

Квантовохимическая программа «GAMESS»

Выполнили: ст. гр. МОС-18-01

Савельева

Т. Фаязова

В.П.

Г.

- Программа GAMESS [9, 11, 12] (General Atomic and Molecular Electronic Structure System) предназначена для расчетов атомных и молекулярных структур. Разработчики программы – группа Марка Гордона, Университет штата Айова, США.
- Основным достоинством GAMESS-PC является высокая скорость работы по сравнению с другими квантовохимическими программами, что немаловажно при исследованиях сложных молекулярных систем.

FAR Manager

- Ярлычок запуска программы располагается на рабочем столе или на панели инструментов рабочего стола в виде синего значка. При запуске программы открывается панель приятного синего цвета, которая представляет собой двухоконное открытое меню папки Far.
- Программа легко управляется как мышкой, так и с клавиатуры и необходима нам для создания исходных файлов и запуска рас-чета в программе GAMESS.



FAR Manager

- Открытое окно программы FAR



The screenshot shows the FAR Manager application window titled '{C:\Program Files\Far} - Far'. The interface is split into two panes, both displaying the directory contents of 'C:\Program Files\Far'. The left pane shows a list of files and folders, including 'Addons', 'Documentation', 'Plugins', 'ClearPluginsCache.', 'Description', 'Far.exe', 'Far.ico', 'Far.Site.txt', 'FarEng.hlf', 'FarEng.lng', 'FarRus.hlf', 'FarRus.lng', 'File_id.diz', 'License.txt', 'License.xUSSR.txt', 'Readme.txt', and 'register.frm'. The right pane shows the same list, but with 'uninstall.log' added to the end. Both panes indicate a total size of 1,202,532 bytes in 19 files. The status bar at the bottom shows the current directory 'C:\Program Files\Far>' and a menu with options: 1Левая, 2Правая, 3Смотр., 4Редак., 5Печать, 6Связь, 7Искать, 8Истор, 9Видео, 10Дерево.

```
{C:\Program Files\Far} - Far
```

```
C:\Program Files\Far 12:53
```

И	Имя	Имя	Имя
..	Register.txt	..	Register.txt
Addons	RestoreSettings.bat	Addons	RestoreSettings.bat
Documentation	SaveSettings.bat	Documentation	SaveSettings.bat
Plugins	Uninstall.exe	Plugins	Uninstall.exe
ClearPluginsCache.	uninstall.log	ClearPluginsCache.	uninstall.log
Description		Description	
Far.exe		Far.exe	
Far.ico		Far.ico	
Far.Site.txt		Far.Site.txt	
FarEng.hlf		FarEng.hlf	
FarEng.lng		FarEng.lng	
FarRus.hlf		FarRus.hlf	
FarRus.lng		FarRus.lng	
File_id.diz		File_id.diz	
License.txt		License.txt	
License.xUSSR.txt		License.xUSSR.txt	
Readme.txt		Readme.txt	
register.frm		register.frm	

