

«Программа Gaussian»

Выполнили:ст.гр.МОС-18-01

**Газизова Е.В.
Проскурякова Е.А.**

Разработчик

Квантово-химический программный пакет Gaussian предназначен для расчета структуры и свойств молекулярных систем как в газофазном так и конденсированном состоянии был разработан Джоном Поплом и его исследовательской группой.

За разработку вычислительных методов квантовой химии Дж. Попл был награжден Нобелевской премией в 1998.



Структура программы

L0	<i>Initializes program and controls overlaying (Инициализация программы и управление оверлеями)</i>
L1	<i>Processes route section, builds list of links to execute, and initializes scratch files Раздел маршрута обработки, построение списка выполняемых линков, и инициализация вспомогательных файлов</i>
L101	<i>Reads title and molecule specification Считывание заголовка спецификации молекулы</i>
L102	<i>FP optimization FP-оптимизация</i>
L103	<i>Berny optimizations to minima and TS, STQN transition state searches Берни оптимизация к минимуму и поиск переходных состояний</i>
L105	<i>MS optimization MS -оптимизация</i>
L106	<i>Numerical differentiation of forces/dipoles to obtain polarizability/ hyerpolarizability Численное дифференцирование сил/диполей с целью получения поляризованности/гипер поляризованности</i>

Ввод исходных данных для квантово-химических расчетов

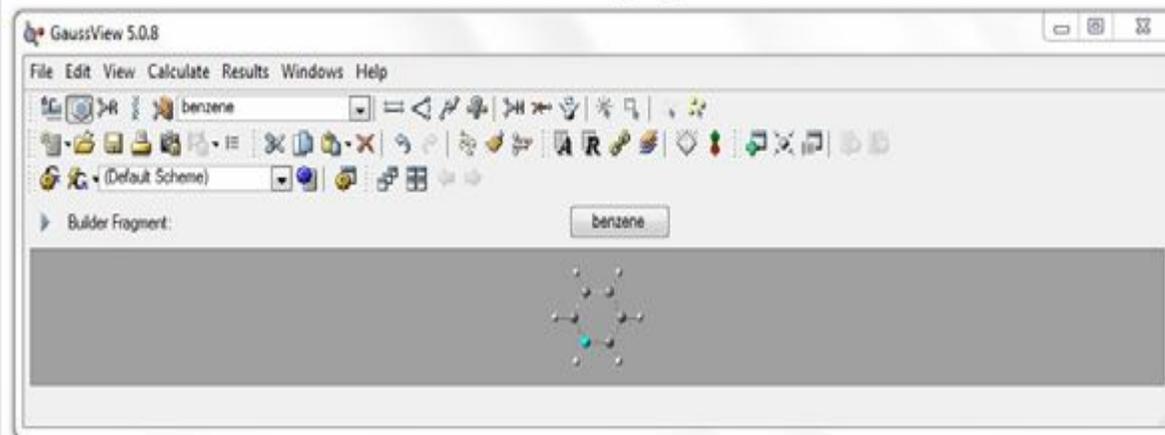
Программа Gaussian может управляться в последовательном или параллельном режиме. Для ввода исходных данных составляют файл задания. Файл-задание состоит главным образом из спецификации задачи и спецификации молекулы.

Пример для расчета молекулы воды исходный файл-задание имеет вид

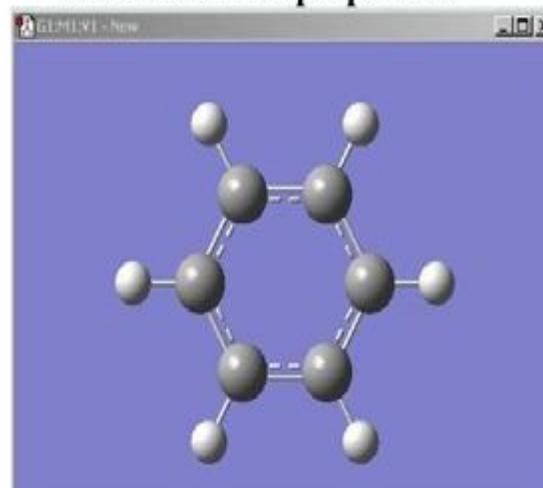
#T HF/6-31G(d,p) Opt	Спецификация задачи
Water molecule geometry optimisation HF with 6-31G** basis set	Заголовок задачи
0 1	Заряд и мультиплетность
O H 1 R H 1 R 2 A	Z-матрица
R 0.95 A 106.2	Переменные Z-матрицы

