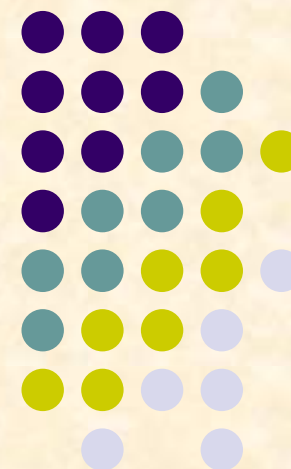


Z-матриця

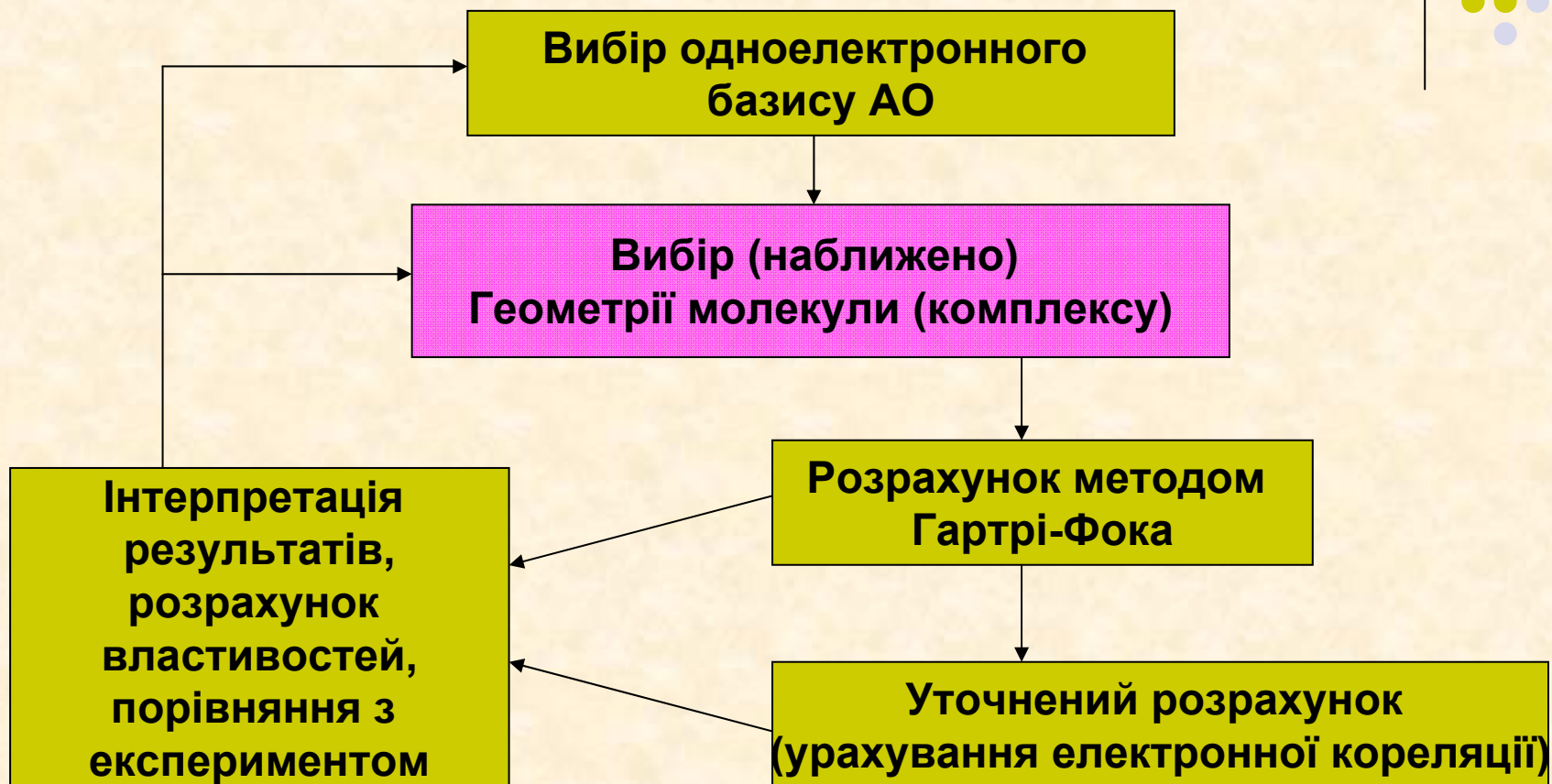
В.В.Іванов

GaussView, *Facio*, *Avogadro*,
Molekel, *ViewMol3D*, *MacMolPlt*, *Jmol*
Babel





Типова схема квантовохімічного (*ab initio*) розрахунку



Число ступенів свободи молекули (геометрія)