Shareware версия

Вверх 10.05.11 18:22

1,202,532 байт в 19 файлах

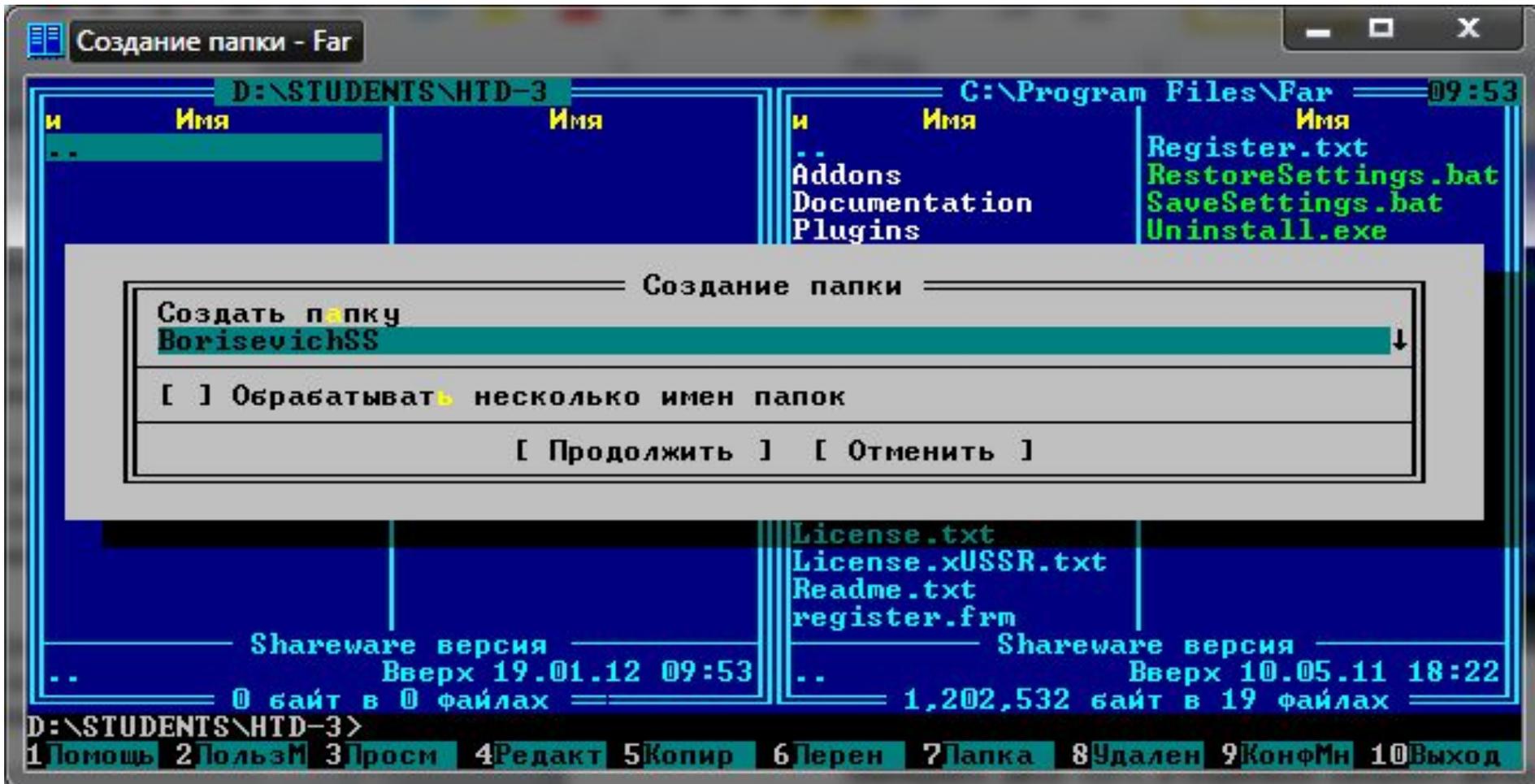
```
C:\Program Files\Far>
```

1Левая 2Правая 3Смотр. 4Редак. 5Печать 6Связь 7Искать 8Истор 9Видео 10Дерево

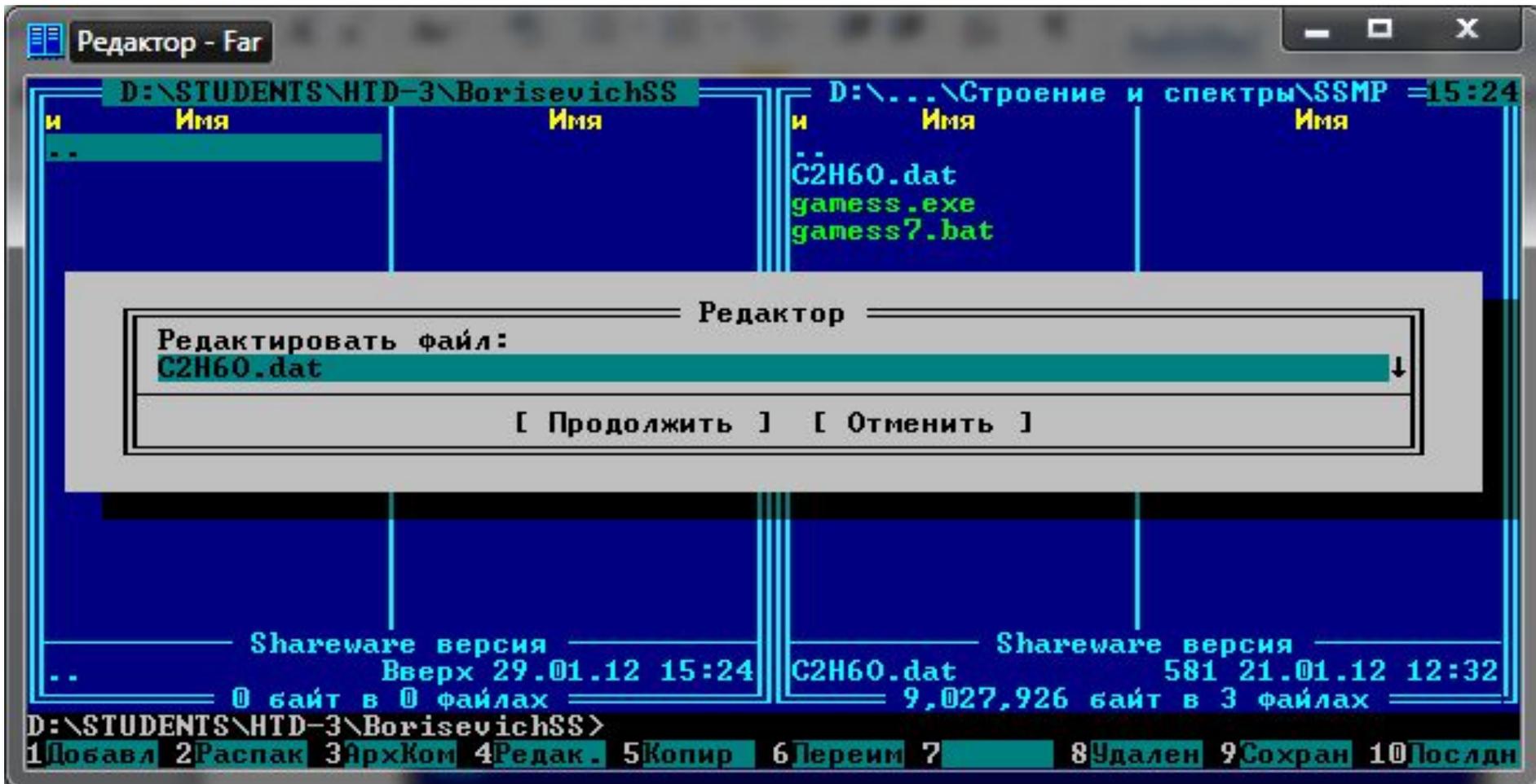
Выбор диска



Создаем папку «BorisevichSS»



Создаем исходный файл



Исходный файл

```
редактирование C2H6O.dat - Far
D:\...\isevichSS\C2H6O.dat Win Строка 14/19 Кол 1 72
?
$contrl scftyp=rhf runtyp=optimize exetyp=run coord=zmt $end
$basis gbasis=am1 $end
$statpt nstep=250 hssend=.t. $end
$system timlim=1200 memory=400000000 $end
$DATA
C2H6O
C1
C
O 1 1.43
C 2 1.43 1 120.0
H 3 1.10 2 110.0 1 180.0
H 1 1.10 2 110.0 3 180.0
H 3 1.10 2 110.0 4 -120.0
H 3 1.10 2 110.0 4 120.0
H 1 1.10 2 110.0 5 120.0
H 1 1.10 2 110.0 5 -118.0
$END
```

1 2 3 4 5 Печать 6 7 8 Строка 9 Видео 10

Запускаем расчет

```
