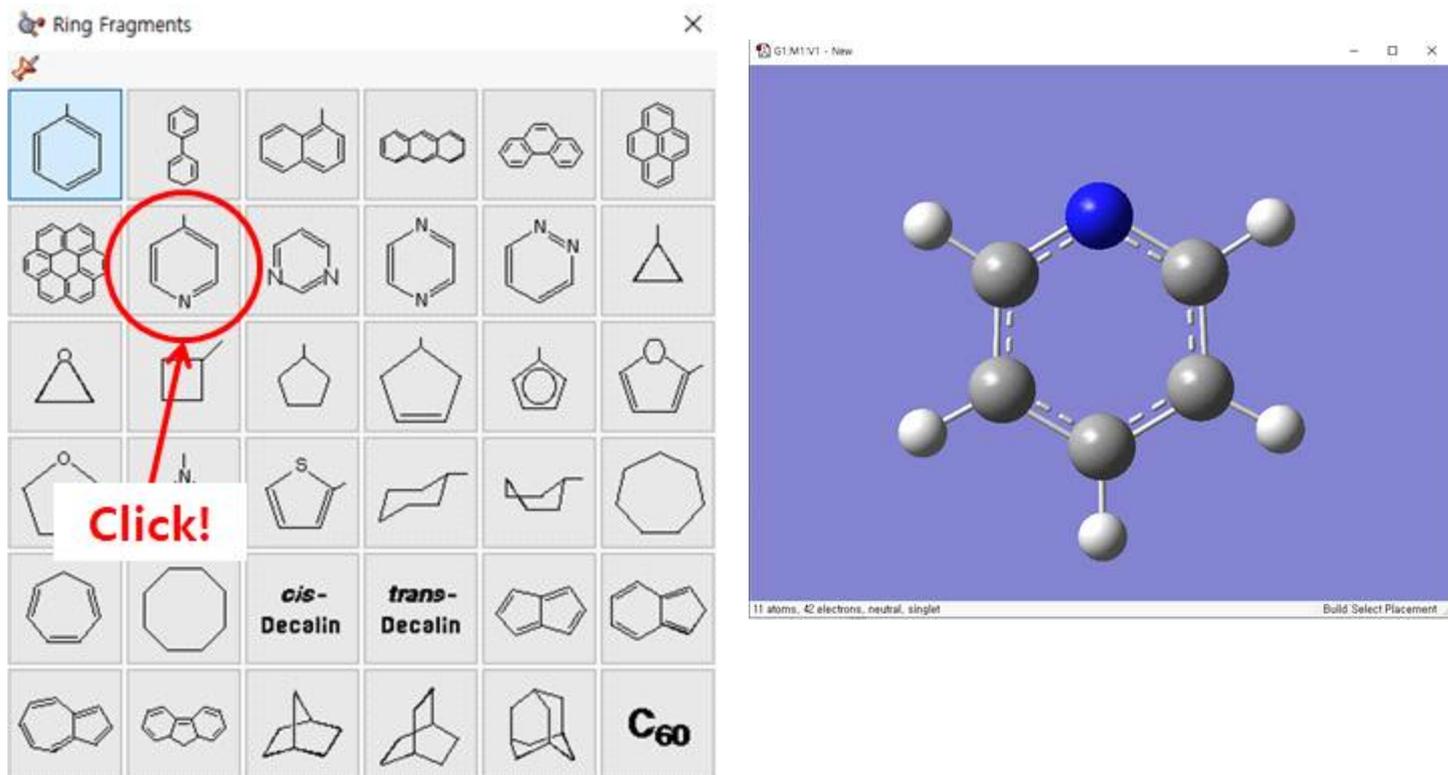


2) 좌측 상단의 아이콘들 중에서 벤젠고리 모양의 아이콘을 더블 클릭 예) 4-aminopyridine



3) 모델링할 분자와 가장 유사한 구조를 찾고 클릭한다.

