

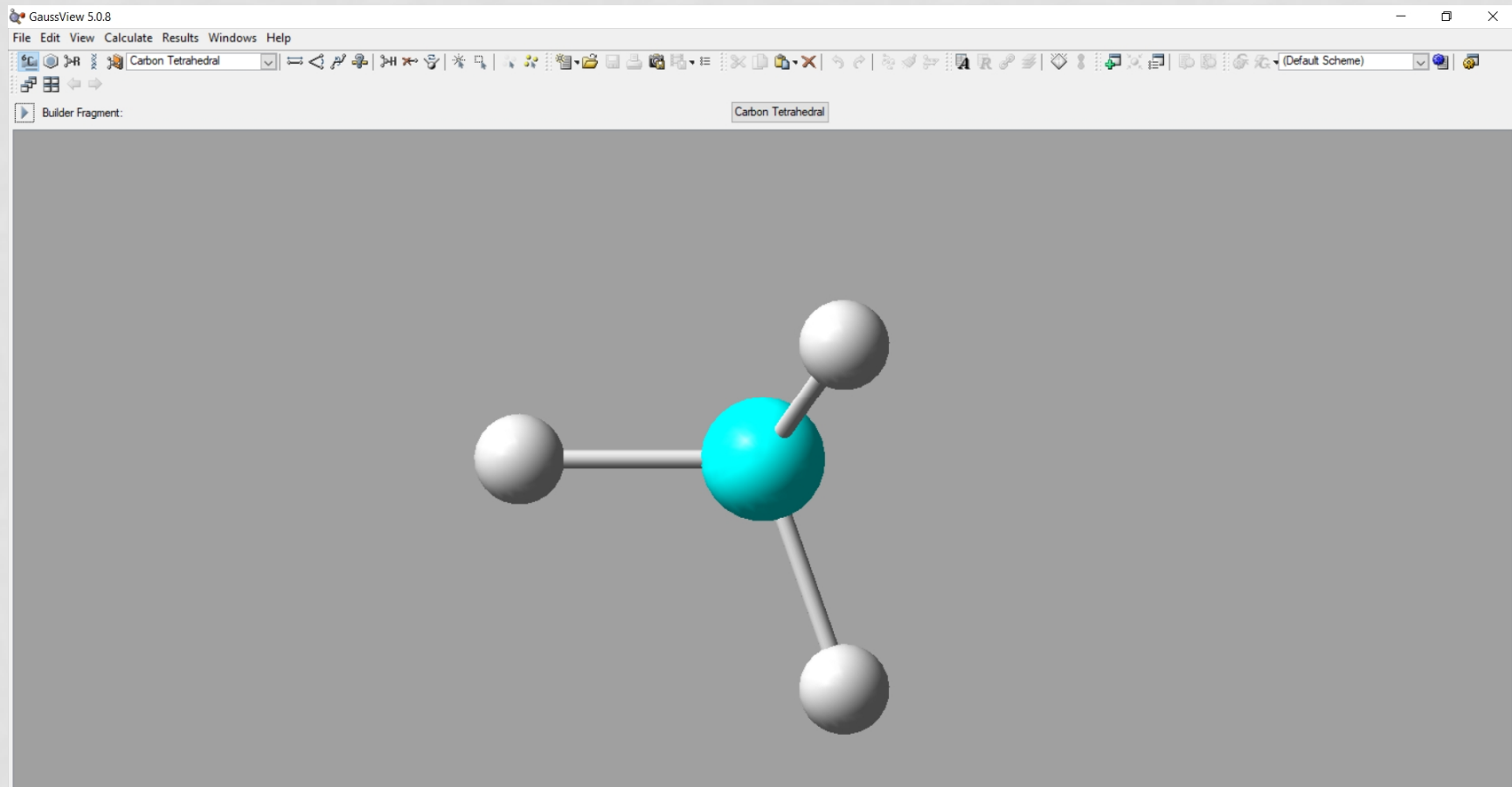
به نام خدا

آموزش نرم افزار GAUSS VIEW

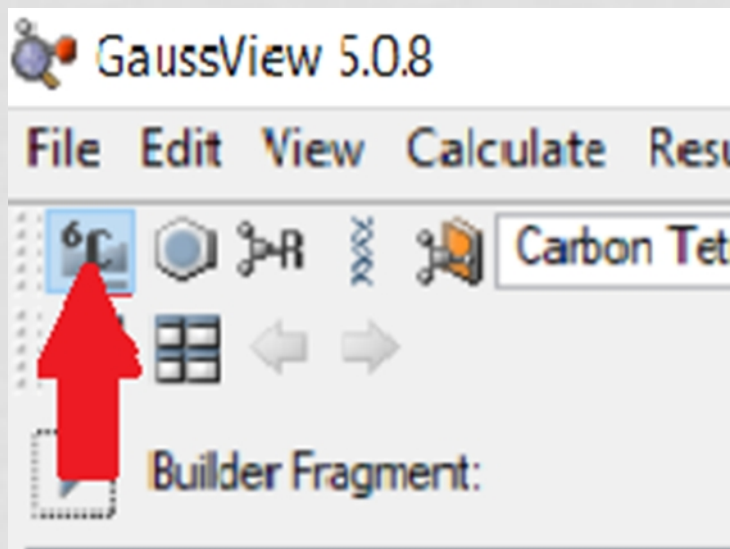
و GAUSSIAN

گردآورندگان: سینا شکارسرائی و سید رضا سیدی

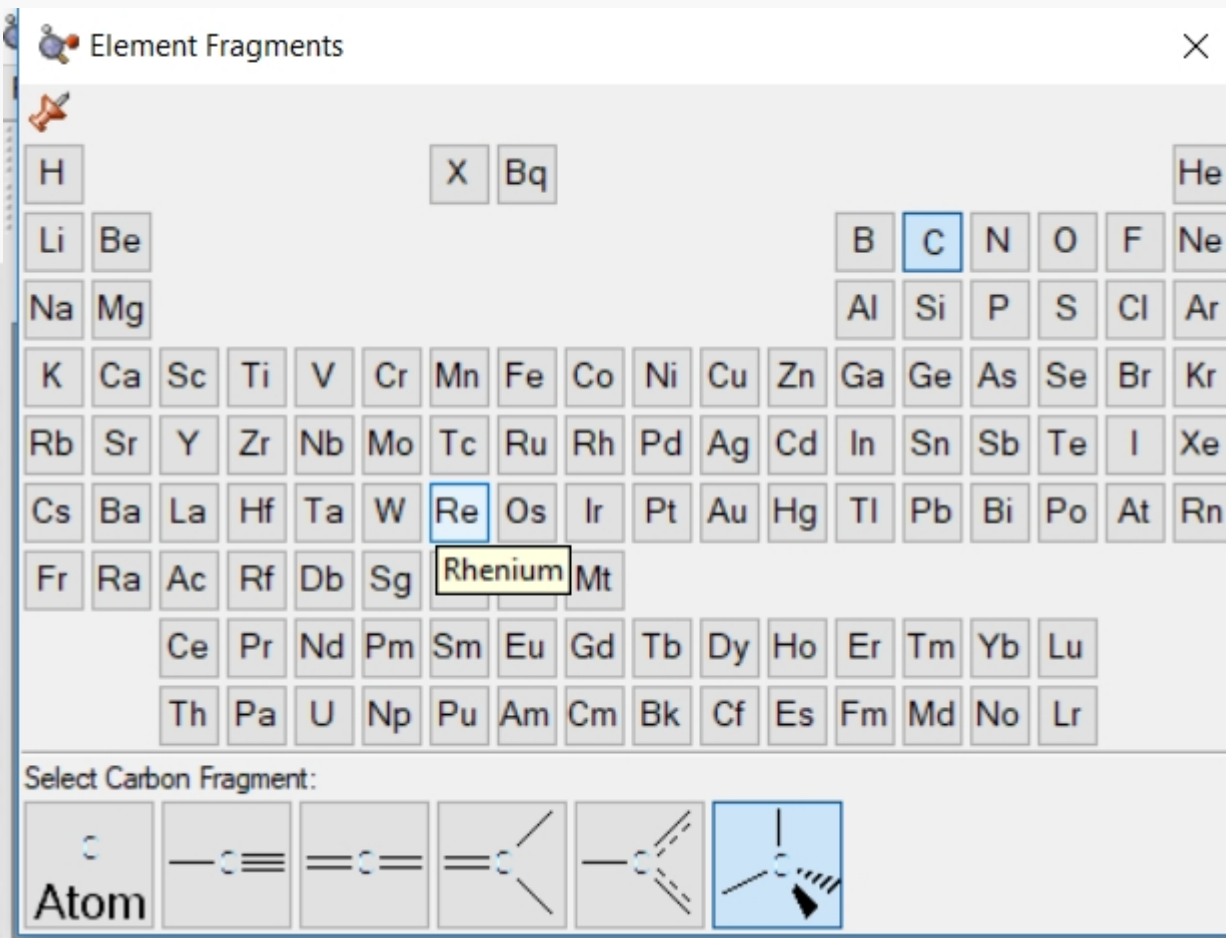
فضای کلی نرم افزار



معرفی نوار های بالا