GaussianView

Главное окно программы



Рабочее окно программы

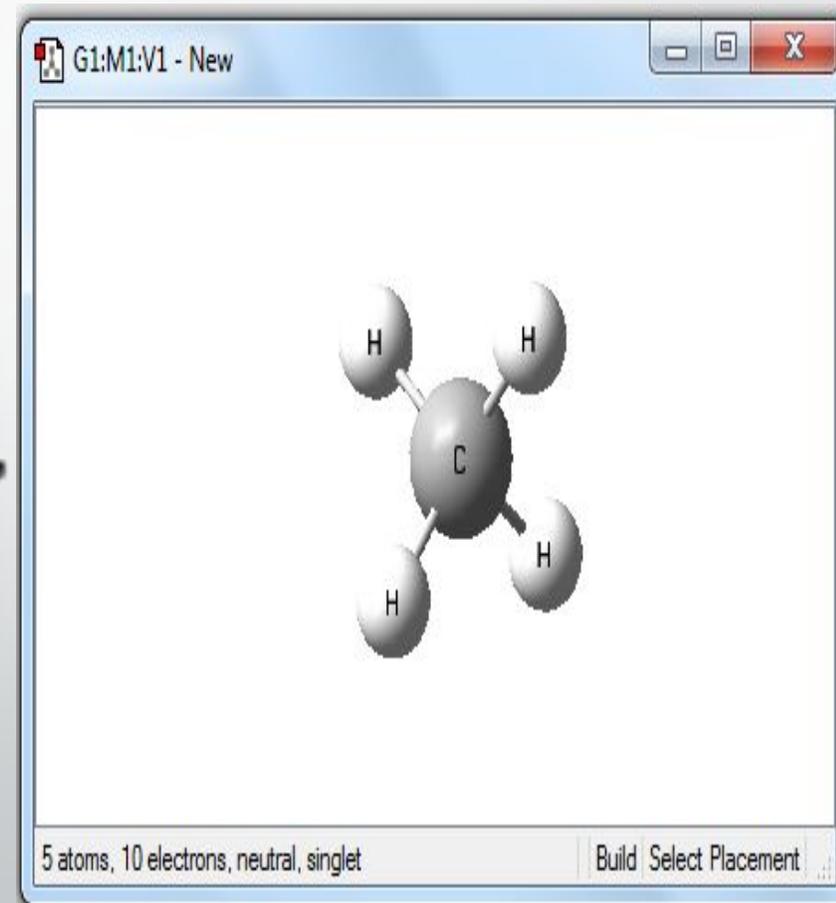
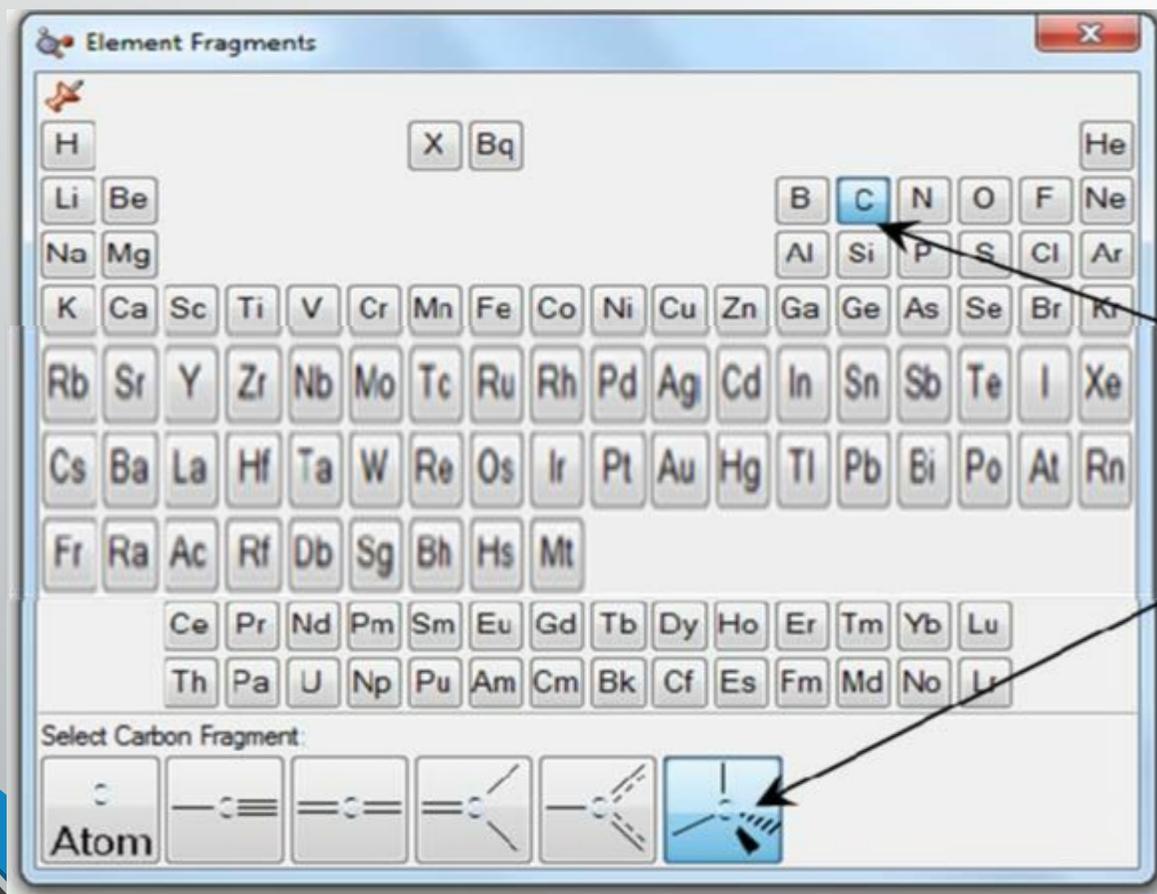