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

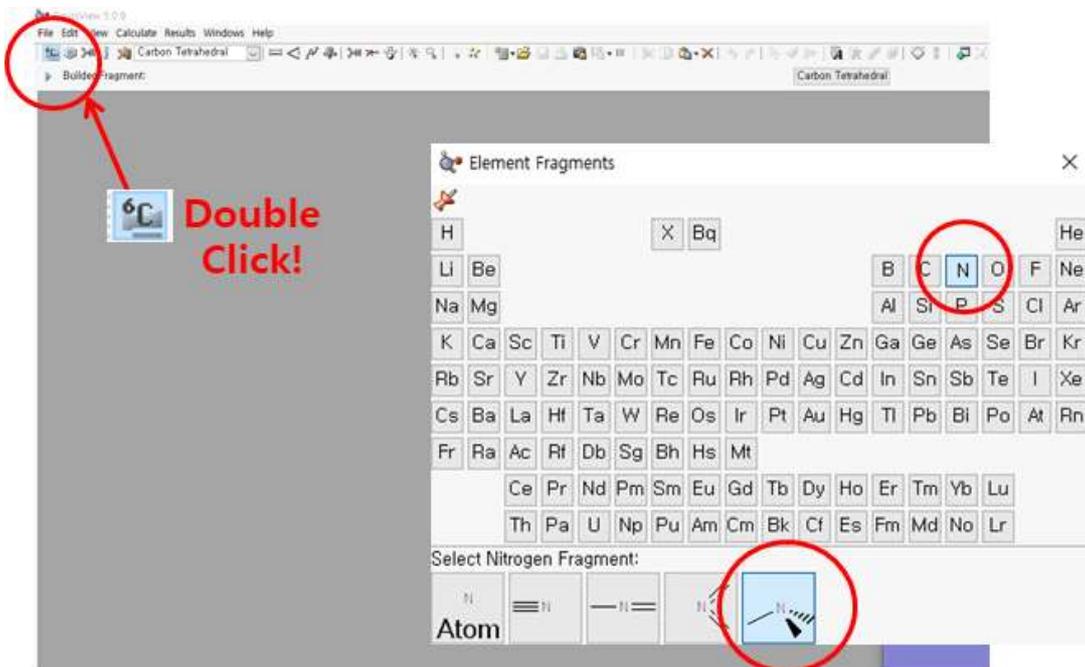


* 참고 : 보라색 창에서 마우스 왼쪽버튼을 누른 상태로 드래그를 하면 분자를 회전, 마우스 휠을 돌리면 확대 또는 축소를 할 수 있다.