{D:\STUDENTS\HTD-3\BorisevichSS} - Far
D:\...лины\Строение и спектры\SSMP
и      Имя
C2H60.dat
gamess.exe
gamess7.bat

D:\STUDENTS\HTD-3\BorisevichSS 13:24
и      Имя
C2H60.dat
gamess.exe
gamess7.bat

Shareware версия
GAMESS7.BAT      1809 20.12.98 15:14
9,028,360 байт в 3 файлах

Shareware версия
GAMESS7.BAT      1809 20.12.98 15:14
9,028,047 байт в 3 файлах

D:\STUDENTS\HTD-3\BorisevichSS>GAMESS7.BAT C2H60.dat C2H60.gms
1Левая 2Правая 3Смотр. 4Редак. 5Печать 6Связь 7Искать 8Истор 9Видео 10Дерево
```

Поиск необходимой информации в конечном файле

Поиск - Far

D:\...S\HTD-3\BorisevichSS\C2H60.gms Win 417241 Кол 0 100%

ROT.	3.718	3.718	-23.837	12.472	12.472	92.421
UIB.	215.564	215.564	208.913	28.102	28.102	22.310
TOTAL	223.001	225.480	144.611	53.046	61.360	271.237

Поиск

Искать
heat

Искать текст Учитывать регистр
 Искать 16-ричный код Только целые слова
 Обратный поиск