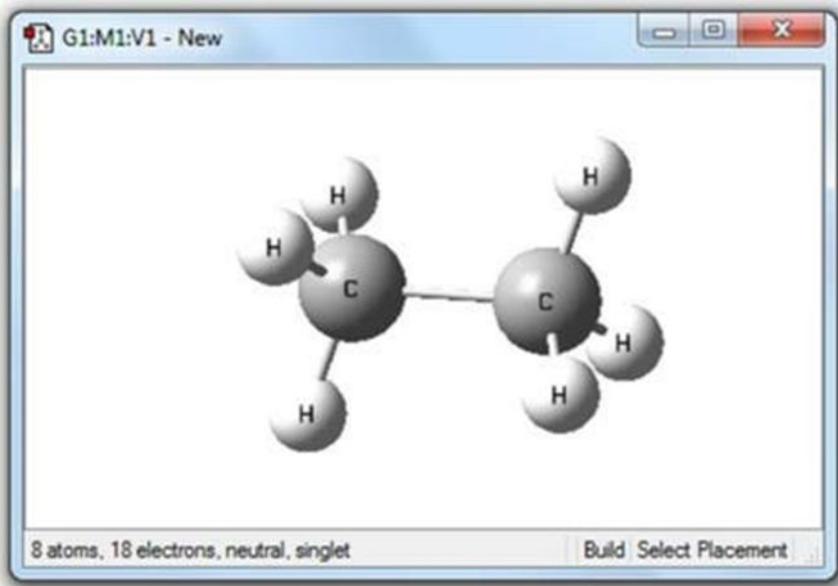
Главное меню

Меню Инструментов

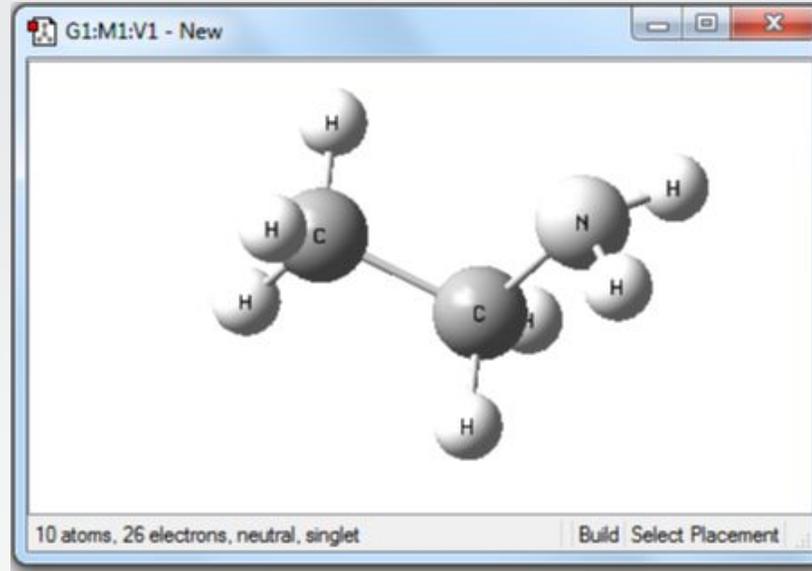
The image shows a screenshot of the GaussView 5.0.8 software interface. The window title is "GaussView 5.0.8". The menu bar includes "File", "Edit", "View", "Calculate", "Results", "Windows", and "Help". The toolbar contains various icons for file operations, molecule building, and visualization. A dropdown menu is open, showing "Carbon Tetrahedral" as the selected fragment. Below the toolbar, there is a "Builder Fragment:" section with a "Carbon Tetrahedral" button. The main workspace displays a ball-and-stick model of a carbon tetrahedron. Annotations include dashed lines and arrows pointing from the main menu and instrument menu labels to their respective icons in the software interface. At the bottom, there are four icons representing different molecular fragments: a diatomic molecule, a triangle, a bent chain, and a diatomic molecule with different colors.