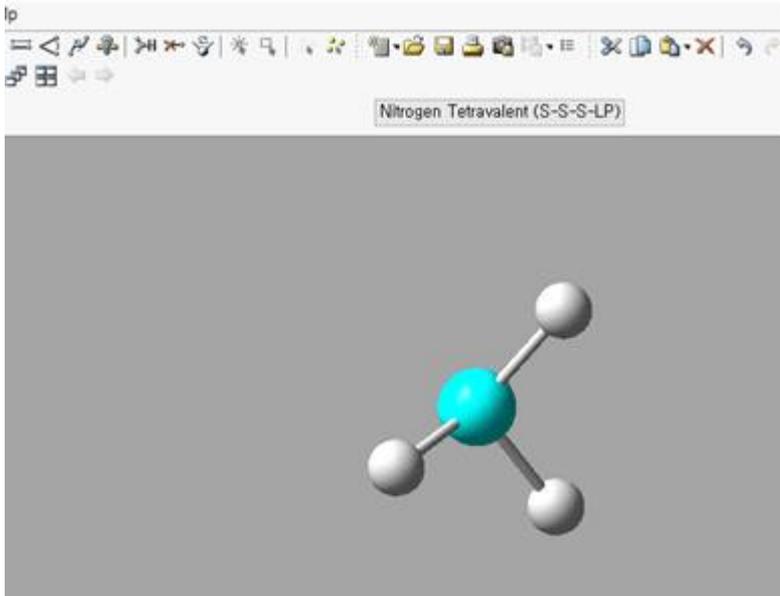
4) 벤젠모양 아이콘 옆의 탄소 원소기호가 적힌 아이콘을 더블 클릭

: 모델링 할 분자에 존재하는 치환기 선택

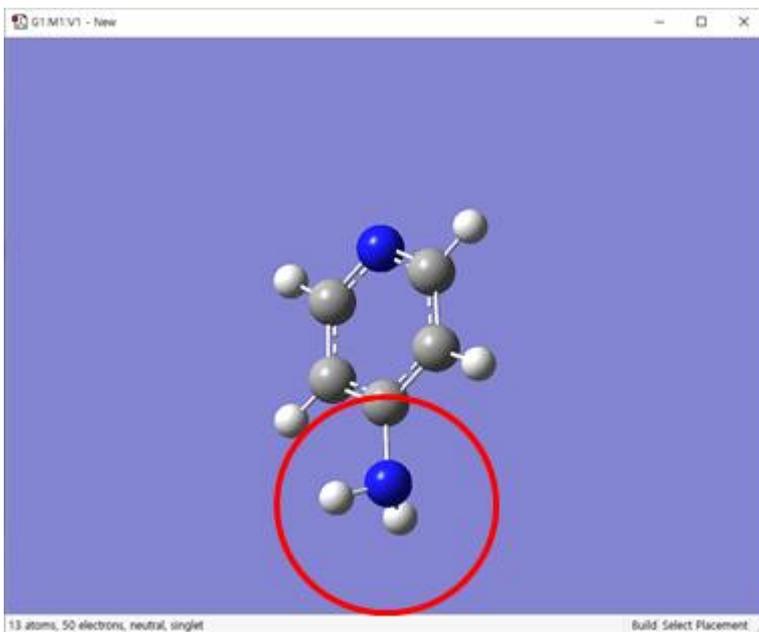
5) 주기율표가 뜨면 필요한 원소인 질소를 클릭 → NH₃ 형태를 클릭



6) 회색창에서 NH₃가 잘 나타나는지 확인. 특히 N 부분이 형광색으로 빛나고 있는지 확인한다.



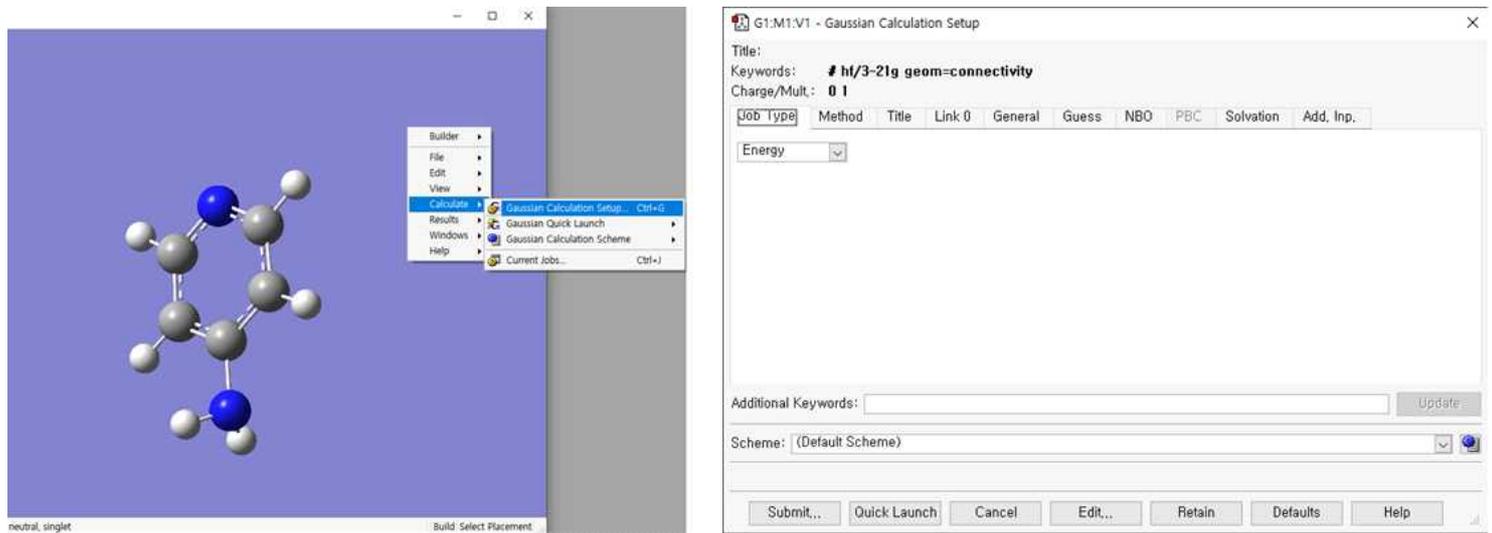
7) 보라색 창으로 이동하여 모델링 할 분자와 동일한 위치에 있는 수소에 커서를 대고 클릭하면 N 원자로 치환이 일어남



