

www.mientayvn.com

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kỹ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trào i tr c tuy n t i:

www.mientayvn.com/chat_box_hoa.html

Molecular vibrations

Learning action

- ✓ Nguyên nhân gây nên sự dao động của phân tử?
- ✓ Nguyên nhân của việc nghiên cứu phổ dao động trong hóa học.



Mục đích ý nghĩa
phổ dao động

Vibrations Spetrum

➤ Dùng Vibrations để tính toán chuyển động dao động của hạt nhân.

➤ Vibrations Spetrum để biểu diễn dạng biểu đồ cấu trúc phổ của các dao động.

- Ta có thể tính dao động bằng các phương pháp ab-initio, DFT hay các phương pháp bán kinh nghiệm, ngoại trừ phương pháp Huckel mở rộng.

Caùc thuaät ngöõ

caàn bieát

UHF

Phương pháp Hartree-Fock không giải thích. Biểu diễn hàm sóng cùng cặp các orbital không gian tách rời vì các electron có spin hướng lên và spin hướng xuống.

UHF

Mỗi orbital có thể không chứa
hơn một electron. Ta có
thể dùng các tính toán UHF
tính toán các phân tử phân
tách của các hệ thống.

RHF

Thuyết Hartree-Fock giả định.
Biểu diễn hàm sóng cùng với các
electron có spin cặp đôi (hướng
lên và hướng xuống) phân bố
trên các orbital phân tử cùng
không gian.

RHF

M i orbital không gian có
th c ng ch a các
electron n (spin h ng
lên hay spin h ng
xu ng).

SCF

Trường tự nhất quán (Self-Consistent Field). Đây là một phương pháp lặp, dùng trong tất cả các phương pháp tính toán cấu trúc lượng tử NDO, semi-empirical.

Nó giải thích năng lượng của electron trong các lý giải phương trình Schrodinger.