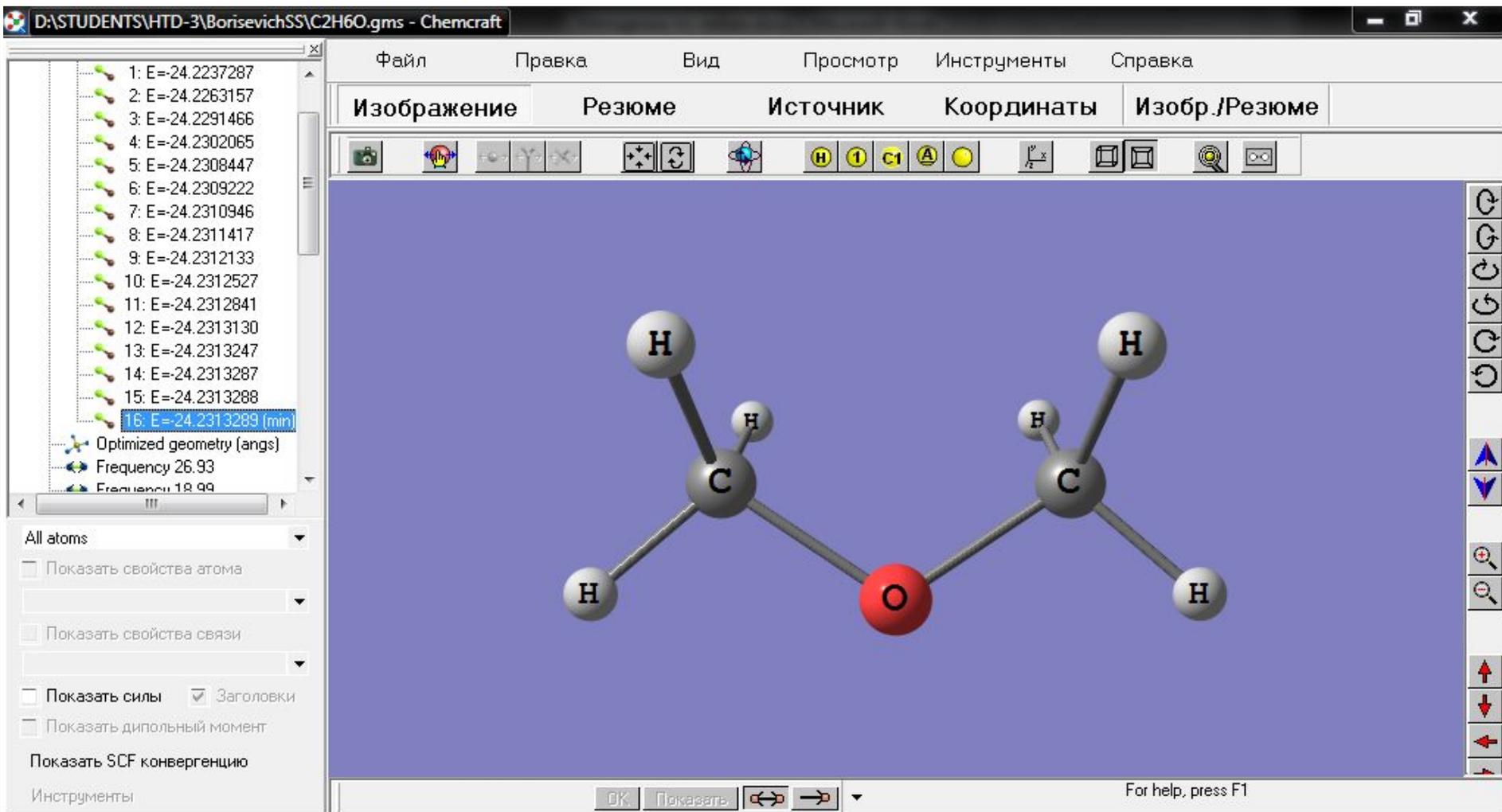
Искать Отменить

I/O STATISTICS:
DATA READ TOTAL = 34.518 MB, DATA WRITTEN TOTAL = 29.942 MB

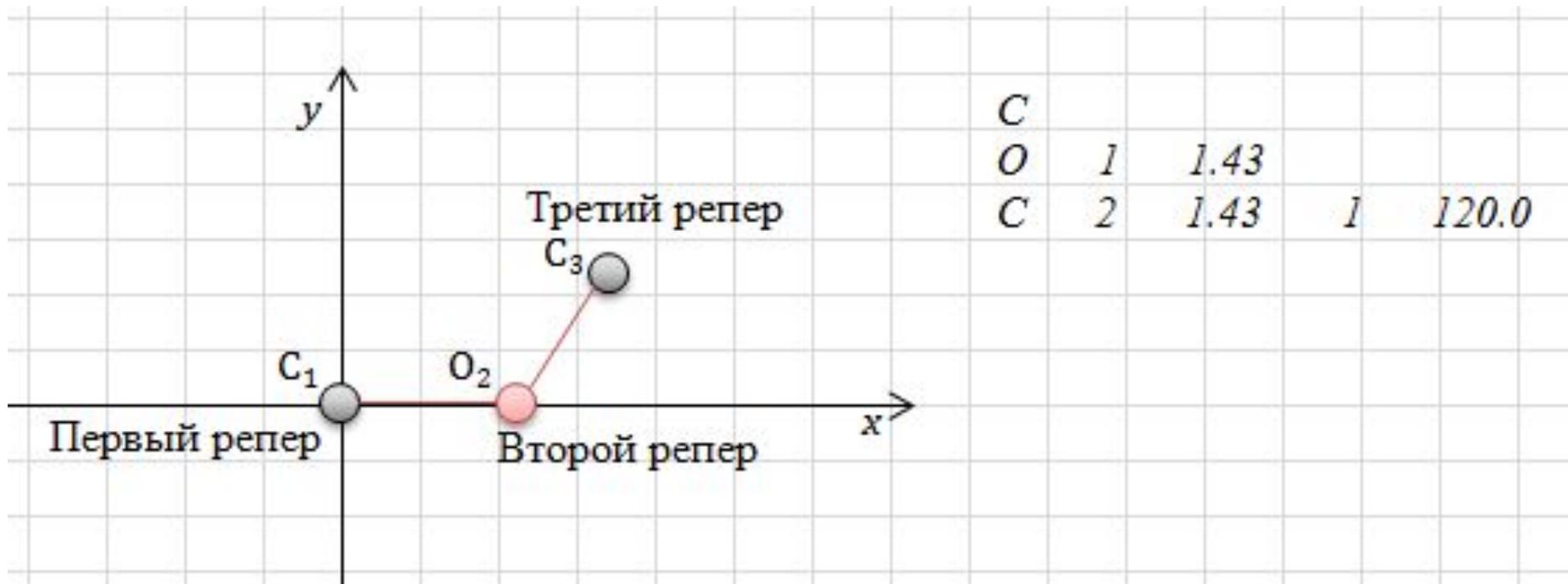
197280 WORDS OF DYNAMIC MEMORY USED
EXECUTION OF GAMES TERMINATED NORMALLY 13:29:33 LT 20-JAN-2012

