

典型虚拟仿真实验教案

实验二 丙烯分子几何构型的优化——极小值点的寻找

实验目的:

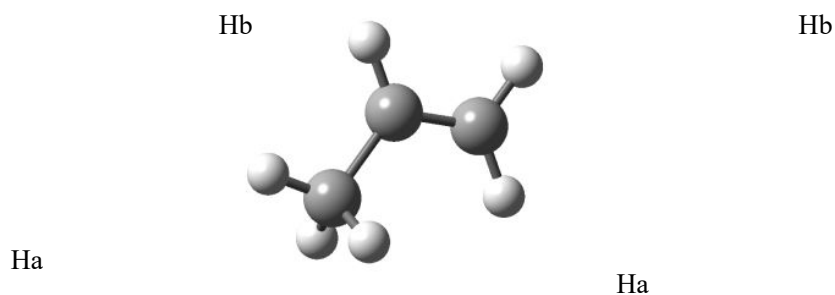
掌握分子几何构型的优化寻找分子平衡几何构型。

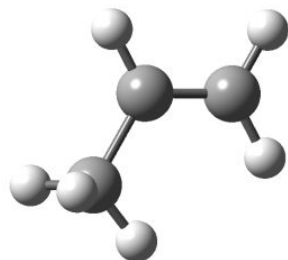
基本原理:

由于分子几何构型而产生的能量的变化可以用势能面表示。几何优化做的工作通常是寻找势能面上的极小值,而这个极小值,就是分子的稳定的几何形态。对于所有的极小值点和鞍点,其能量的一阶导数,也就是梯度,都是零,这样的点被称为稳定点。但它们的Hessian矩阵(能量对坐标的二阶导数构成的矩阵)性质不同,极小值点的Hessian矩阵中每个值都大于零;而过渡态是一级极大值点,Hessian矩阵只有一个负本征值,并且在负本征值方向能量最高,其余方向能量低。所有的成功的优化都在寻找稳定点,虽然找到的并不一定就是所预期的点。几何优化由初始构型开始,计算能量和梯度,然后决定下一步的方向和步长,其方向总是向能量下降最快的方向进行。大多数的优化也计算能量的二阶导数,来修正力矩阵,从而表明在该点的曲度。本实验是寻找极小值点。

操作要求:

- 1、练习 G09 与 Gaussview 的基本操作。
- 2、构建分子构型(a)和(b), 见下图:
使用两种方法: Gaussview 中构建和自己输入内坐标
- 3、把分子投入到 G98 中进行几何构型优化。(opt)
理论方法与基组为: HF/6-31G(d)
- 4、练习用 Gaussview 观看结果。





(a) $\text{H}_a\text{-C-C-H}_b = 0^\circ$

(b) $\text{H}_a\text{-C-C-H}_b = 180^\circ$

数据记录与处理:

- 1、记下优化每种构型的优化步数，以及最后一步优化中的四个收敛条件的值，满足收敛条件的个数，以及优化几何构型的能量值。
- 2、比较两种构型的能量，指出哪个是丙烯的最稳定构型？