**Есептеу үшін бастапқы (енгізу) файлды құру**

Енгізу (input) файлын жасау және GaussView бағдарламасын пайдаланып Gaussian бағдарламасын іске қосу үшін басқару тақтасының Есептеу (Calculate) мәзірінен Gaussian Calculation Setup есептеуін орнату параметрін таңдаңыз. Осыдан кейін енгізуді көрсету үшін бірқатар панельдерді қамтитын диалогтық терезе ашылады.

1. Job Type (Жұмыс түрі) - мұнда кілт сөздер көрсетілген, оның көмегімен бағдарламаға қажетті есептеулер түрін анықтайды. Мысалы, молекуланың энергиясын есептеуге болады (Energy) немесе тербеліс жиіліктерін (Frequency) және т.б. Біз құрылымды оңтайландыруымыз керек, сондықтан Optimization орнаттық. Gaussian бағдарламасының түйінді сөздері 1-қосымшада сипатталған. Job Туре мәзірінде жоқ тапсырмаларды орындау қажет болса, оларды Additional Keywords сөздер жолында көрсетуге болады. Бұл сызық тек қана қосымша кілт сөздерге арналған, сондықтан оған қосылыстың атауы немесе басқа нәрсе жаза алмайсыз.
2. Есептеу әдісі мен негізгі жиынды көрсету үшін әдіс ақтасында Method ашыңыз және қалқымалы терезелерде Hartree-Fock әдісін орнатыңыз, базалық жинақ 6-31G (d), Charge жолында есептелген жүйенің зарядын (0) көрсетіңіз. Бағдарлама негізгі күйдің еселігін автоматты түрде анықтайды, егер қоздырылған күйді есептеу қажет болса, еселікті пайдаланушы орнатады.
3. Title тақтасы - түсініктемелер тақтасы. Мұнда олар әдетте күрделі атау және/немесе басқа түсініктемелерді жазады. Тек латын әліпбиінің әріптерін пайдаланыңыз. Acetaldehyde жазыңыз.
4. Link 0 панелі есептеудің аралық нәтижелері жазылатын chk-файлдың атын көрсету үшін қызмет етеді. Сондай-ақ пайдаланылатын жедел жадтың максималды көлемін және операцияға қатысатын процессорлар санын көрсетуге болады. Барлық әдепкі мәндерді қалдырыңыз.
5. General тақтада кейбір қосымша опцияларды таңдауға болады. Барлық әдепкі мәндерді қалдырыңыз.
6. Guess тақтасы іске молекулалық орбитальдардың қосу сипаттамаларын көрсетеді. Бастапқы орбитальдар неғұрлым «жақсы» таңдалса, соғұрлым өзіндік консистенция процедурасындағы итерациялар саны аз болады. Әрбір итерацияда, ~ M2 бір электрон интегралдар және ~ M4 екі электронды интегралдар, сондықтан молекулалық орбитальдарды ең жақсы жолмен таңдау керек. Барлық әдепкі мәндерді қалдырыңыз.
7. NBO панелі табиғи байланысты орбитальдардың көмегімен популяциялық талдау орындау қажет болғанда қолданылады. Барлық әдепкі мәндерді қалдырыңыз.
8. Solvation панелі шешімдердегі жүйелерді модельдеу мәселесі үшін кіріс файлын құру үшін қолданылады. Алдымен үлгілер мәзірінде қалаған есептеу әдісі таңдалады, әдепкі бойынша (жол Default) PCM әдісі пайдаланылады. Шешім үлгісін таңдағаннан кейін еріткіш таңдау мәзірі ашылады және кез келген қол жетімді еріткіш таңдауға болады. Біз газ фазасындағы молекуланы оңтайландырамыз, сондықтан Model сызығын None етіп орнатыңыз.

Барлық баптаулардан кейін (3.10-сурет), Keywords жолы (Additional Keywords сөздермен шатастыруға болмайды) келесідей болуы керек:

# opt hf/6-31g(d) geom=connectivity

Ол келесі ақпаратты қамтиды: шығарылады 6-31G (d) базалық жиынтығымен Хартри-Фок әдісімен геометрияны оңтайландыру. "Geom = қосылым" пайда болуы немесе болмауы мүмкін. Бұл опция кіріс файлына тапсырыс ақпаратын қосады. Молекуладағы атомдарды байланыстыру арнайы синтаксис және параметрлерді есептеуге әсер етпейді. Енді Gaussian бағдарламасын бастауға болады. Submit түймесін басыңыз және пайда болған диалогтық терезеде қойылған сұрақтарға жауап беріңіз (енгізу мен шығыстың атын көрсетіңіз файлдар және олардың компьютердегі орны), содан кейін GaussView Gauss бағдарламасын іске қосады. **Маңызды! Файл атауы және сонымен қатар оның орналасқан жеріне апаратын жолда орыс тіліндегі таңбалар болмауы керек.**

Есептеу кезінде Gaussian бағдарламасының терезесінде шығыс (\* .out немесе \* .log) файлына жүйелі түрде сақталатын соңғы ақпарат шығады. Run Progress жолында орындалатын сілтемедер көрсетіледі (спецификалық орындалатын ішкі бағдарлама есептеулер).