1 Помощь 2 Развер 3 Выход 4 Код 5 6 Редакт 7 Поиск 8 DOS 9 10 Выход

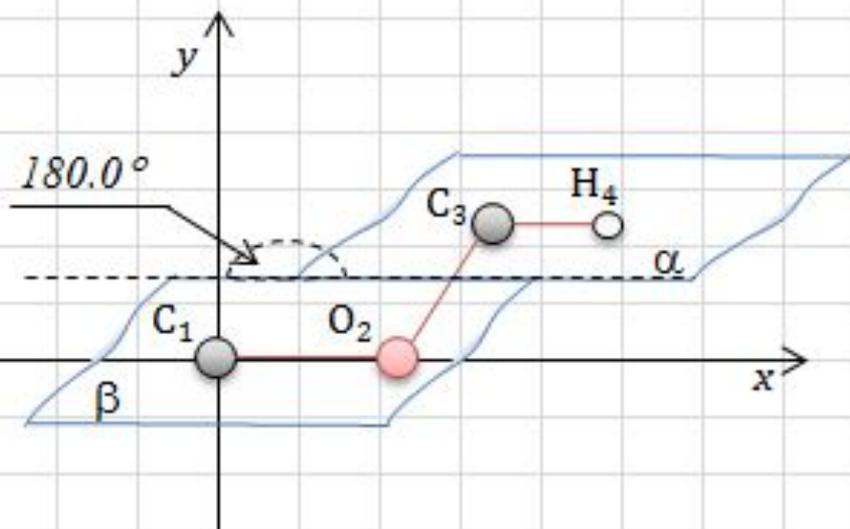
Визуализация расчета



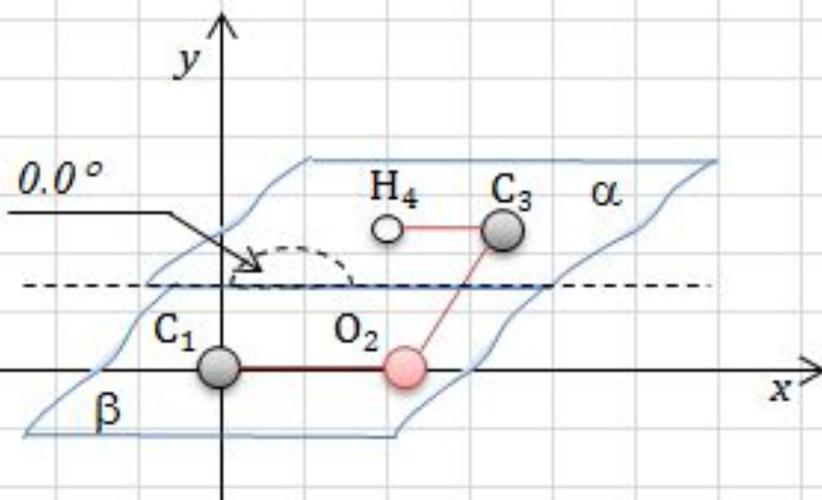
Строим z-матрицу



Строим z-матрицу: определяем двугранный угол H4C3O2C1

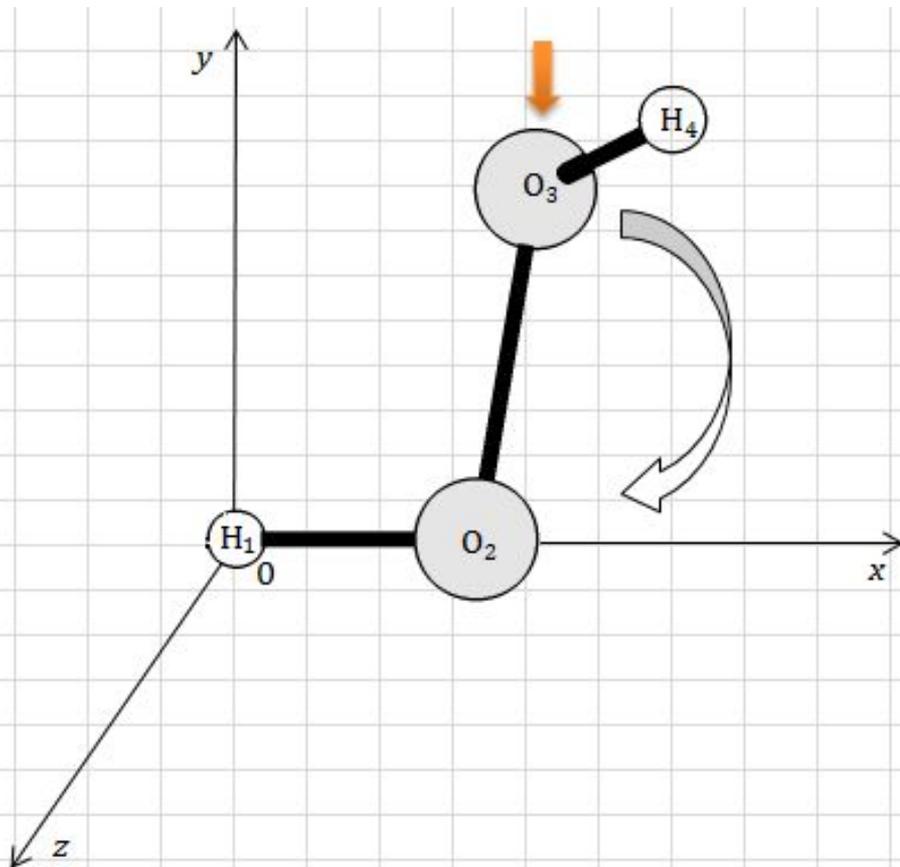


<i>C</i>						
<i>O</i>	1	1.43				
<i>C</i>	2	1.43	1	120.0		