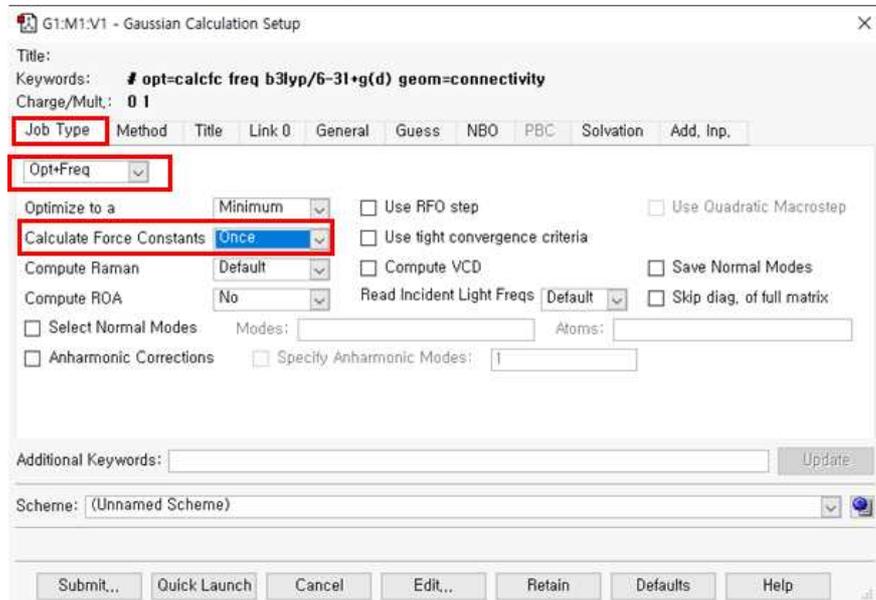
* 참고 : 회색창에서 치환 시킬 부분을 변경할 수 있다. 예를 들어, 형광색으로 빛나는 부분을 수소로 변경하면 (회색창에서 수소원자에 대고 클릭) 보라색 창에서 치환을 시킬 때 수소를 기준으로 변경된다.

2. 계산 작업 제출

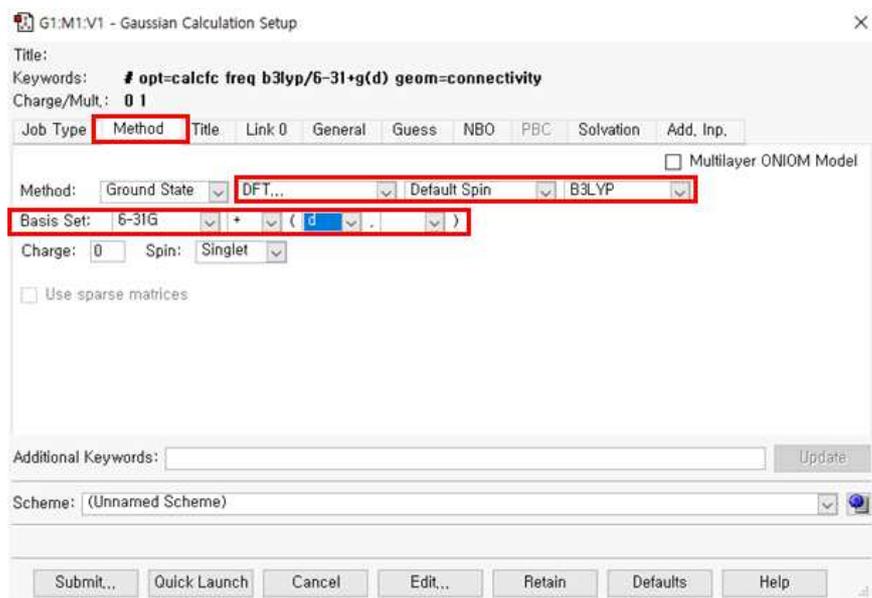
1) 보라색 창에 대고 마우스 우클릭 → Calculate-Gaussian Calculation Setup 클릭