Бағдарламаның соңында Processing Complete хабары пайда болады. Есептің соңында Normal termination of Gaussian болуы керек. Ол білдіреді есептеу сәтті аяқталды.

Gaussian бағдарламасы аяқталғаннан кейін бағдарламаны жабу керек пе деп сұрайтын диалогтық терезе пайда болады. Келісуге еркін болыңыз, өйткені барлық нәтижелер сақталады, оларды GaussView арқылы қарауыңызға болады.

Айтпақшы, бағдарлама бірден екі файлды ашуды ұсынады \* .log және \* .chk кеңейтімдері (3.12-сурет). \* .log кеңейтімі бар файлды таңдаңыз, оңтайландырылған құрылым ашылады.

Есептеу нәтижелерін талдау үшін алдымен Results, Summary. Results, View File тапсырманың мәтінді log файлы ашады. Тапсырма мәтіндік файлы сәйкес басқару белсенді тақтасындағы түймені пайдалану арқылы терезедегі құрылымды да ашуға болады. Маңызды! Барлық әрекеттер тек сол уақытта белсенді терезеде орындалады.

Басқа жұмыс түрлерін аяқтағаннан кейін Results мәзірі белсенді болады: Charge Distribution, Surfaces/Contours, Vibrations, NMR, UV-VIS, Scan, IRC/Path, Trajectory, Optimization.

**Нәтижелерді талдау.** Электрондық энергия ацетальдегидті үшін жаплы мәліметті .log файлынан алуға болады. Мәтіндік файлдағы Optimized Parameters жазуын табыңыз, әдетте ол файлдың екінші жартысында орналасқан.

Осы жерден файлға көтеріліп, соңғы итерациядан кейінгі молекуланың энергиясын табасыз: - 152.915964882 Хартри атомдық бірліктері.

Сондай-ақ Results мәзірінен Summary элементін таңдауға болады. Мұнда бұл энергия көрсетілген E (RHF) = - 152,91596488 Хартри атомдық бірліктері.

Жоғарыда сипатталған екі жолмен энергияны табыңыз. Энергия мәндері сәйкес болуы керек !!!

Айта кету керек, есептеулер үшін дөңгелектеумен 4 ондық таңбаға дейін энергетикалық мәнді алу қажет. Бұл шамамен 0,1 ккал/моль дәлдікке сәйкес келеді. Біздің жағдайда біз мәнді аламыз - 152,9160 хартри. Ккал/мольге аудару үшін, бұл санды 627,5095-ке көбейту керек. КДж /мольге аудару үшін алынған санды ккал / мольде көбейту керек 4.184. Бірліктерді түрлендіру 2-қосымшада келтірілген.

**1-жаттығу**

Үш изомердің салыстырмалы тұрақтылығын – сірке альдегидінің және екі қырлы C-C-O-H бұрышы 180 ° және 0 ° тең винил спиртінің екі конформерін салыстырыңыз (3.16-сурет).

Винил спирті молекуласының және оның құрылымдық изомерінің екі конформациясының салыстырмалы тұрақтылығын салыстыру - сірке альдегидіне электронды энергияны есептеу керек әрбір құрылымды, содан кейін сірке альдегидіне қатысты барлық үш құрылымның изомерлерінің энергияларының айырмашылығын есептеңіз. Ол үшін кестені толтыр:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Молекула | Е, хартри | dE, хартри | dE, ккал/моль |
| Ацетальдегид |  | 0 | 0 |
| Винил спирті (0о) |  |  |  |
| Винил спирті (180о) |  |  |  |

Осы үшеуінің изомерлернің салыстырмалы тұрақтылығы туралы қорытынды жасаңыз.

**2-жаттығу**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| С-Н (СН3) |  | Н-С-Н |  |
| С-С |  | С-С-Н |  |
| С=С |  | О-С-Н |  |
| С-Н |  | С-С-О |  |

Сірке альдегидінің молекуласының геометриялық параметрлері кестесін толтырыңыз.

|  |  |
| --- | --- |
| Сілтеме ұзындығы, А | Байланыс бұрышы, град. |

Тек оңтайландырылған құрылымды пайдаланыңыз (файл

кеңейтімі \* .log)! Байланыс ұзындығының мәндерін Modify Bond құралы арқылы табуға болады. Екі атомды таңдаңыз, олардың арасындағы байланыс ұзындығы сізді қызықтырады, таңдалған сілтеменің ұзындығын көрсететін терезе ангстромдарда (10-10 м) диалогтық терезеде пайда болады. Сол терезеде сырғытпаны жылжыту арқылы сілтемелердің ұзындығын өзгертуге немесе жай ғана қажетті мәнді енгізуге болады.

Байланыс бұрыштары Modify Bond құралын пайдалану ұқсас жолмен танылады . Үш атомды қатарынан таңдаңыз, диалогтық терезе пайда болады (3.18-сурет), онда бұрыштың градуспен мәні көрсетілген.

Байланыстың ұзындығы мен бұрыштары мәтіндік \* .log файлында Optimized Parameters жазуынан кейін бірден жазылады.