

# **Jegyzőkönyv**

## **13. Molekulamodellezés PC-n**

Készítette:

Hága Péter és Bozsoki Péter,  
harmadéves fizikushallgatók

1999. október 20., szerda  
délelőtti csoport

## 1. A mérés célja

Jelen mérés célja az volt, hogy a mérést végzők alkothassanak egy képet a molekula-modellezés általános gyakorlatáról, menetéről. Ennek megfelelően a konkrét laboratóriumi gyakorlat "csak" számítógépes szimulációból állt, melynek keretében különböző számítási módszerekkel vizgáltunk különböző molekulákat, s az így kapott eredményeket értékeltük ki.

## 2. A mérés elve

A mérés elméleti hátterét ezen jegyzőkönyvben nem ismertetjük, mert bár az szerves része mind a mérésnek, mind a jegyzőkönyvnek, jelen esetben csak a "Modern Fizikai Laboratórium" c. egyetemi jegyzet idevágó (jelen esetben 13. fejezetének) ismételése lenne. Ezt pedig jelen körülmények között feleslegesnek tartjuk. Ahol szükséges, ott hivatkozunk a megfelelő részre.

## 3. A mérés kivitelezése

A szimulációkat egy IBM PC kompatibilis számítógépen végeztük a *HyperChem* program segítségével.

### ***3.1. Oxigén és nitrogén molekula alapállapotának vizsgálata UHF módszerrel***

A mérés során az adott molekulákat a CNDO és az AM1 félempirikus közelítéssel vizsgáltuk meg; mivel a spinre is kíváncsiak voltunk, értelemszerűen mindkét módszernek 3-as spinmultiplicitást beállítva. A mérés hozta a jegyzetben leírtak alapján várt eredményt: a CNDO módszer nem adott információt az elektronok spinjére vonatkozóan, így végül az AM1 módszerrel sikerült számot adni a két molekula eltérő mágneses viselkedéséről.

A számítás eredménye szerint az 1s és 2s pályák azonos módon vannak betöltve mindkét molekulában, de a legkülső pálya (2p) külső héjjain az O<sub>2</sub> molekulában egy-egy elektron tartozkodik azonos spinnel, míg az N<sub>2</sub> molekula esetében ez nem igaz. Ez egy O<sub>2</sub> molekula esetén eredő mágneses momentumot jelent, amely makroszkopikusan a molekuláris oxigén ferromágneses viselkedésében nyilvánul meg.

### 3.2. Benzol elektronkonfigurációjának elemzése

Összehasonlítva a CMNDO, MNDO illetve AM1 módszerrel számolt egy-elektron pályák sorrendjét, energia szerint, a következőket tapasztaltuk: a pályákat energia szerint sorbarendezve nem tapasztaltam különbséget a különböző módszerek között, de ha a konkrét energiaértéket is figyelembe vettem, akkor már komoly eltérések adódtak az egyes pályákhoz tartozó energiértékek között. Ez az 1-es és 2-es Táblázaton látszik (következő oldal). Az 1-es táblázatban a számolt energiaértékek vannak a pályák sorrendjében, a 2-esben ugyanezen értékek szerepelnek, de az energiák szerint sorbarendezve. A sorsszámozás *nem* újrásorszámozás, sőt, azért szerepel minden energiértékeket tartalmazó oszlop előtt, hogy egyszerűen látszék, az energia szerinti sorbarendezés mind a három módszer szerint ugyanazt az eredményt adta. (A pályákhoz tartozó energiértékek az AM1, CMNO, MNDO oszlopokban vannak, eV-ban kifejezve.)

Tekintettel a sok adatra, itt csak az alfa pályákhoz tartozó energiaértékeket tüntettük fel itt. A béta pályákra elvégezve az összehasonlítást az itt leírtakkal azonos eredmény adódott. Természetesen igény esetén ezeket is csatoljuk a jegyzőkönyvhöz. (A táblázat tördelési okokból a következő oldalon található.)

Ugyanezen módszerekkel számolt pályaaenergiaértékeket véve alapul kiszámoltuk a különbséget a legalacsonyabb energiájú nem betöltött (LUMO) és a legmagasabb energiájú betöltött (HOMO) pálya között. A következő energiaértékeket kaptuk:

**AM1: 8,210945 eV, CNDO: 8,889928 eV, MNDO: 1,630948 eV**

A benzolgyűrűben grafikusán módszerekkel (forgatva a képernyőn a benzolgyűrűt) megtaláltuk a Kekulé-féle pályát, melyről látható volt, hogy a benzolgyűrűvel egy síkban van.