2) Job Type : Opt+Freq, Calculate Force Constants : Once 선택

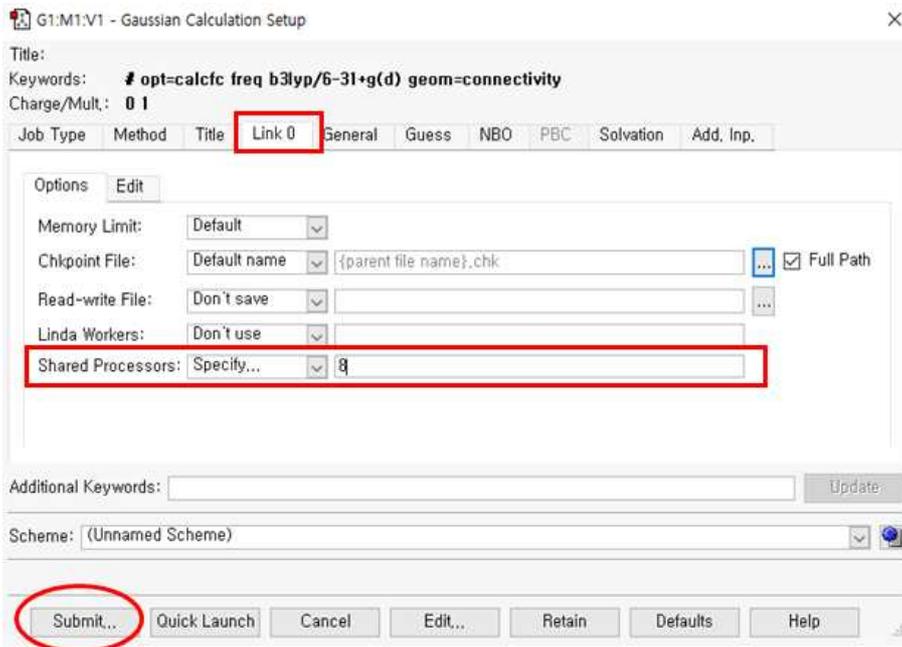


3) Method : DFT, Default Spin, B3LYP /Basis Set : 6-31G, +, d 선택



※ Basis set을 6-31G+(d)를 사용하면 좀 더 정확한 계산이 가능. But 시간이 좀 더 걸린다. 너무 오래 걸린다고 판단되면 6-31G로 세팅하여 사용해도 된다.