<i>H</i>	3	1.10	2	110.0	1	180.0

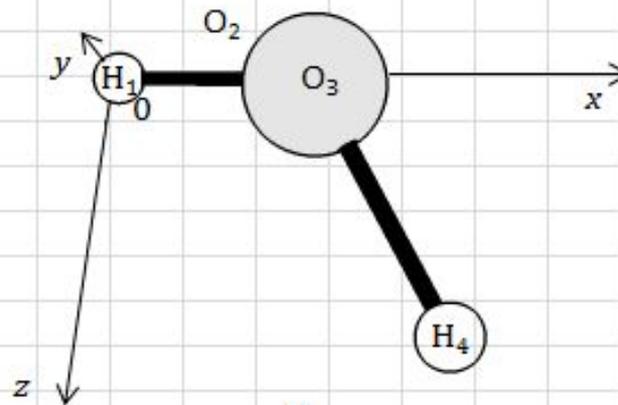


<i>C</i>						
<i>O</i>	1	1.43				
<i>C</i>	2	1.43	1	120.0		
<i>H</i>	3	1.10	2	110.0	1	0.0

Перекись водорода: фронтальный вид (а), вид по оси O2O3 (б) и z-матрица



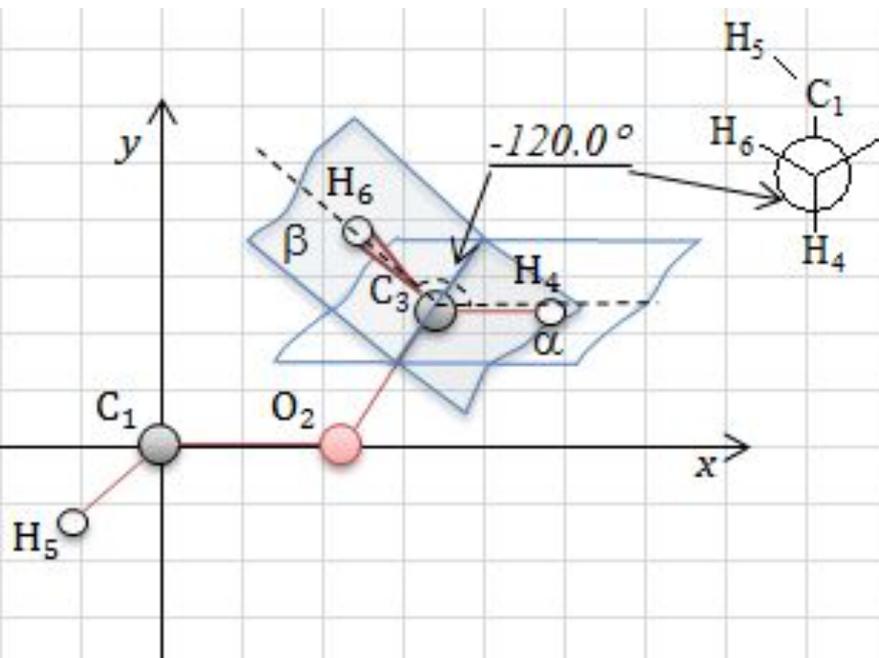
<i>H</i>						
<i>O</i>	1	0.97				
<i>O</i>	2	1.45	1	99.8		
<i>H</i>	3	0.97	2	99.8	1	118.8