Создание молекулы в программе *GaussView*

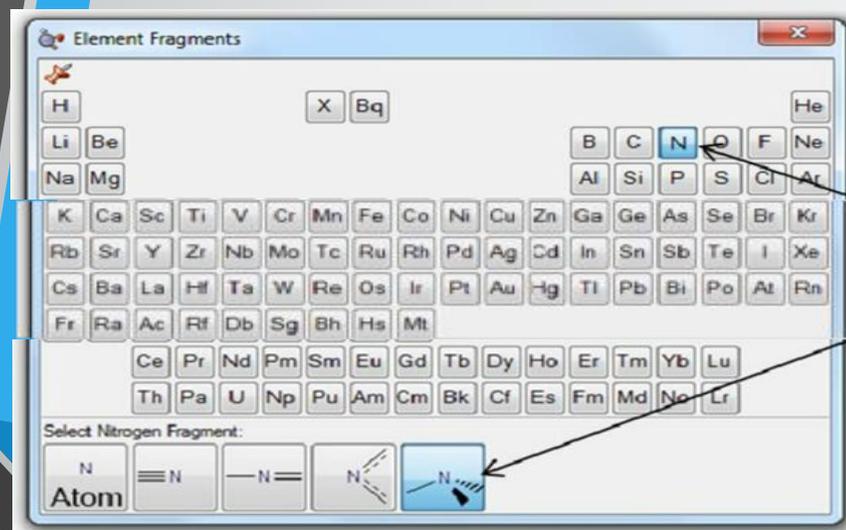




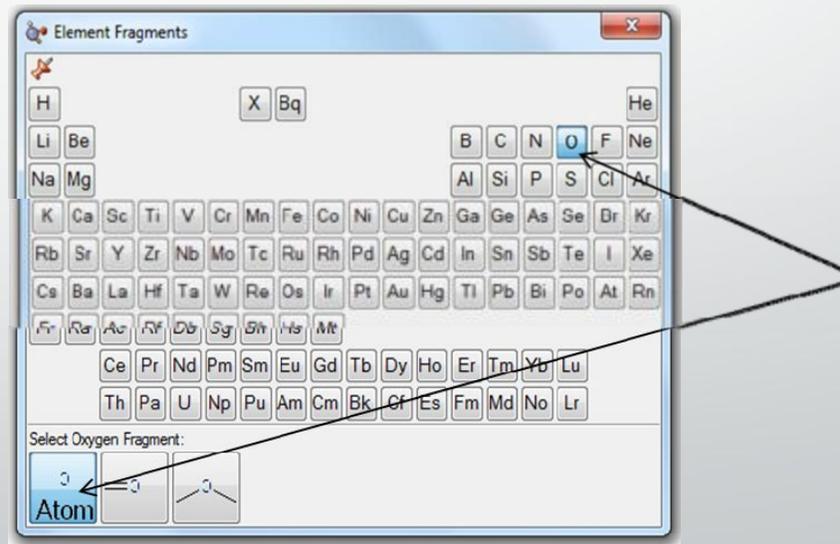
Молекула этана



Молекула этиламина

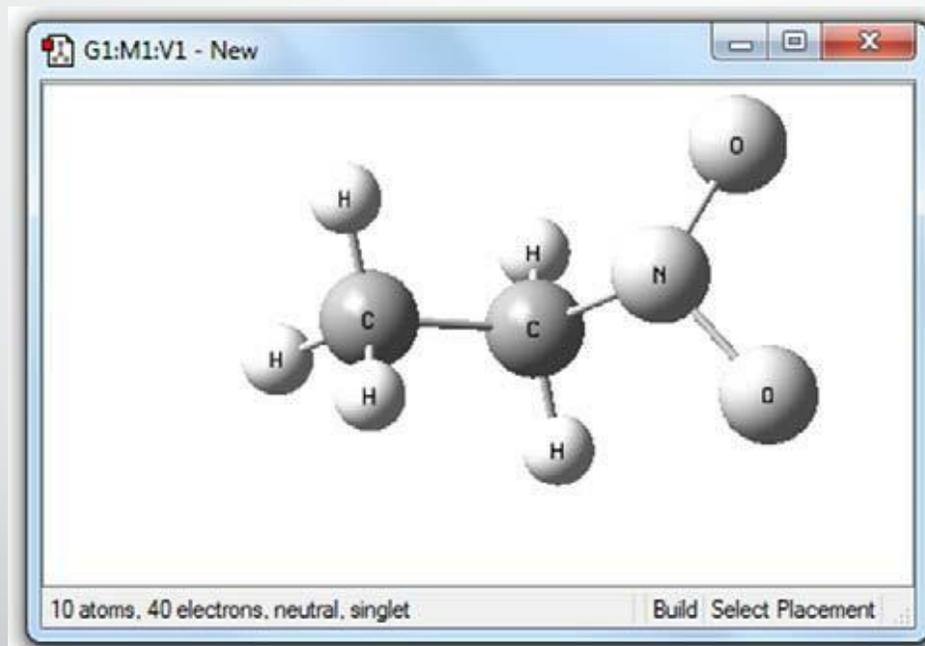