4) Link0 : Shared Processors : 8 (사용하는 pc의 사양 : 8코어) 선택 → Submit → 저장

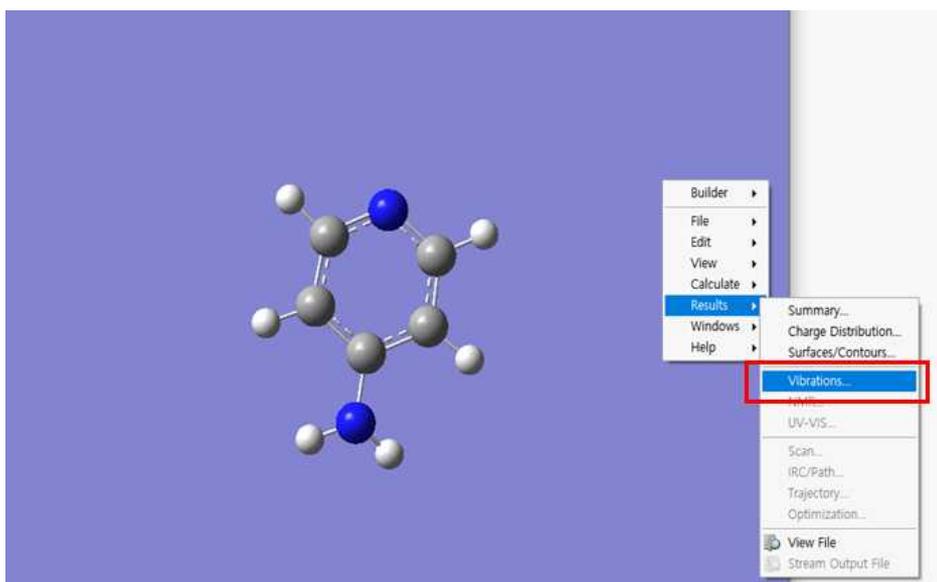


3. 계산 결과 확인

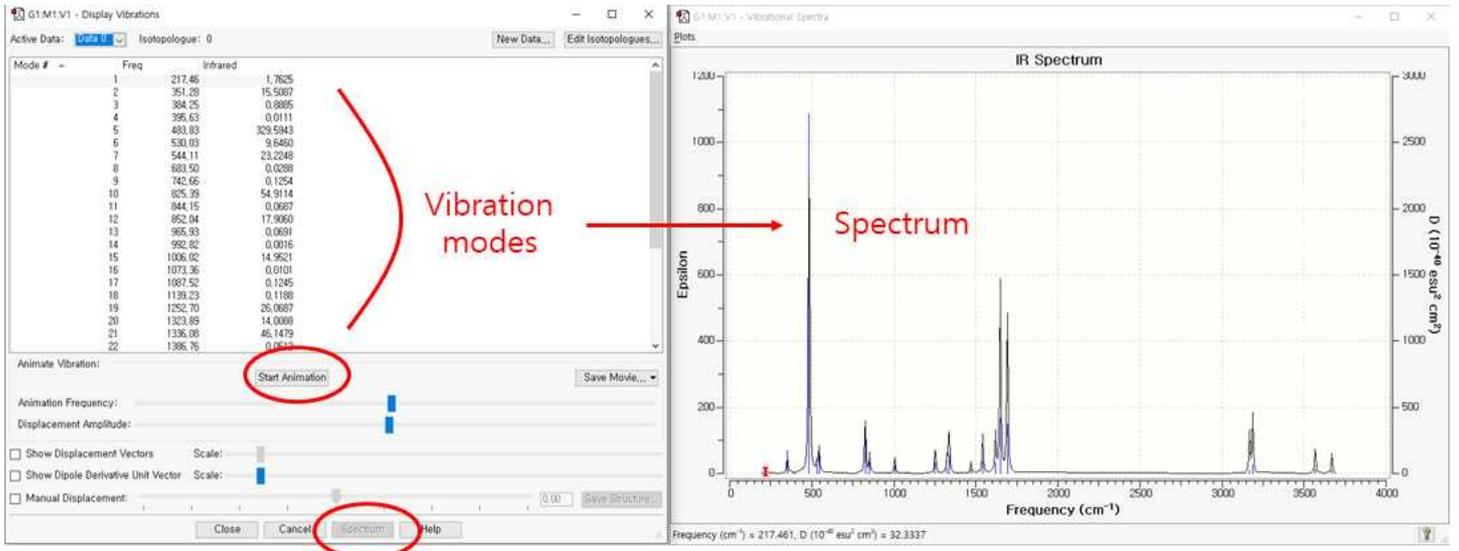
1) 계산이 완료되면 저장한 폴더에서 **Gaussian output 형식(.log)**으로 된 파일을 실행시킨다.