а

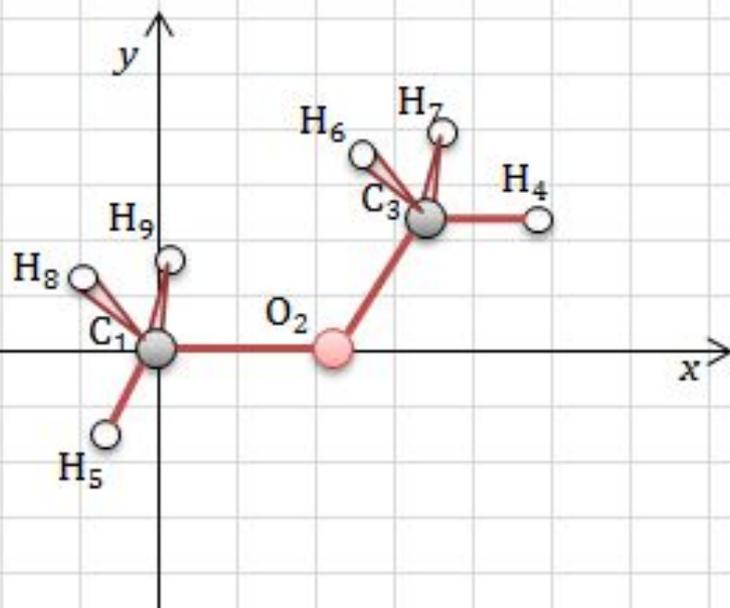
б

Строим z-матрицу: определяем торсионный угол H6C3O2H4



C	1	1.43				
O	2	1.43	1	120.0		
C	3	1.10	2	110.0	1	180.0
H	1	1.10	2	110.0	3	180.0
H	3	1.10	2	110.0	4	-120.0

Исходная структура диметилового эфира



<i>C</i>						
<i>O</i>	1	1.43				
<i>C</i>	2	1.43	1	120.0		
<i>H</i>	3	1.10	2	110.0	1	180.0
<i>H</i>	1	1.10	2	110.0	3	180.0
<i>H</i>	3	1.10	2	110.0	4	-120.0
<i>H</i>	3	1.10	2	110.0	4	120.0
<i>H</i>	1	1.10	2	110.0	5	120.0
<i>H</i>	1	1.10	2	110.0	5	-120.0

Расчет закончен без ошибок

```
просмотр C2H6O.gms - Far
D:\...S\HTD-3\BorisevichSS\C2H6O.gms      Win      256651      Кол 0      100%
ROT.      3.718      3.718      -23.837      12.472      12.472      92.421
UIB.      215.447      215.447      208.660      28.169      28.169      22.765
TOTAL     222.884      225.363      144.358      53.112      61.426      271.692

          E          H          G          CU          CP          S
          KCAL/MOL   KCAL/MOL   KCAL/MOL   CAL/MOL-K   CAL/MOL-K   CAL/MOL-K
ELEC.     0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
TRANS.    0.889      1.481      -9.671      2.981      4.968      37.406
ROT.      0.889      0.889      -5.697      2.981      2.981      22.089
UIB.      51.493      51.493      49.871      6.733      6.733      5.441
TOTAL     53.270      53.863      34.502      12.694      14.681      64.936
.....END OF NORMAL COORDINATE ANALYSIS.....

CPU      TIME:   STEP =      0.02 ,   TOTAL =      0.8 SECONDS <      0.0 MIN>
WALL CLOCK TIME:   STEP =      0.02 ,   TOTAL =      0.9 SECONDS <      0.0 MIN>
CPU UTILIZATION:   STEP =      89.42%,   TOTAL =      93.01%

          I/O STATISTICS:
DATA READ TOTAL =      23.159 MB,   DATA WRITTEN TOTAL =      19.554 MB

          197280 WORDS OF      DYNAMIC MEMORY USED
EXECUTION OF GAMESS TERMINATED NORMALLY 11:50:02 LT  21-JAN-2012

1      2      3      4      5 Печать 6      7 Назад 8 Перейт 9 Видео 10
```