Выбор фрагмента атома азота

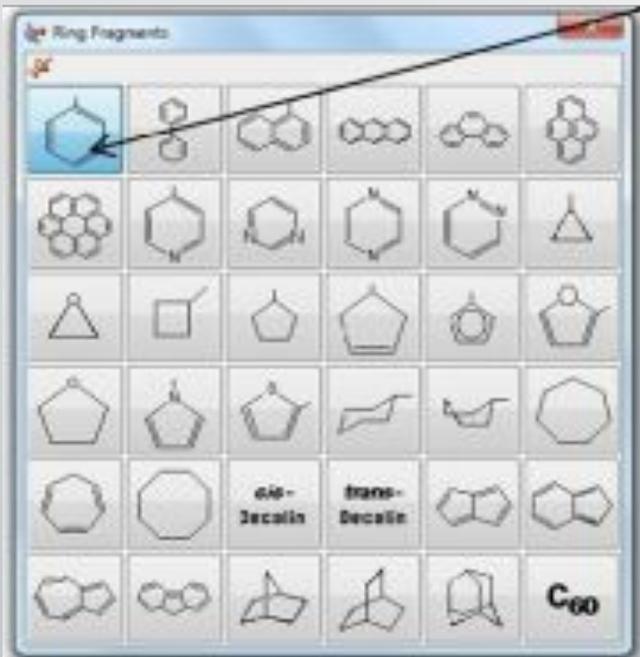


Выбор атома кислорода

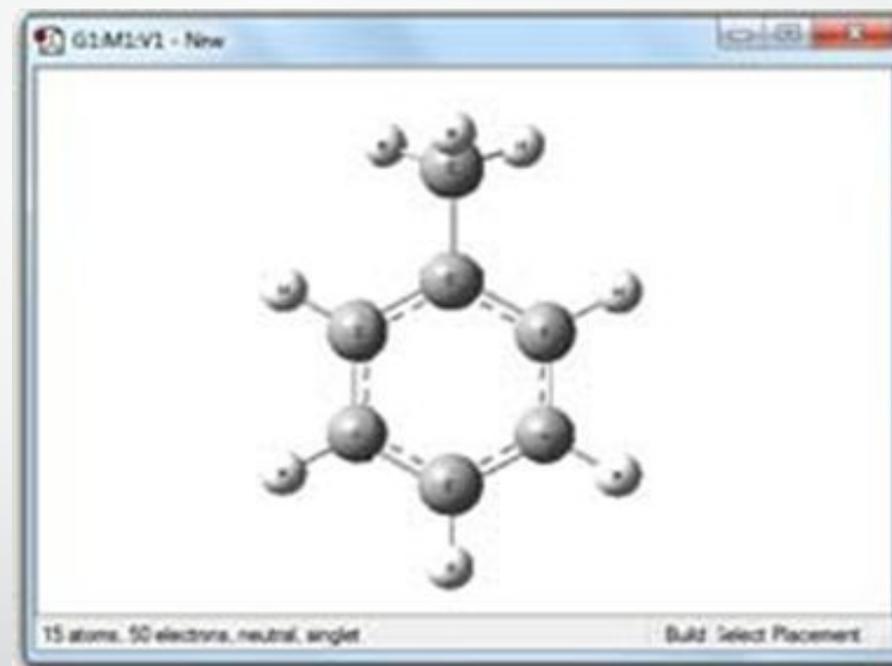
В результате указанных действий задается