File Name	Date/Time	File Type	Size
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

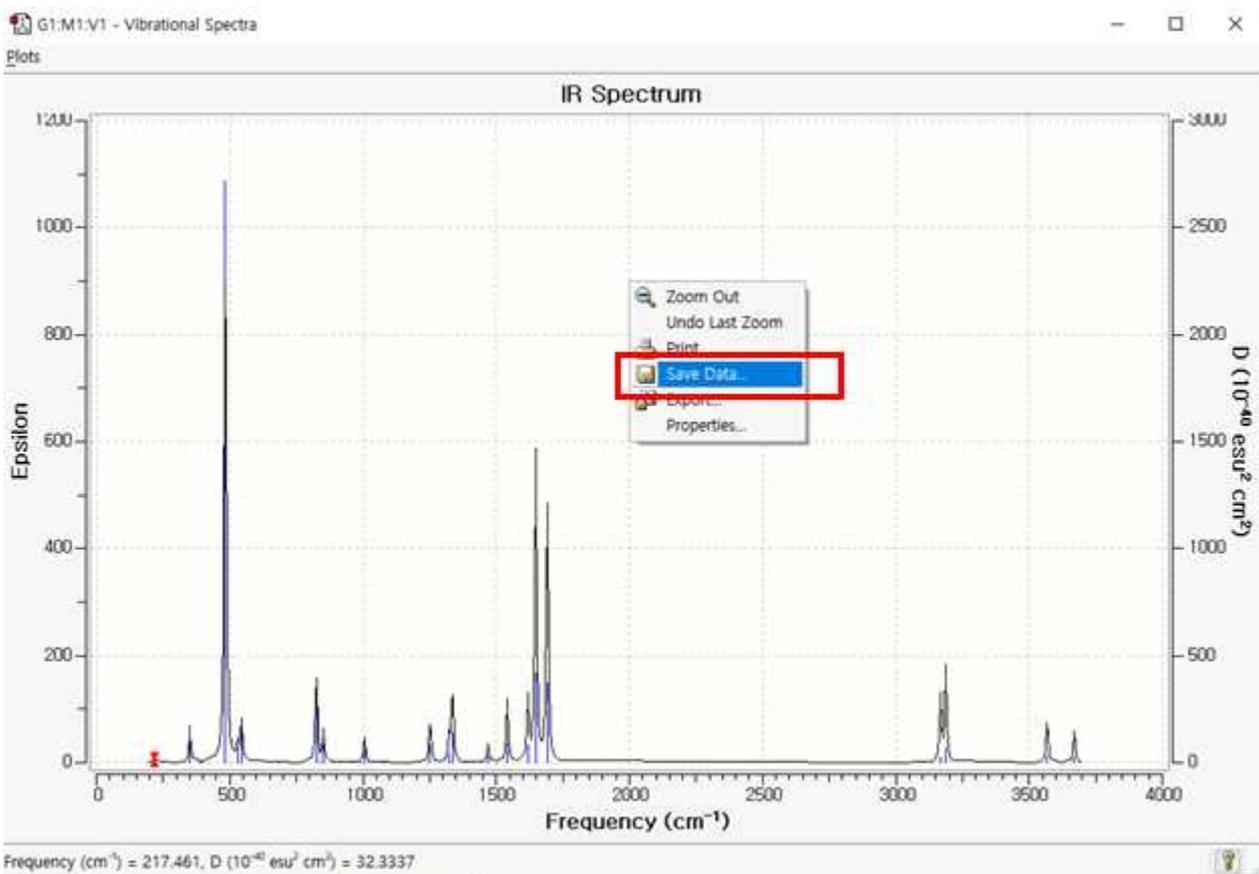
2) Vibrations 확인 : 마우스 우클릭 – Result –Vibrations



3) Vibrations 확인 : 스펙트럼, 진동모드



4) IR spectrum 창 : 마우스 우클릭 - Save data - 텍스트(.txt)파일 저장 - 엑셀에서 그래프 그리기



[노트북 ①②③⑤]