Для N-атомної молекули число можливих зсувів атомів = $3N$

Трансляція молекули як цілого - 3

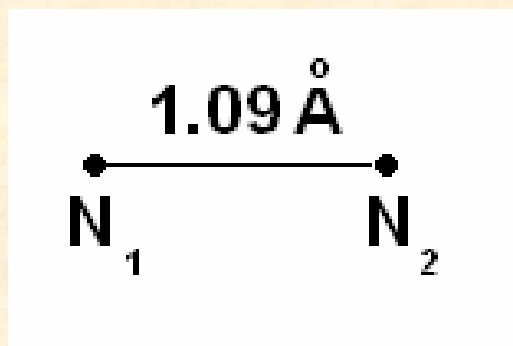
Обертання молекули як цілого - 3

$3N - 6$ Число ступенів свободи нелінійної N – атомної молекули

$3N - 5$ Число ступенів свободи лінійної N – атомної молекули

$3N - 7$ Число ступенів свободи нелінійного N – атомного
перехідного комплексу (сідловина)

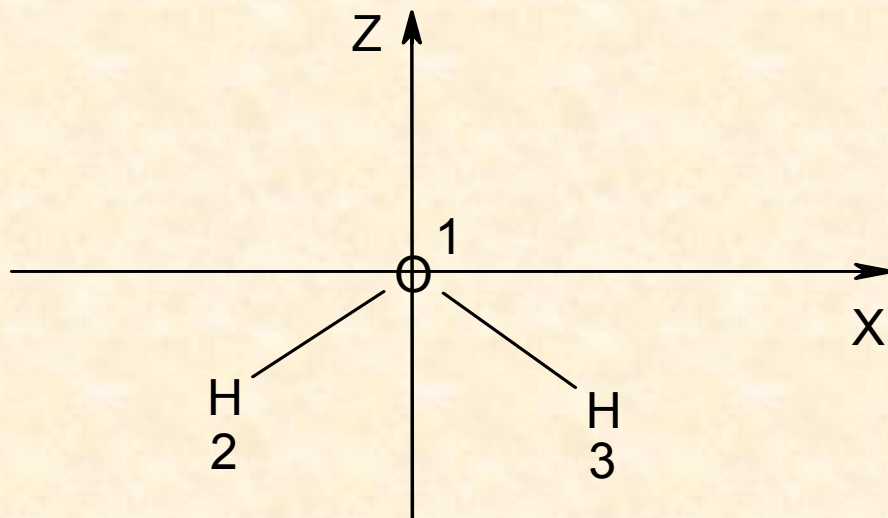
Z-матриця Молекули N₂



$$3 \cdot 2 - 5 = 1$$

N		
N	1	1.09

Z-матриця. Молекула води



$$r = 0.95 \text{ \AA}$$
$$\angle \text{HOH} = 104^\circ$$

$$3 \cdot 3 - 6 = 3$$

O				
H	1	0.95		
H	1	0.95	2	104

Z-матриця молекула води (з урахуванням симетрії)



O

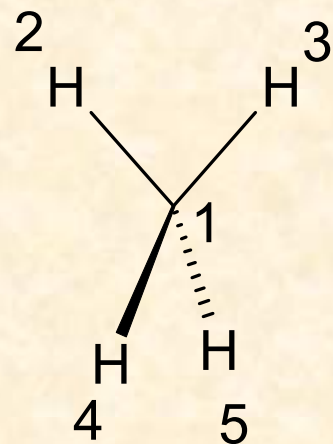
H 1 R

H 1 R 2 A

$R = 0.95$

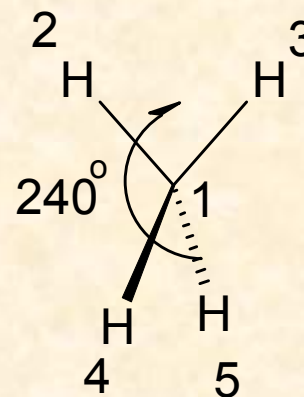
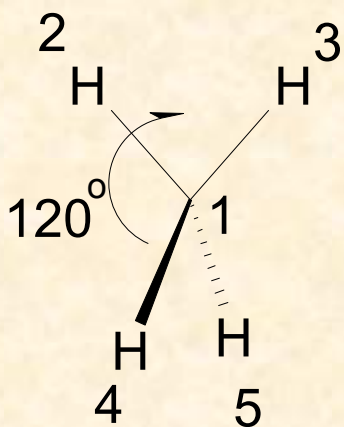
$A = 104$