1. Táblázat

	AM1	CNDO	MNDO
1	-39,3498	-50,2926	-42,8642
2	-31,9606	-37,5169	-33,9003
3	-31,444	-37,1432	-32,9569
4	-23,6707	-29,8898	-23,6178
5	-23,1343	-29,7873	-23,6127
6	-17,9971	-28,567	-17,7117
7	-16,5079	-23,6596	-17,062
8	-15,4659	-20,9246	-15,3479
9	-14,3317	-19,6719	-14,7671
10	-14,2183	-18,9687	-14,2588
11	-13,9556	-18,2814	-13,2575
12	-12,0141	-15,0644	-12,6108
13	-12,005	-14,7321	-12,4751
14	-11,2311	-14,0336	-10,7767
15	-10,3184	-13,7202	-9,91917
16	-7,22096	-4,77681	-6,18006
17	0,989983	4,113119	-0,37643
18	1,903749	7,074808	1,254519
19	3,790332	7,368225	3,544167
20	3,991286	7,729416	4,005326
21	4,018198	8,119083	4,048633
22	4,065345	8,814094	4,783453
23	4,196786	8,909833	4,988834
24	4,623999	9,333084	5,185091
25	4,992052	12,22891	5,323546
26	5,181066	12,80952	5,432748
27	5,414228	12,96043	6,00281
28	5,464381	13,32661	6,059909
29	5,561852	14,35685	6,147579
30	6,014126	15,59356	6,422816

2. Táblázat

	AM1		CNDO		MNDO
1	-39,3498	1	-50,2926	1	-42,8642
2	-31,9606	2	-37,5169	2	-33,9003
3	-31,444	3	-37,1432	3	-32,9569
4	-23,6707	4	-29,8898	4	-23,6178
5	-23,1343	5	-29,7873	5	-23,6127
6	-17,9971	6	-28,567	6	-17,7117
7	-16,5079	7	-23,6596	7	-17,062
8	-15,4659	8	-20,9246	8	-15,3479
9	-14,3317	9	-19,6719	9	-14,7671
10	-14,2183	10	-18,9687	10	-14,2588
11	-13,9556	11	-18,2814	11	-13,2575
12	-12,0141	12	-15,0644	12	-12,6108
13	-12,005	13	-14,7321	13	-12,4751
14	-11,2311	14	-14,0336	14	-10,7767
15	-10,3184	15	-13,7202	15	-9,91917
16	-7,22096	16	-4,77681	16	-6,18006
17	0,989983	17	4,113119	17	-0,37643
18	1,903749	18	7,074808	18	1,254519
19	3,790332	19	7,368225	19	3,544167
20	3,991286	20	7,729416	20	4,005326
21	4,018198	21	8,119083	21	4,048633
22	4,065345	22	8,814094	22	4,783453
23	4,196786	23	8,909833	23	4,988834
24	4,623999	24	9,333084	24	5,185091
25	4,992052	25	12,22891	25	5,323546
26	5,181066	26	12,80952	26	5,432748
27	5,414228	27	12,96043	27	6,00281
28	5,464381	28	13,32661	28	6,059909
29	5,561852	29	14,35685	29	6,147579
30	6,014126	30	15,59356	30	6,422816

### 3.3. A benzol rezgési analízise

UHF-AM1 módszerrel kiszámolva a benzolmolekula rezgési a normálmódusait, az eredményt táblázatba foglalva, a következőt kaptuk:

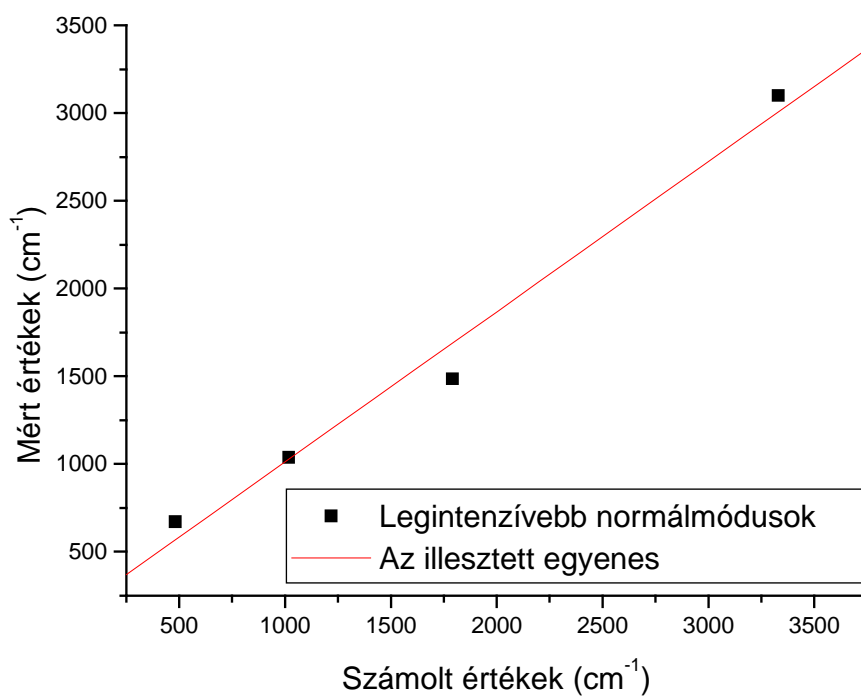
3. Táblázat

	Mért		Elméleti
	Frekvencia (1/cm)	Intenzitás (km/mol)	Frekvencia (1/cm)
1	-307.83	0.00027	
2	-278.36	0.00097	
3	276.26	0.14658	168
4	<b>481.16</b>	<b>77.35713</b>	<b>671</b>
5	540.77	0.01136	
6	545.86	0.00001	
7	627.01	0.00006	
8	642.28	0.00095	
9	699.35	0.00020	
10	836.25	0.25163	793
11	844.84	0.00048	
12	919.68	0.00183	
13	984.36	0.22410	962
14	<b>1018.94</b>	<b>1.05973</b>	<b>1037</b>
15	1091.04	0.79192	1143
16	1144.77	0.01007	
17	1176.53	0.00052	
18	1182.83	0.00391	
19	1250.97	0.00008	
20	1277.18	0.00192	
21	1339.73	0.66494	1240
22	1502.51	0.62338	1377
23	<b>1790.98</b>	<b>9.20911</b>	<b>1485</b>
24	1826.93	0.00022	
25	3321.03	0.00116	
26	3321.93	0.41541	
27	3324.57	0.00059	
28	3328.35	45.53910	3045
29	<b>3331.54</b>	<b>25.38327</b>	<b>3099</b>
30	3340.82	0.00083	

A táblázatban feltüntettük azokat az elméleti frekvenciákat, melyeket be tudunk azonosítani (a félkövérrel szedett értékek a maximális intenzitású normálmódusokhoz tartoznak). Mivel nem találtunk egyértelmű kapcsolatot az elméleti és az általunk számolt értékek között, ezért megpróbáltuk mind csak a legintenzívebb elméleti-számolt normálmóduspárokat, mind pedig az összeset figyelembe venni a korrekciós függvény megállapításánál. Az eredmény az 1-es és 2-es ábrán látható. Mindkét ábrán az elméleti értékeket ábrázoltuk a számolt értékek függvényében, hisz a számolt  $\rightarrow$  elméleti kapcsolat érdekel minket. Figyelembevéve a pontok elhelyezkedését, megkíséreltünk mindkét esetben egyenest illeszteni. Az ábrákon látható az eredmény (illetve alattuk az illesztett egyenesek egyenlete, hibával). A nagyon nagy illesztési hiba miatt úgy gondoljuk, hogy nincs érdemi összefüggés az elméleti illetve számolt normálmódusok között vagy mi nem találtuk meg azt vagy pedig rossz adatokkal dolgoztunk. Mivel a mérés során a normálmódusszámítást kétszer is elvégeztük, s mind a kétszer azonos

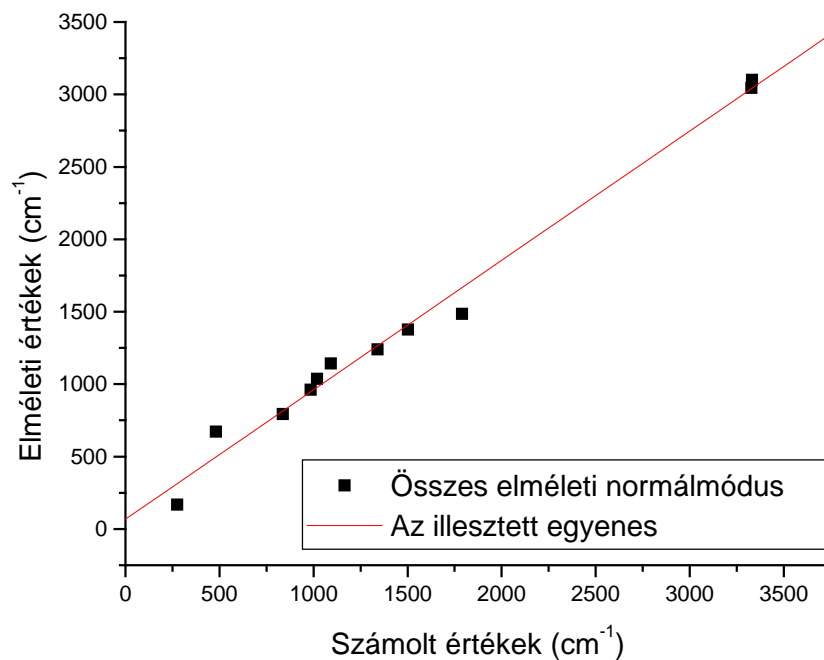
eredményt kaptunk, ezért valószínűsítjük, hogy kevés a rendelkezésünkre álló adat ahhoz, hogy meg tudjuk határozni a korrekciós függvényt.

**1. Ábra**



Az illesztett egyenes egyenlete:  $y = Ax + B$ , ahol  $A = 156 \pm 160$ ,  $B = 0,85 \pm 0,08$

**2. Ábra**



Az illesztett egyenes egyenlete:  $y = Ax + B$ , ahol  $A = 67 \pm 58$ ,  $B = 0,89 \pm 0,03$

A polipeptid molekula tanulmányozására sajnos nem maradt időnk.