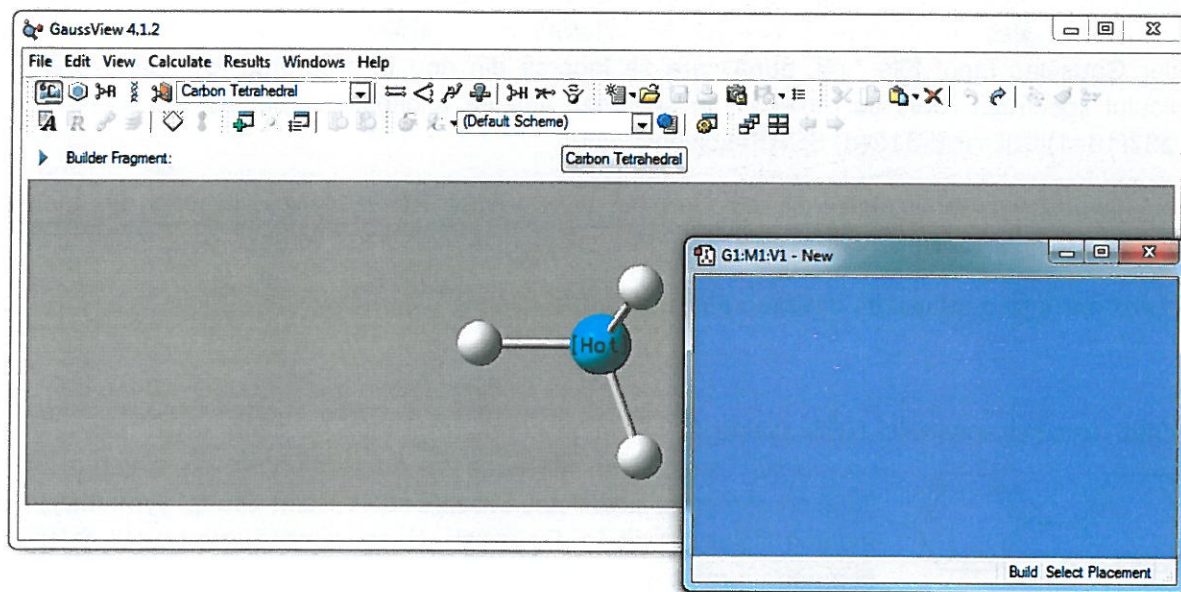


## Calculul proprietăților moleculare

**Obiectivele lucrării.** Proiectarea moleculelor și vizualizarea proprietăților moleculare calculate folosind programul GaussView. Calculul proprietăților moleculare, în particular spectrele RMN și RES, folosind programul Gaussian.

În cadrul lucrării de laborator vor fi folosite două programe: Gaussian pentru calculul proprietăților moleculare și GaussView pentru proiectarea structurilor moleculare.

La deschiderea programului GaussView pe ecran vor apărea două ferestre: fereastra de control și fereastra pentru proiectarea moleculelor (Figura 6.1)



**Figura 6.1.** Programul GaussView. Fereastra control și fereastra pentru proiectarea moleculelor.

Pasul următor constă în proiectarea moleculei de interes. Primele patru iconițe din fereastra de control sunt utile în acest sens. Prima iconiță permite plasarea unui atom, a doua permite plasarea de fragmente predefinite, cum ar fi benzenul, piridina, etc., a treia permite crearea unor grupuri R standard, iar a patra iconiță permite crearea unor structuri moleculare biochimice, cum ar fi aminoacizi sau perechi de baze ADN.

Prin plasarea cursorului pe fiecare iconiță în parte pe ecran se afișează funcția fiecăreia. După selectarea unei iconițe, în continuare este necesară selectarea atomului/fragmentului specific dorit. De exemplu, la selectarea iconiței pentru atomi (prima iconiță) aceasta va crea în mod implicit la un atom de carbon cu hibridizarea  $sp^3$ . Pentru a schimba această selecție, este necesar un click pe icon-ul "Carbon Tetrahedral" pentru a oferi posibilitatea selecției oricărui

element din sistemul periodic. Odată selectat atomul dorit, acesta poate fi plasat în moleculă prin click în fereastra de proiectare.

După ce toți atomii de interes au fost poziționați în fereastra de proiectare, se alege iconița "Modify Bond". La selectarea a doi atomi consecutiv se deschide o fereastră ce permite alegerea unui tip de legătură. Pentru eventualele corecții se alege iconița "Delete Atom". După proiectarea structurii, se recomandă folosirea iconiței "Clean" pentru o optimizare intuitivă a structurii.

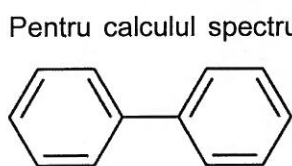
Structura moleculară proiectată se salvează sub formatul Gaussian Input File \*.gjf.

În continuare vom calcula spectrele RMN ale moleculelor metanol și etanol și spectrul RES al radicalului anionului bifenil. După proiectarea structurilor moleculare în programul GaussView și salvarea acestora în format \*.gjf, se importă aceste fișiere în programul Gaussian, cu comanda File/Open.

Programul Gaussian se rulează după introducerea următorilor parametri în fereastra de comandă: #P B3LYP/6-31G(d) opt cu rolul de optimizare a geometriei moleculare. Se vizualizează fișierul \*.out cu programul GaussView. Principalele proprietăți moleculare pot fi vizualizate accesând în meniul principal Results/Summary. Molecula se salvează din nou ca fișier Gaussian Input File \*.gjf, după care se încarcă din nou în programul Gaussian. Pentru calculul spectrului RMN cu molecula în solventul apă se folosește comanda: #P NMR(Giao) lop33(10=1) B3LYP/6-31G(d) SCRF=solvent=water

Noul fișier \*.out se vizualizează cu GaussView. Spectrul RMN se vizualizează din meniul principal Results/NMR. Referința se alege TMS calculat cu același set de bază ca și molecula.

### Se vor extrage deplasările chimice ale protonilor.



Pentru calculul spectrului RES al radicalului anion bifenil, mai întâi se generează molecula în programul GaussView. Molecula se alege planară, de simetrie D<sub>2h</sub>, folosind comanda Edit/Point Group/Enable Point Group Symmetry) Se încarcă fișierul \*.gjf în Gaussian și se rulează programul folosind comanda următoare: #P B3LYP/6-31G(d) opt Prop=EPR Astfel se obține optimizarea geometriei și spectrul RES al acesteia. Sarcina se alege -1 iar multiplicitatea 2.

Se deschide fișierul \*.out în programul Notepad și se **extrag constantele de cuplaj hiperfin calculate ale protonilor radicalului**. Constantele se găsesc în fișierul output într-un tabel (Fermi energies) exprimate în diferite unități de mărime.

Happy Computing!