Расчет прерван из-за ошибки: не найдена z-матрица

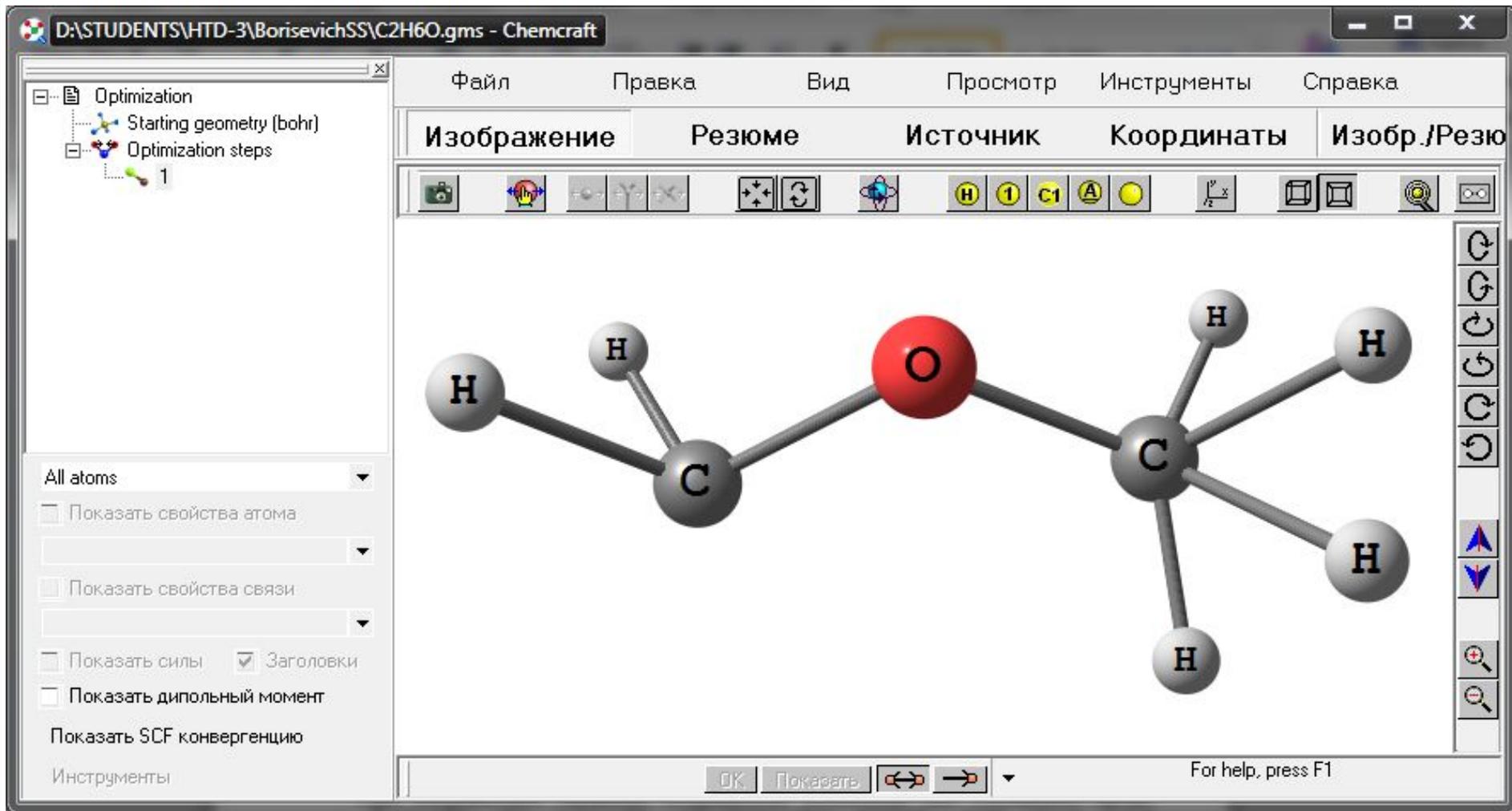
```
просмотр C2H6O.gms - Far
D:\...S\HTD-3\BorisevichSS\C2H6O.gms Win 5764 Кол 0 100%
THE POINT GROUP OF THE MOLECULE IS C1
THE ORDER OF THE PRINCIPAL AXIS IS 0
A VALUE WAS GIVEN FOR A VARIABLE C NOT FOUND IN THE Z-MATRIX.
A VALUE WAS GIVEN FOR A VARIABLE O NOT FOUND IN THE Z-MATRIX.
A VALUE WAS GIVEN FOR A VARIABLE C NOT FOUND IN THE Z-MATRIX.
A VALUE WAS GIVEN FOR A VARIABLE H NOT FOUND IN THE Z-MATRIX.
A VALUE WAS GIVEN FOR A VARIABLE H NOT FOUND IN THE Z-MATRIX.
A VALUE WAS GIVEN FOR A VARIABLE H NOT FOUND IN THE Z-MATRIX.
A VALUE WAS GIVEN FOR A VARIABLE H NOT FOUND IN THE Z-MATRIX.
A VALUE WAS GIVEN FOR A VARIABLE H NOT FOUND IN THE Z-MATRIX.
A VALUE WAS GIVEN FOR A VARIABLE H NOT FOUND IN THE Z-MATRIX.
RESUBMIT AFTER FIXING YOUR Z-MATRIX ERROR(S)

EXECUTION OF GAMESS TERMINATED ABNORMALLY AT 12:32:21 LT 21-JAN-2012
0 WORDS OF DYNAMIC MEMORY USED

CPU TIME: STEP = 0.05 , TOTAL = 0.1 SECONDS < 0.0 MIN>
WALL CLOCK TIME: STEP = 0.33 , TOTAL = 0.3 SECONDS < 0.0 MIN>
CPU UTILIZATION: STEP = 14.07% , TOTAL = 23.46%
STOP IN ABRT

1 2 3 4 5 Печать 6 7 Назад 8 Перейт 9 Видео 10
```

Результат расчета при неправильной «привязке» атома



СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Борисевич, С.С. Теоретические методы исследования в химии: Методические указания по выполнению лабораторных работ / С.С. Борисевич, Т.Р. Просочкина, В.М. Янборисов. – Уфа: УГНТУ. - 2015. – 55 с.
- 2 Schmidt, M.W. General atomic and molecular electronic structure system / M.W. Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S.J. Su, T.L. Windus, M. Dupuis, J.A. Montgomery. – USA: Department of chemistry Iowa State University, Ames, IA, 2005. – 97