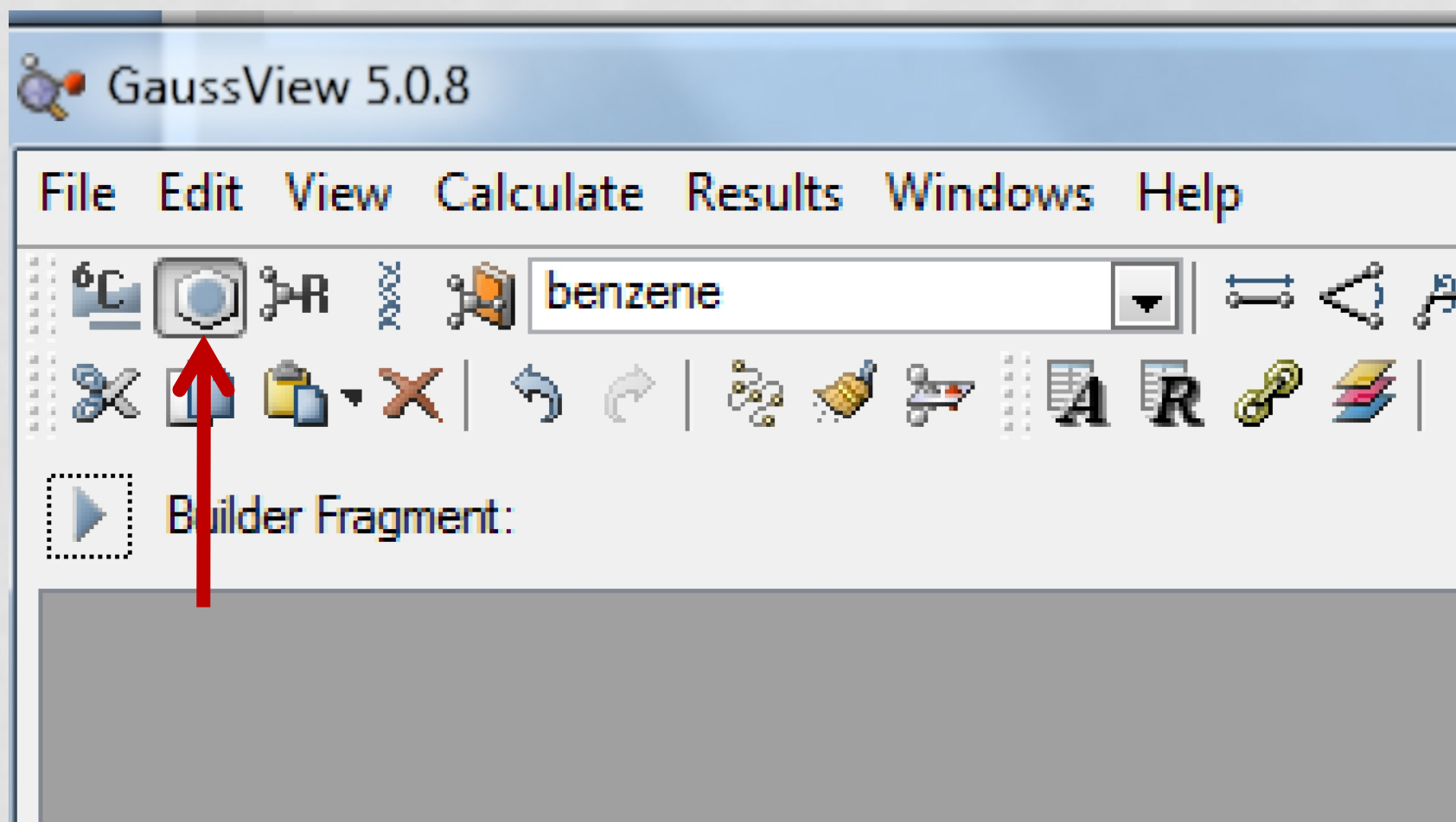
- با کلیک بر روی این گزینه عناصر جدول تناوبی به نمایش گذاشته میشود.



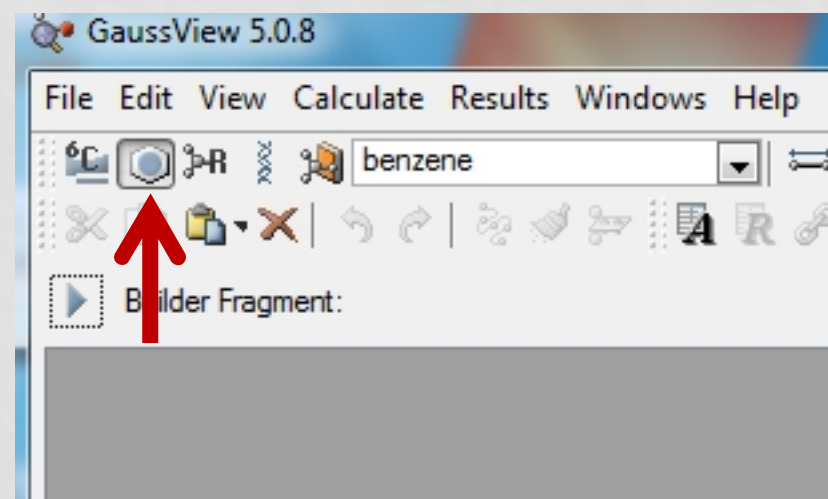
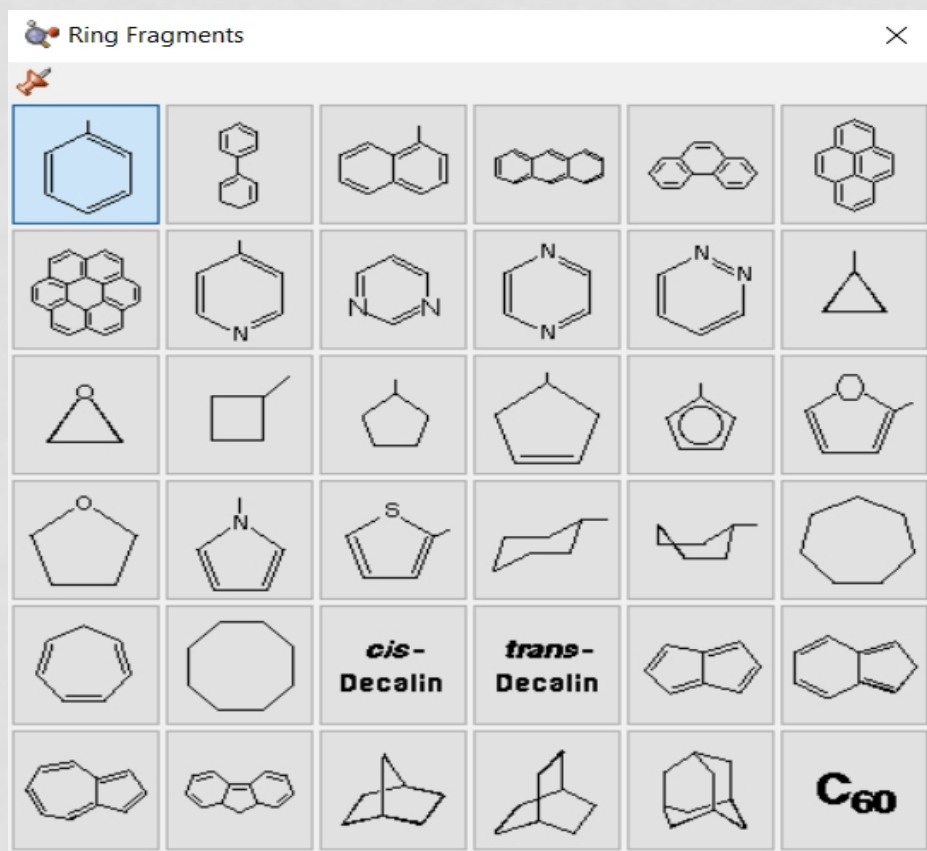
- عناصر جدول تناوبی و همچنین معین کردن نوع پیوند