молекула нитроэтана



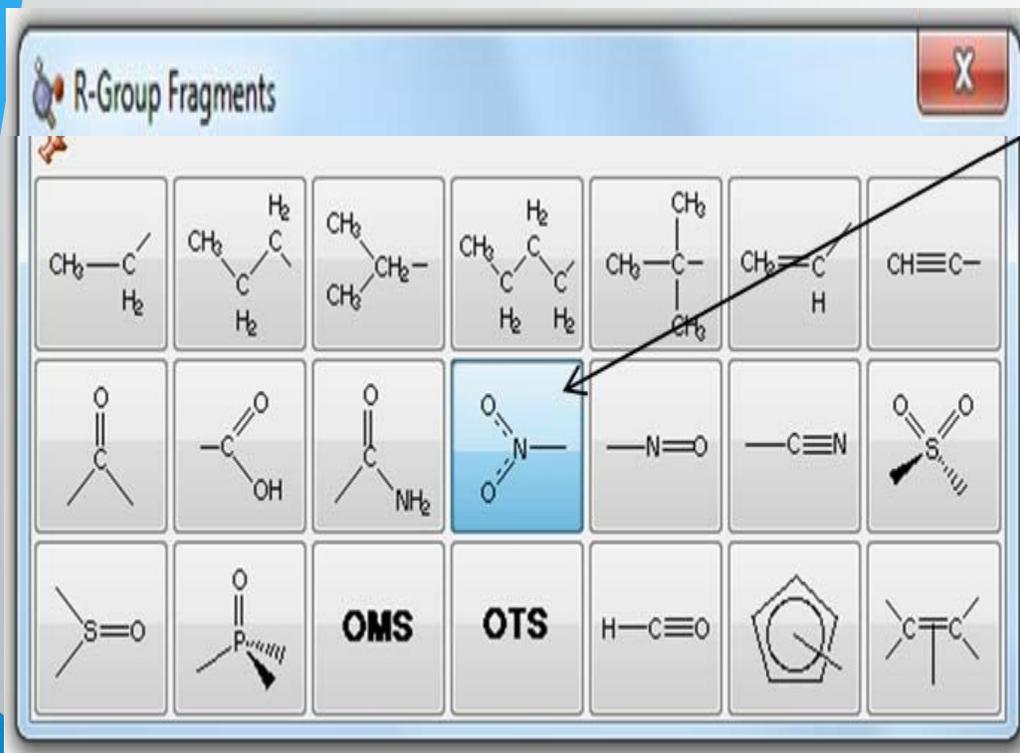
Построение молекулы 2-метил-1,3,5-тринитробензола методом последовательного добавления циклических и радикальных фрагментов.