Молекула метана CH_4

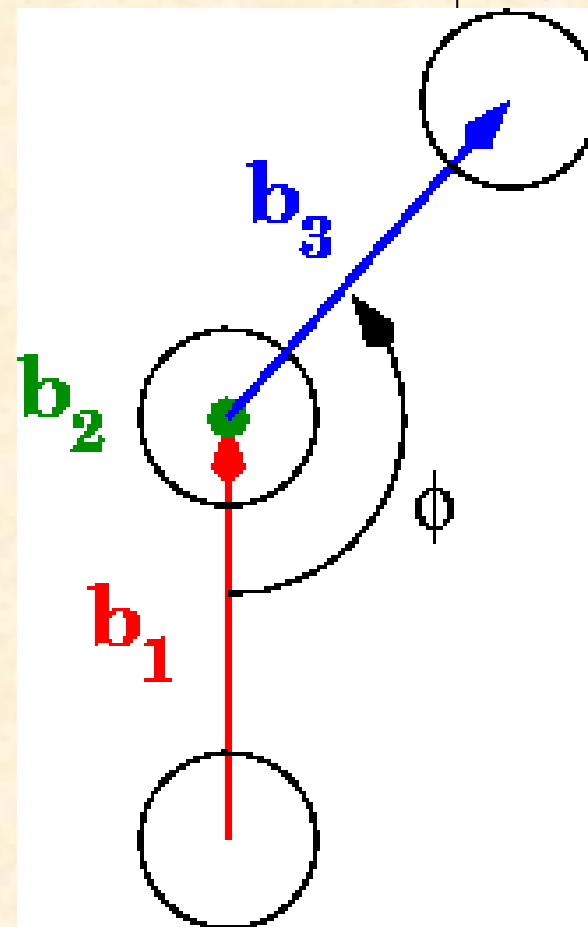
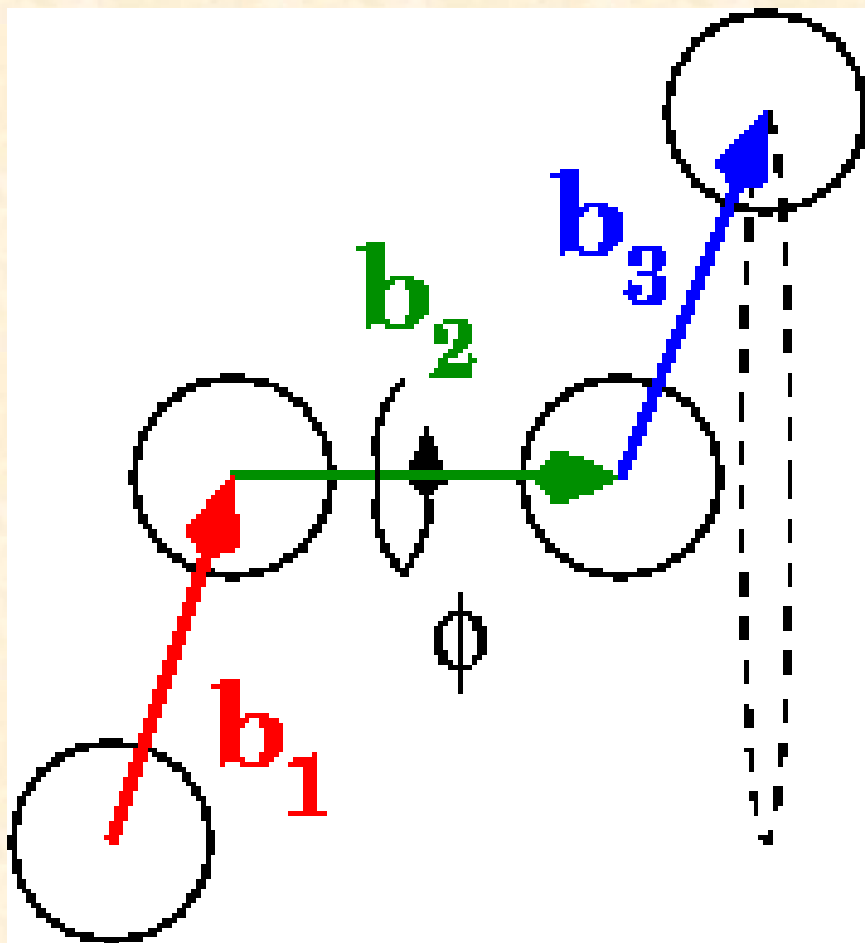