ساختارهای پیش فرض موجود در نرم افزار

با کلیک بر روی این گزینه :



ساختارهای پیش فرض موجود در نرم افزار



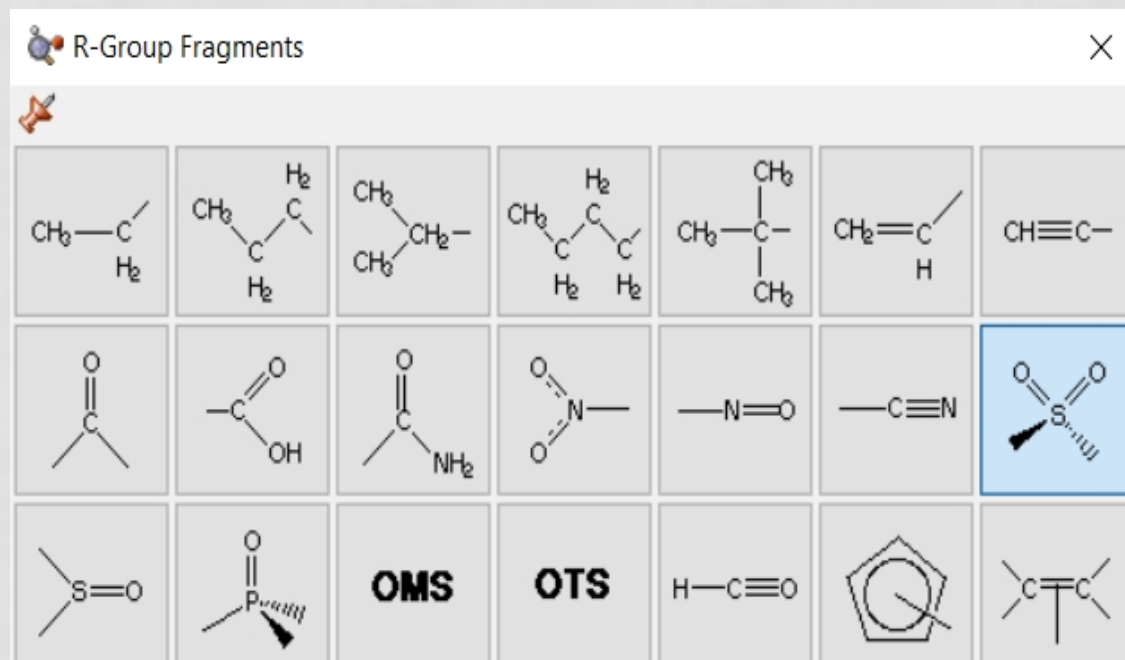
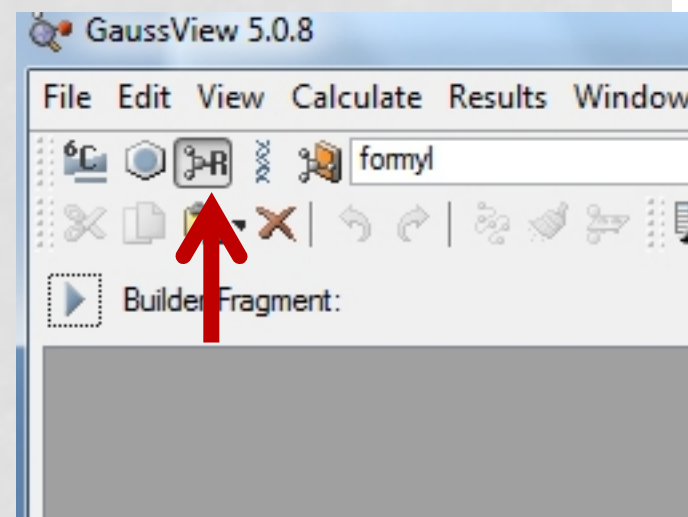
ساختارهای روبه رو

مشخص می شوند:



گروه های پیش فرض در نرم افزار

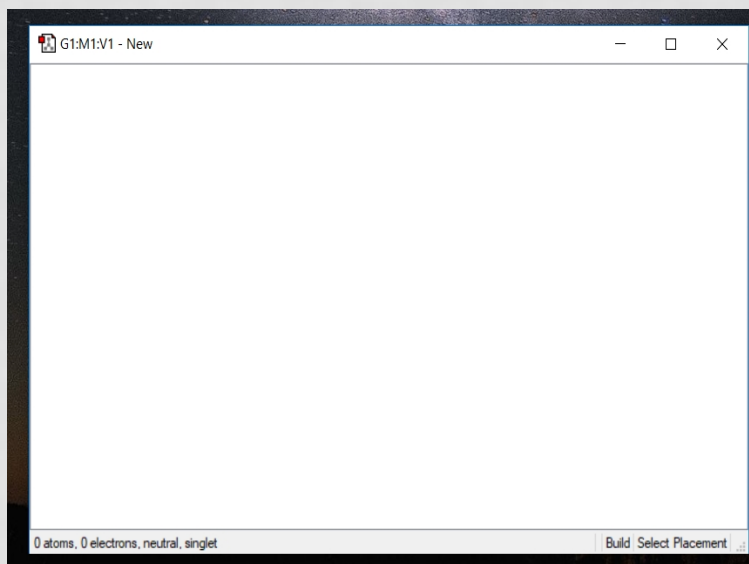
با کلیک بر روی این گزینه:



گروه های زیر
مشخص می شود:

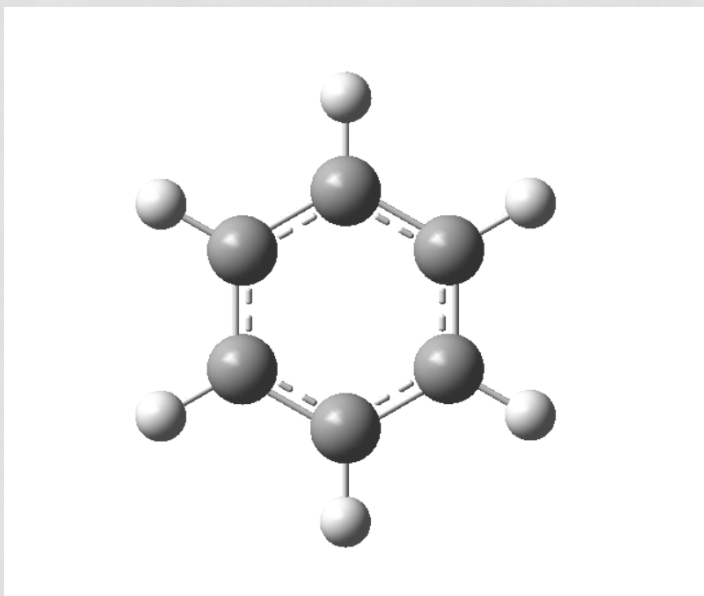
نحوه ساخت مولکول

- مسیر زیر را برای باز کردن صفحه دنبال میکنیم:
- File → new → create moleculegroup
- یا میانبر زیر را استفاده میکنیم:
- Ctrl + N
- یک صفحه باز میشود :



همه چیز با یک کلیک راست شروع میشود

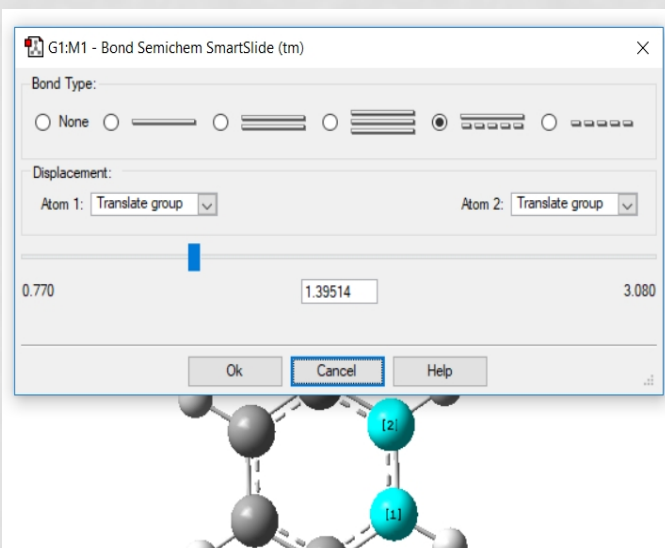
- با کلیک راست کردن و انتخاب گزینه **Builder** داریم :
با انتخاب فرضاً بنزن و کلیک روی صفحه سفید، بنزن رسم میشود.