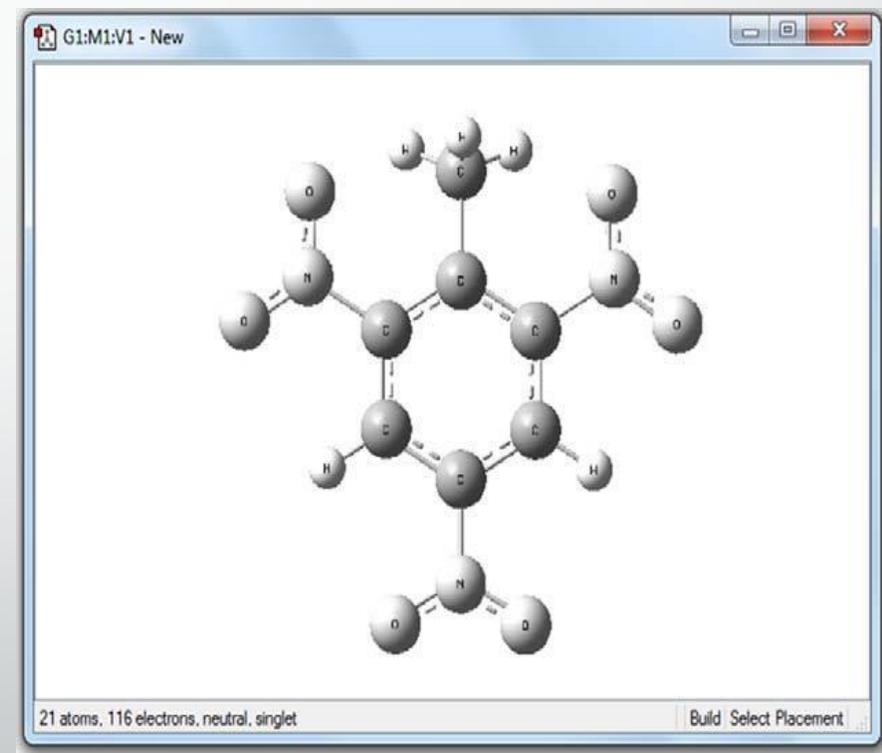
Выбор молекулы бензола



Молекула метилбензола



Выбор радикального фрагмента NO₂



Молекула 2-метил-1,3,5-тринитробензола

В заключении Gaussian выдает полезную цитату, например

- «У времени есть замечательный способ отсеивать тривиальное.
- Ричард Бен Сэпир»
- Признаком корректного завершения программы является обязательная финальная фраза, содержащая затраченное на расчет время и прочую информацию

Отличительной особенностью программы Gaussian является:

То, что в данной программе можно производить расчет энергетических параметров, таких как энтропия, энтальпия и расчет энергии Гиббса, проводить исследование химических реакций, анализ заселенностей по Малликену и оптимизацию геометрии молекулы.

Вывод

- Несмотря на то, программа имеет удобный пользовательский интерфейс и ориентирована не только на химиков-теоретиков, но и на экспериментаторов, что является одним из ее очевидных преимуществ. Программа имеет и ряд значительных недостатков, таких как:
 - - программа работает на английском и все предоставляемые на официальном сайте ролики по обучению предоставляются только на английском языке, что затрудняет работу с программой;
 - - также, программа является коммерческой, что безусловно снижает спрос на неё;
 - -также необходима визуализация выходных файлов, создаваемых в ходе расчета в программе *Gaussian*, необходимо использовать стороннюю программу, программу визуализатор *GaussView*, предназначенную для создания входных файлов

Список используемой литературы

- 1. Апостолова Е.С., Михайлюк А.И., Цирельсон В.Г. Квантово-химическое описание реакций. М.: Издательский центр Министерства образования РФ, 1999 – 30 с.
- 2. Блатов В.А., Шевченко А.П., Пересыпкина Е.В. Полуэмпирические методы квантовой химии. Самара: Изд-во «Универс-групп», 2005. 32 с.
- 3. Бурштейн К.Я. Квантовохимические расчеты в органической химии и молекулярной спектроскопии/ К. Я. Бурштейн, П.П. Шорыгин. - М.: Наука, 1989. 104с.
- 4. Foresman James B. Exploring Chemistry with electronic structure methods. Gaussian, Inc. 1996 – 302 p.
- 5. Ochterski Joseph W. Thermochemistry in Gaussian. Gaussian, Inc. 2000 – 19 p.



Спасибо за внимание