$$3 \cdot 5 - 6 = 9$$

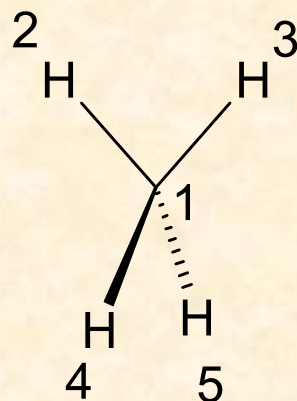
$$r(\text{CH}) \approx 1.089 \text{ \AA}$$
$$\angle \text{HCH} = 109.4^\circ$$



Диедральний кут



Z-матрица молекулы метана



$$3 \cdot 5 - 6 = 9$$

C						
H	1	rCH				
H	1	rCH	2	A		
H	1	rCH	2	A	3	120
H	1	rCH	2	A	3	240

Довжина зв'язку
(5-1)

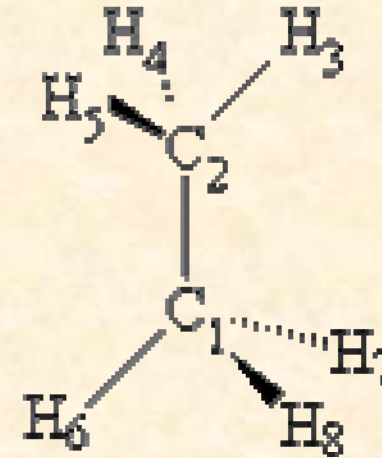
кут
(5-1-2)

Диедральний
кут (5-1-2-3)

$$A = 109.4$$

$$rCH = 1.089$$

Z-матриця етану



C						
C	1	R1				
H	2	R2	1	A		
H	2	R2	1	A	3	120
H	2	R2	1	A	3	-120
H	1	R2	2	A	3	180
H	1	R2	2	A	6	120
H	1	R2	2	A	6	-120

$$3 \cdot 8 - 6 = 18$$

$$R1 = 1.54$$

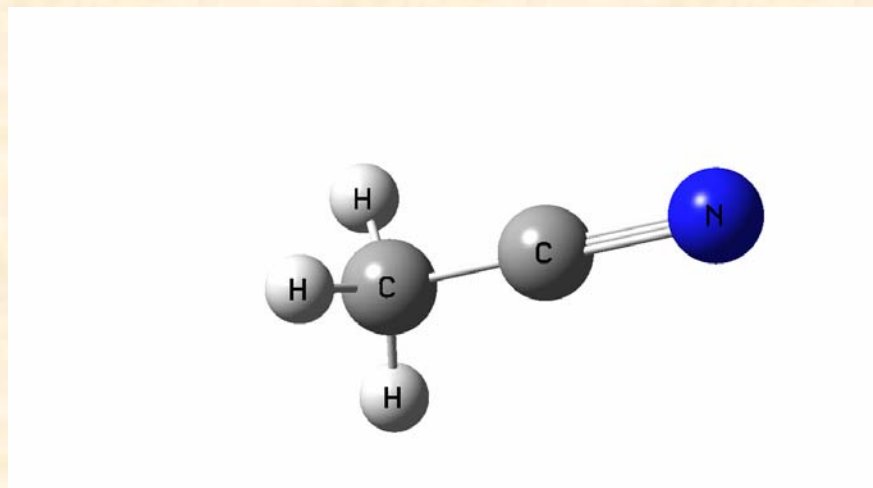
$$R2 = 1.09$$

$$A = 110$$

За допомогою яких програм можна сформуванати Z-матрицю ?



Avogadro, HyperChem, GaussView, Facio, ChemCraft,і др.
Програма **Vabel** – перекодировка між різними форматами



To be Continued
“Оптимізація геометрії”