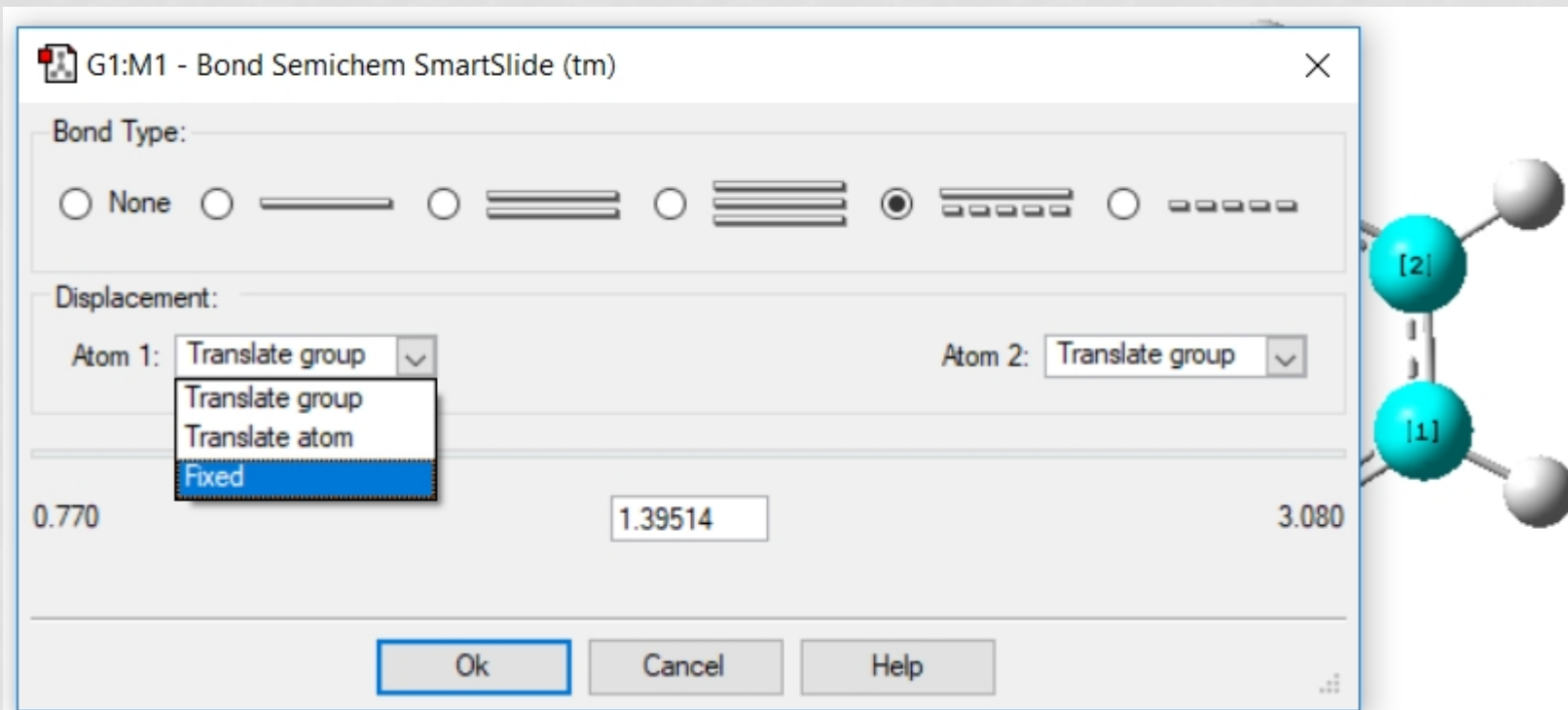
با نگهداشتن کلیک و چرخاندن ماوس مولکول را میتوان از زوایای مختلف دید.

تغییر در پیوند ها

- با کلیک راست و انتخاب گزینه Modify bond را میزنیم
 - سپس با انتخاب اتم های پیوند موردنظر داریم :



که میتوانیم نوع پیوند و فاصله پیوند را تغییر دهیم (حتی با ثابت نگه داشتن یک اتم)

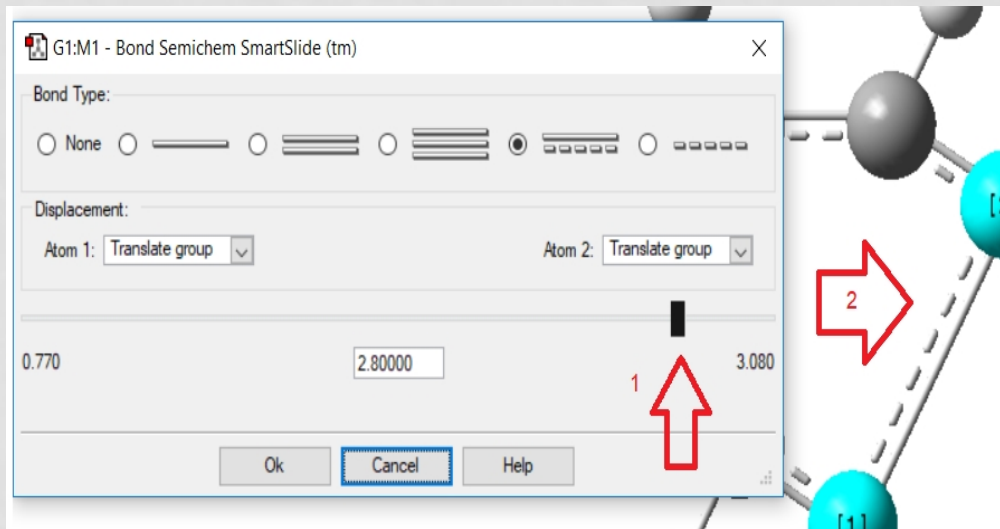


- با انتخاب گزینه Fixed ، اتم یک ثابت می ماند و اتم دو دورتر یا نزدیکتر میشود

- برای تغییر فاصله پیوند، هم میتوان به صورت دستی فاصله را وارد کرد و هم میتوان توسط نوار لغزنده که تعبیه شده، فاصله کم و زیاد کرد.

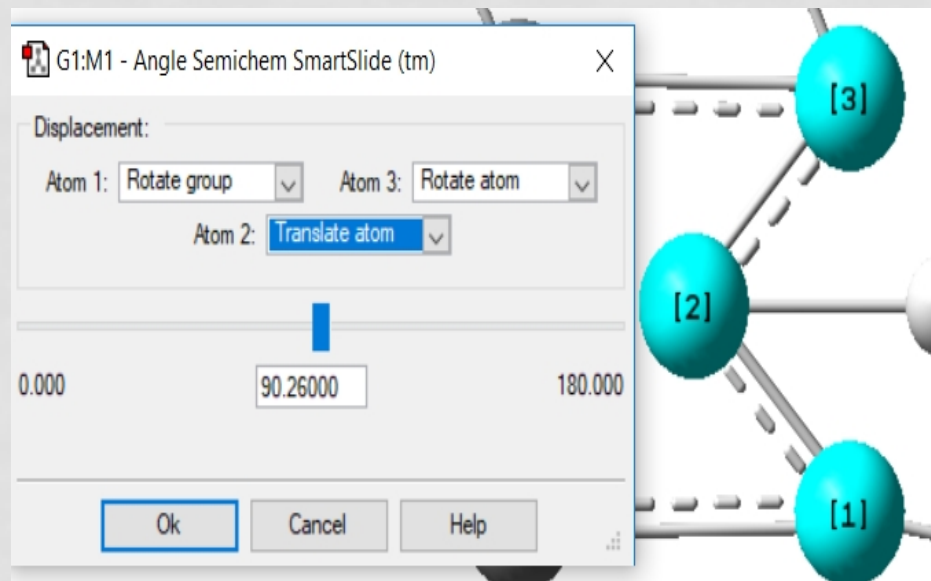


- وارد کردن دستی عدد



- تغییر توسط نوار

تغییر زاویه بین اتم ها



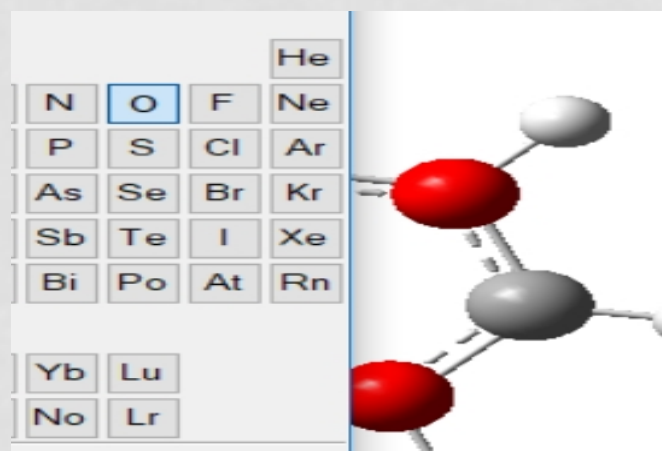
- انتخاب گزینه **Modify angle**
 - انتخاب 3 اتم
 - باز شدن پنجره روبرو
- تغییر زاویه با ثابت نگهداشتن یک اتم،
 - یک گروه و ...

اضافه کردن والانس

گزینه Add valence

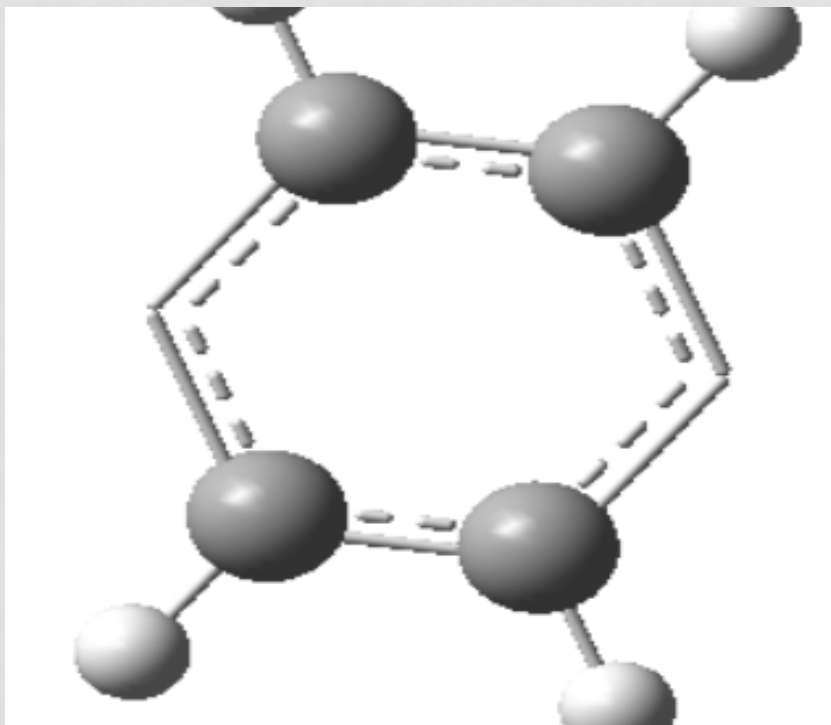
- به طور پیش فرض هیدروژن اضافه میکند
 - فقط کافیست روی هر اتمی که مد نظر است کلیک کنیم
- با انجام روند زیر و انتخاب اتم مثلا اکسیژن ، با کلیک روی اتم های مولکول موردنظر ، اتم اکسیژن جایگزین میشود

Right click → Builder → Element Fragment



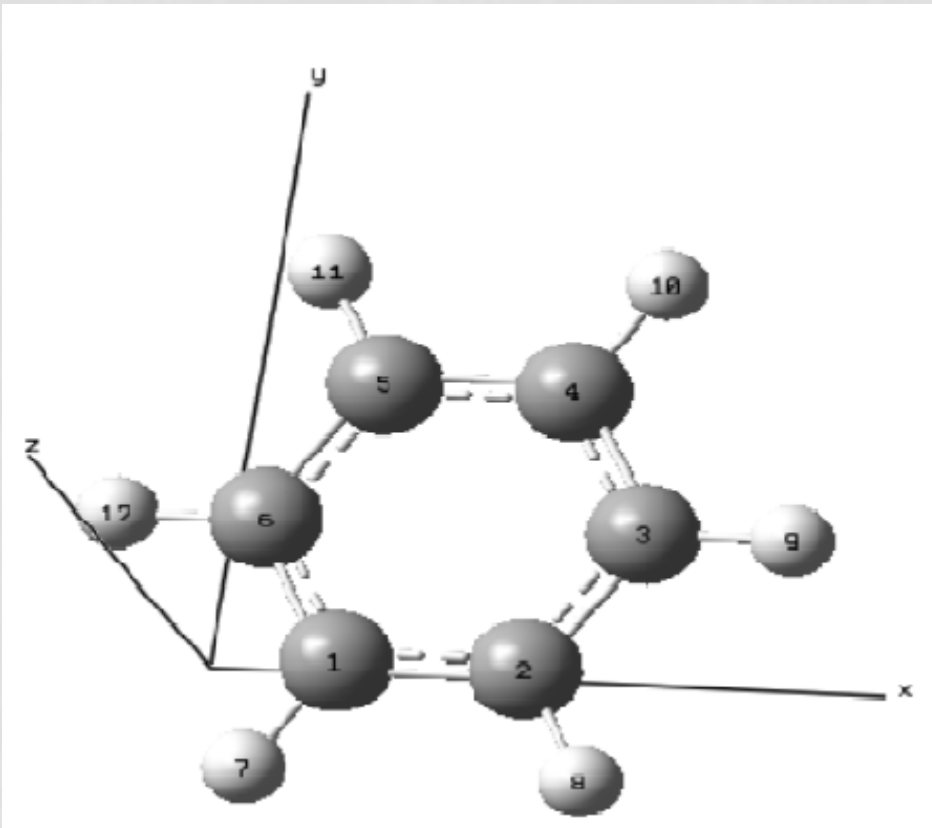
Delete Atom

- با انتخاب این گزینه و کلیک روی هر اتم ، اتم موردنظر حذف میشود.



گزینه های موجود در View

- label که شماره گذاری میکند.
- Cartesian Axes که محور های مختصات را رسم میکند.



- و یکسری امکانات دیگر...

ذخیره کردن فایل و انجام مقدمات محاسبات

- با انجام روند زیر فایل را ذخیره میکنیم.
- Right click → File → save

```
12 - Notepad
File Edit Format View Help
%chk=C:\Users\Asus\Desktop\12.chk
# hf/3-21g geom=connectivity

Title Card Required

0 1
C -0.02557545 -1.06138106 0.00000000
C 1.36958455 -1.06138106 0.00000000
C 2.06712255 0.14636994 0.00000000
C 1.36946855 1.35487894 -0.00119900
C -0.02535645 1.35480094 -0.00167800
C -0.72295745 0.14659494 -0.00068200
H -0.57533445 -2.01369806 0.00045000
H 1.91909255 -2.01389406 0.00131500
H 3.16680255 0.14644994 0.00063400
H 1.91966855 2.30702194 -0.00125800
H -0.57547845 2.30708194 -0.00263100
H -1.82256145 0.14677794 -0.00086200

1 2 1.5 6 1.5 7 1.0
2 3 1.5 8 1.0
3 4 1.5 9 1.0
4 5 1.5 10 1.0
5 6 1.5 11 1.0
6 12 1.0
7
8
9
10
11
12
```

- فایل با فرمت Gzif ذخیره میشود.
- فایل را با برنامه Notepad باز میکنیم.
- تصویر روبرو نمایش مولکول موردنظر است.

دو راه برای انجام محاسبات در گوسین وجود دارد:

- 1- باز کردن فایل ذخیره شده با نوت پد و اعمال دستورات بصورت دستی در آن.
- اگر دقیقاً می دانیم که از گوسین چه می خواهیم و شیوه دستور نویسی آشنایی داریم دیگر نیازی به استفاده از روش گرافیکی نیست و تنها در یک خط، همه آن چیزی که در بخش دستورات گرافیکی گفته شده را می توان خلاصه کرد.
- 2- باز کردن فایل ذخیره شده با GaussView و اعمال دستورات بصورت گرافیکی

• 1- اعمال دستورات بصورت دستی

• خط اول آدرس

• %chk=adres\molecule name.chk

• خط دوم دستورات

• روش کار (space) دستورات (space) #

• بعد روش کار همه چیز را در آن خط پاک میکنیم.

• خط سوم فاصله (Enter)

• خط چهارم عنوان Title Card Required

• خط پنجم فاصله (Enter)

• خط ششم بار و چندگانگی مولکول

• خط هفتم مختصات مولکول

• بعد مختصات هر چیزی که هست را پاک میکنیم.

12 - Notepad

File Edit Format View Help

%chk=C:\Users\Asus\Desktop\12.chk

opt freq b3lyp/6-311+g(d)



خط دستورات

Title Card Required

0 1

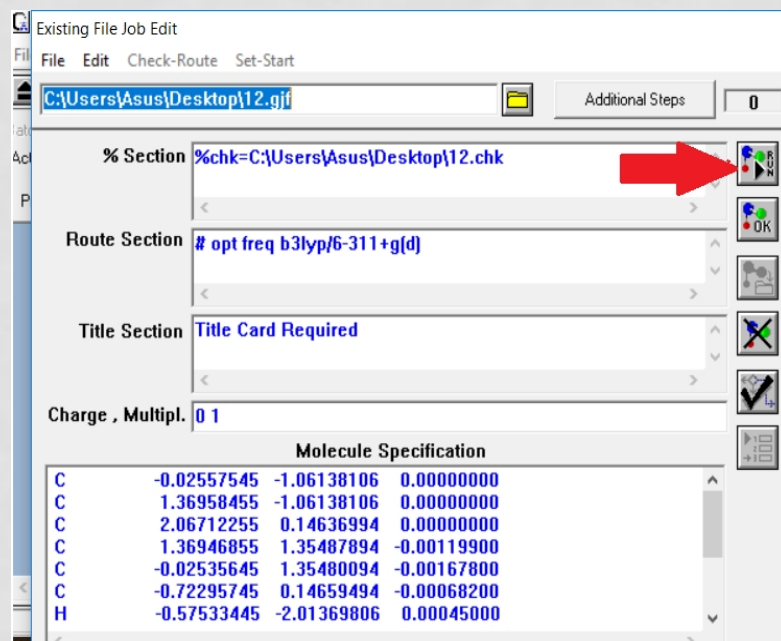
C	-0.02557545	-1.06138106	0.00000000
C	1.36958455	-1.06138106	0.00000000
C	2.06712255	0.14636994	0.00000000
C	1.36946855	1.35487894	-0.00119900
C	-0.02535645	1.35480094	-0.00167800
C	-0.72295745	0.14659494	-0.00068200
H	-0.57533445	-2.01369806	0.00045000
H	1.91909255	-2.01389406	0.00131500
H	3.16680255	0.14644994	0.00063400
H	1.91966855	2.30702194	-0.00125800
H	-0.57547845	2.30708194	-0.00263100
H	-1.82256145	0.14677794	-0.00086200

استفاده از Gaussian برای محاسبه

• نرم افزار گوسین را باز کرده و از دستور زیر برای انتخاب فایل مورد نظر استفاده میکنیم.

• File → Open → select file

• پس از انتخاب فایل صفحه زیر باز میشود و گزینه مشخص شده را برای انجام محاسبات انتخاب میکنیم.



- پس از زدن گزینه Run محل ذخیره فایل را انتخاب میکنیم.
- دقت شود که فایل خروجی دارای پسوند Out می باشد
- سپس نرم افزار شروع به محاسبه میکند

```

Gaussian 09 Revision-A.02-SMP
File Process Utilities View Help
Batch Data: Processing:
Active Job: C:\Users\Asus\Desktop\12.qif Output File: 12
Run Progress: C:\G09W\1110.exe is processing...
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
Requested convergence on RMS density matrix=1.00D-08 within 128 cycles.
Requested convergence on MAX density matrix=1.00D-06.
Requested convergence on energy=1.00D-06.
No special actions if energy rises.
SCF Done: E(RB3LYP) = -232.300730186 a.u. after 2 cycles
Convrg = 0.2400D-09 -U/T = 2.0045
Range of M.O.s used for correlation: 1 150
NBasis= 150 NAE= 21 NBE= 21 NFC= 0 NFD= 0
NROrh= 150 NOA= 21 NOB= 21 NUA= 129 NUB= 129
**** Warning!!: The largest alpha MO coefficient is 0.13918572D+03
Symmetrizing basis deriv contribution to polar:
IMax=3 JMax=2 DiffMx= 0.00D+00
Forming 2-Electron Integral Derivatives

```

- محاسبات زمانی به اتمام میرسد
- که در خط آخر جمله زیر را ببینید.

```

Happiness is a conscious choice, not an automatic response.
-- Mildred Barthel
Job cpu time: 0 days 0 hours 8 minutes 12.0 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 33 Int= 0 D2E= 0 Chk=
Normal termination of Gaussian 09 at Wed Nov 15 16:07:45 2017.

```

- فایل خروجی را در نرم افزار Gauss view باز می کنیم.
- در قسمت result گزینه vibration فعال می شود.
- روی آن کلیک کرده و در پنجره باز شده فرکانس ها را نگاه می کنیم. اگر اولین فرکانس مثبت بود که بهینه سازی به درستی انجام شده ولی اگر منفی بود، ساختار اول را تغییر می دهیم و دوباره بهینه سازی می کنیم.

Mode #	Freq	Infrared
1	411.02	0.0000
2	411.96	0.0003
3	623.61	0.0000
4	623.92	0.0000
5	684.12	133.9720
6	718.57	0.0000
7	858.30	0.0000
8	858.42	0.0000
9	973.15	0.0000
10	973.55	0.0006

Animate Vibration:

Animation Frequency:

Displacement Amplitude:

Show Displacement Vectors Scale:

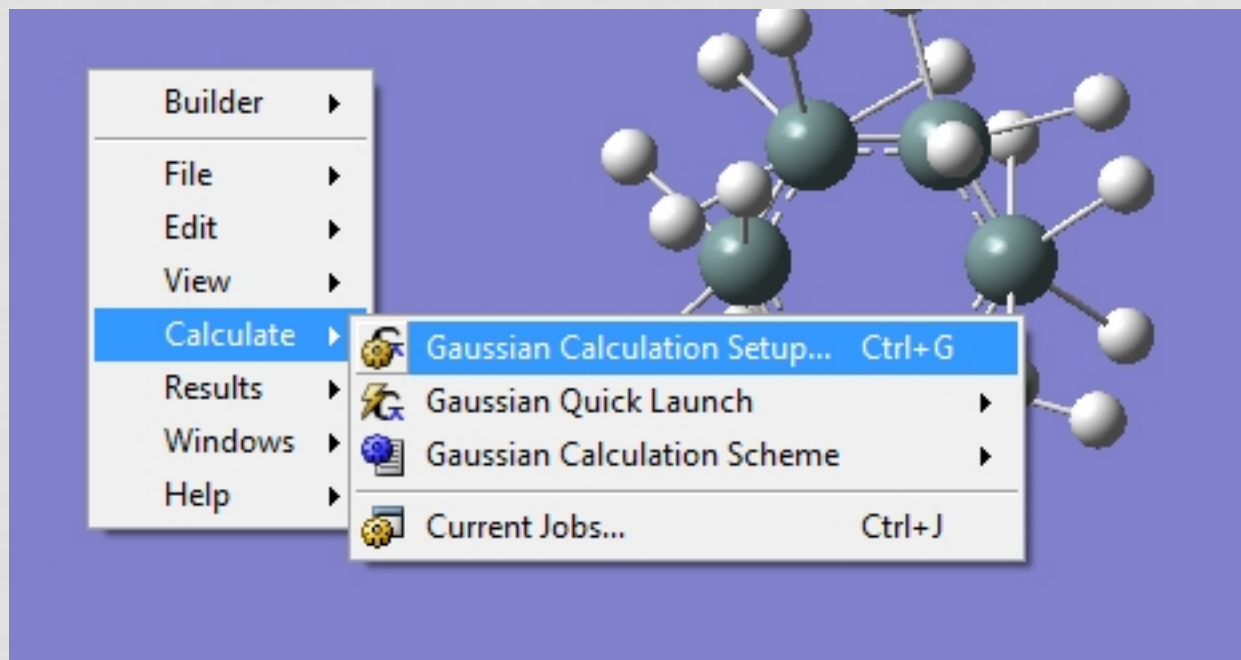
Show Dipole Derivative Unit Vector Scale:

Manual Displacement:

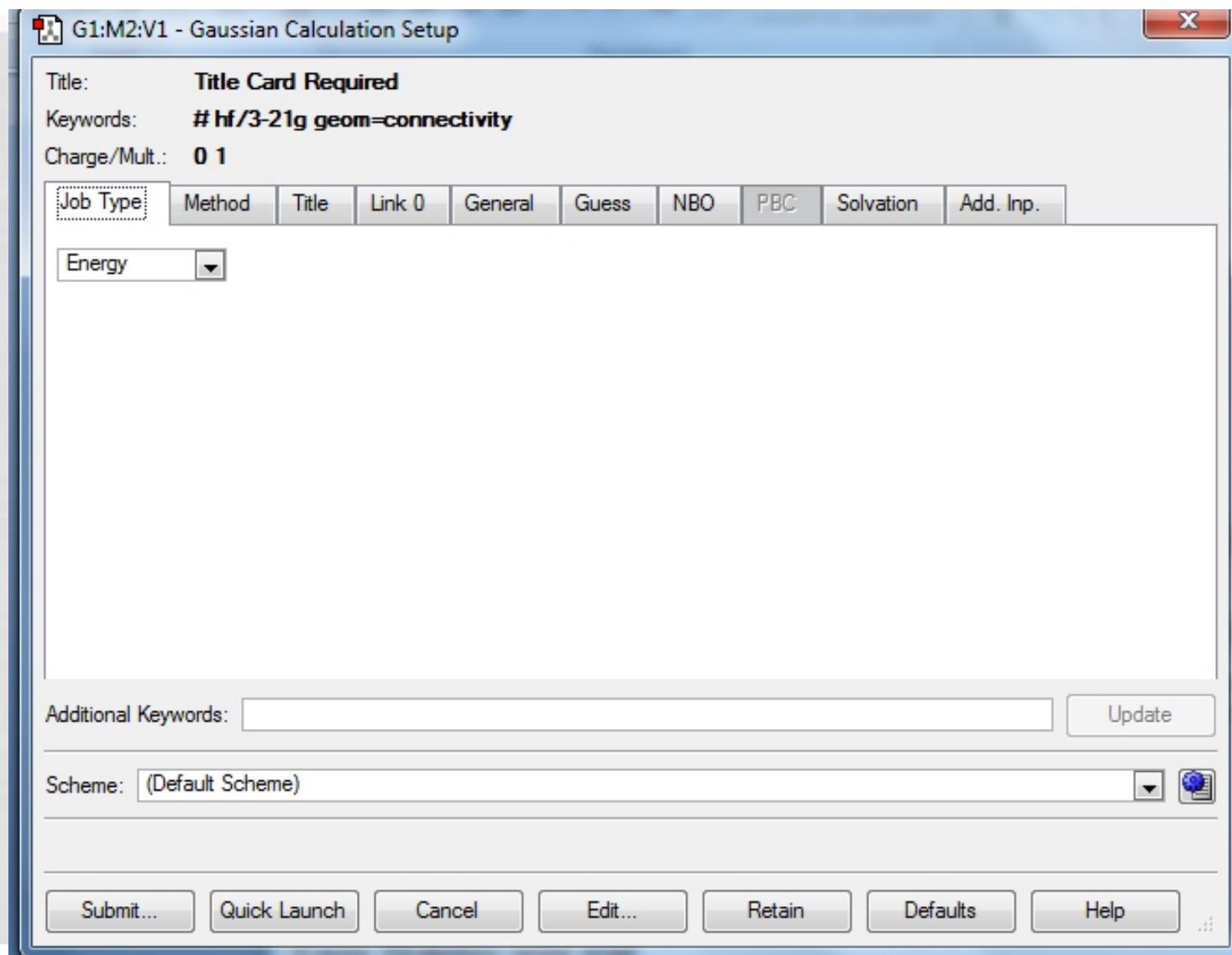
2- اعمال دستورات بصورت گرافیکی

• در این روش فایل ذخیره شده با پسوند `gzf` را مجدداً توسط نرم افزار `GaussView` باز کرده و مراحل زیر را دنبال می کنیم:

- Right Click --à Calculate ---à Gaussian Calculation Setup

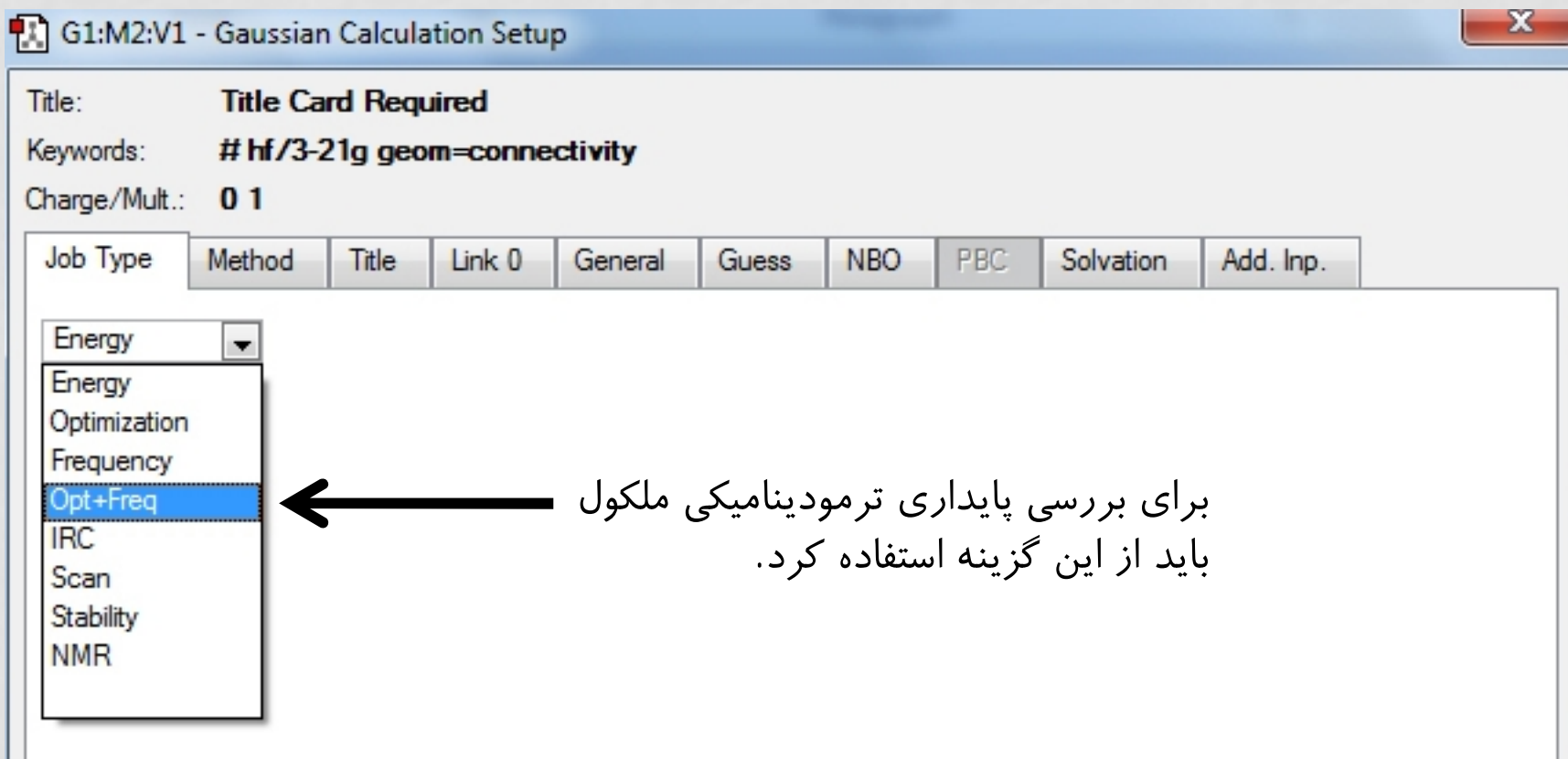


با اجرای دستورات فوق صفحه تنظیمات ظاهر می شود



در صفحه فوق JOB TYPE و METHOD حتما باید تنظیم شوند

• تنظیمات Job Type



The screenshot shows the 'Gaussian Calculation Setup' window. The 'Job Type' dropdown menu is open, displaying the following options: Energy, Optimization, Frequency, Opt+Freq (highlighted), IRC, Scan, Stability, and NMR. An arrow points from the Persian text to the 'Opt+Freq' option.

برای بررسی پایداری ترمودینامیکی ملکول باید از این گزینه استفاده کرد.

با اعمال تنظیم فوق مجموعه ای از تنظیمات ظاهر می شود که لزوما نیازی به تغییر آن ها نیست

G1:M2:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title: **Title Card Required**
Keywords: **# opt freq hf/3-21g geom=connectivity**
Charge/Mult.: **0 1**

Job Type: **Opt+Freq**

Optimize to a: **Minimum** Use RFO step Use Quadratic Macrostep
Calculate Force Constants: **Never** Use tight convergence criteria
Compute Raman: **Default** Compute VCD Save Normal Modes
Compute ROA: **No** Read Incident Light Freqs: **Default** Skip diag. of full matrix

Select Normal Modes Modes: Atoms:
 Anharmonic Corrections Specify Anharmonic Modes:

Additional Keywords:

Scheme: **(Unnamed Scheme)**

تنظیمات METHOD

روش های متفاوتی برای محاسبات کوانتومی وجود دارد. هر روش مزایا و معایبی دارد و می تواند پارامترهای خاصی را اندازه گیری کند. یکی از مهم ترین تفاوت های روش های کوانتومی، تفاوت در زمان انجام محاسبه است. پایه ای ترین، ساده ترین و سریع ترین روش محاسبات Hartree-Fock (HF) است. هرچند دقت این روش کم می باشد اما برای اطمینان از درستی ساختارهای رسم شده و جلوگیری از ایجاد error بسیار مناسب است. روش های دیگر مانند DFT و MP2 همگی برپایه HF هستند و تصحیحاتی را روی آن انجام می دهند تا نتایج بهتری حاصل شود.

در هر روشی علاوه بر نوع روش باید سری پایه (Basis Set) نیز تعیین گردد. سری های پایه تعیین می کنند که در محاسبات، اوربیتال ها تا چه حدی و با چه توابعی وارد محاسبه شوند. آگاهی از سری های پایه کمک می کند تا محاسبات اضافی انجام نشده و در زمان صرفه جویی شود.

آشنایی با ساختار سری های پایه و برخی از پرکاربردترین آن ها

- در یک سری پایه حداقل سه بخش باید وجود داشته باشد و برای بهتر شدن نتایج می توان بخش های بیشتری را به آن افزود:
- از چپ به راست هر سری پایه با یکی از اعداد 3 یا 6 شروع می شود که نشان دهنده تعداد توابع خطی است برای وارد کردن اوربیتال های دورنی اتم ها که نقش کمی در برهمکنش ها و بخصوص واکنش ها و اتصالات پیوندی دارند.
- پس از یک علامت خط تیره (-) که اوربیتال های درونی را از بیرونی جدا می کند دو یا چند عدد دیده می شود که نشان دهنده تعداد و تنوع توابعی است که برای بررسی اوربیتال های بیرونی مورد استفاده قرار می گیرند. بدیهی است که هرچه تعداد این اعداد بیشتر باشد محاسبات دقیق تر و زمان انجام محاسبه نیز بیشتر خواهد شد.
- بعد از دو سری اعداد ذکر شده نوع تابع مورد استفاده ذکر می شود که عموماً تابعیست گوسی و نماد G در سری های پایه بیان کننده همین موضوع است.

آشنایی با ساختار سری های پایه و برخی از پرکاربردترین آن ها

- تنظیمات فوق حداقل های لازم برای شروع یک محاسبه است اما برای انجام محاسبات دقیق تر تنظیمات بیشتری نیز وجود دارد.
- 3-21G، 6-31G و 6-311G از پرکاربردترین سری های پایه هستند.



تنظیمات بیشتر سری های پایه

- پس از حرف **G** می توان از یک یا دو علامت مثبت (+ یا ++) نیز استفاده کرد که اولی توابع نفوذی اتم های غیر هیدروژن و دومی توابع نفوذ اتم های هیدروژن موجود در ملکول مورد بررسی را به توابع قبلی اضافه می کند تا نتایج بهتری حاصل شود.
- علاوه بر علامت های فوق دو نماد **d** و **p** (یا نمادهای کامل تری چون **3df** و **3pd** و ...) را نیز می توان به توابع قبلی افزود که اولی اوربیتال های **d** و ... اتم های غیر هیدروژنی و دومی اوربیتال های **p** و ... اتم های هیدروژن موجود در ملکول را به محاسبات اضافه کرده و نتایج را دقیق تر می کند.
- در اسلاید بعد یکی از پرکاربردترین تنظیمات همزمان روش و سری پایه آورده شده است که نتایج بسیار خوبی ایجاد کرده و در بسیاری از کارهای محاسباتی مورد استفاده قرار می گیرد. پس از انجام تنظیمات روی گزینه **submit** کلیک کرده و محاسبات شروع می شود.

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title:

Keywords: **# b3lyp/6-311++g(d,p) geom=connectivity**

Charge/Mult.: **0 1**

Job Type Method Title Link 0 General Guess NBO PBC Solvation Add. Inp.

Multilayer ONIOM Model

Method: Ground State **1** DFT... Default Spin B3LYP **2**

Basis Set: 6-311G **3** ++ (d **4** . p **5**) **6**

Charge: 0 Spin: Singlet

Use sparse matrices

Additional Keywords: Update

Scheme: (Unnamed Scheme)

7 Submit... Quick Launch Cancel Edit... Retain Defaults Help

همانطور که در اسلایدهای قبل گفته شد با اتمام محاسبات و مثبت بودن اولین فرکانس در بخش vibration در می یابیم که محاسبات به درستی انجام شده است. همچنین در این بخش می توانیم انواع ارتعاشات را بصورت انیمیشن دیده و حتی طیف های ارتعاشی و رامان ملکول مورد نظر را مشاهده کنیم. در ادامه نتایج ملکول CO2 آورده شده است.

The screenshot displays two windows from a software application. The left window, titled "G1:M1:V1 - Display Vibrations", contains a table with the following data:

Mode #	Freq	Infrared	Raman Activity	Depolar-P	Depolar-U
1	659.01	65.3409	0.0000	0.0000	0.0000
2	659.01	65.3409	0.0000	0.0000	0.0000
3	1427.62	0.0000	10.8857	0.2141	0.0000
4	2463.51	729.4729	0.0000	0.0000	0.0000

Below the table are controls for animating vibrations, including sliders for frequency and amplitude, and checkboxes for showing displacement vectors and dipole derivative unit vectors. The right window, titled "G1:M1:V1 - CO2 VIB.LOG", shows a 3D ball-and-stick model of a CO2 molecule with a central carbon atom (grey) and two oxygen atoms (red). A context menu is open over the model, listing options such as Summary..., Charge Distribution..., Surfaces/Contours..., Vibrations..., NMR..., UV-VIS..., Scan..., IRC/Path..., Trajectory..., Optimization..., View File, Stream Output File, Builder, File, Edit, View, Calculate, Results, Windows, and Help. The status bar at the bottom indicates "3 atoms, 22 electrons, neu" and "Inquire Select Atom 1".