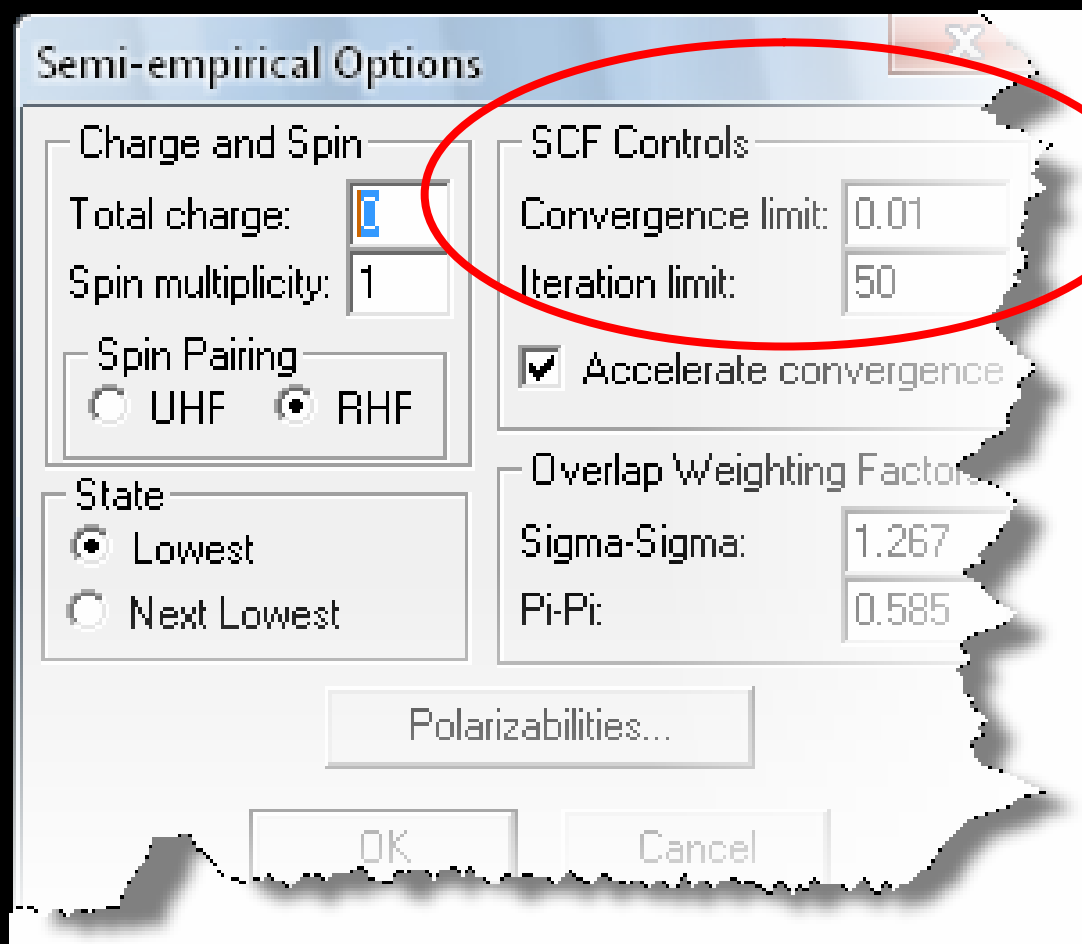
SCF

Phương pháp SCF hay Hartree-Fock
nghiên hoá bài toán này bằng việc
thay thế ảnh hưởng
của các electron là
các proton và neutron tác động
trên trung bình của các electron
khác trong phân tử.

SCF

Trong HyperChem, tất cả các phương pháp tính toán bán kinh nghiệm, ngoại trừ phương pháp Huckel mở rộng, đều là các phương pháp SCF.

Convergence



Convergence

Tiêu chuẩn kết thúc
thức mặt tính toán
hoá học.

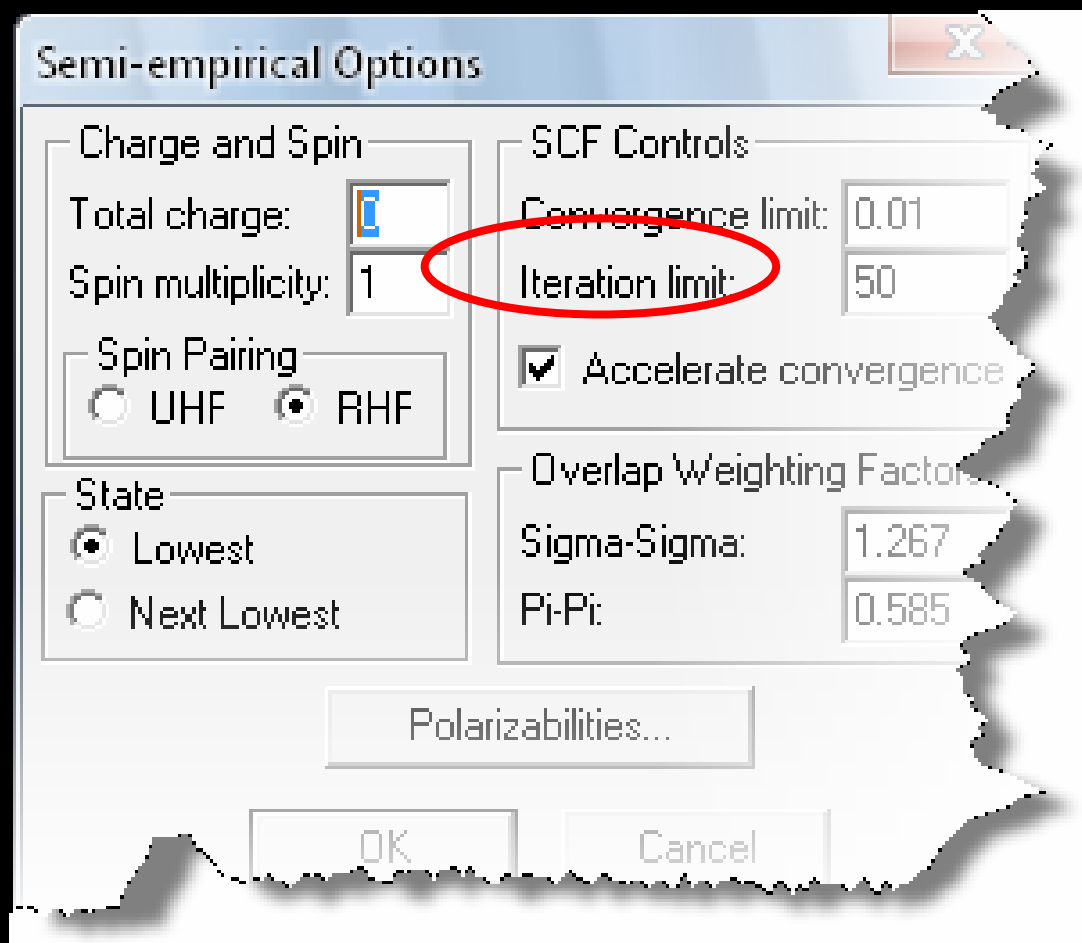
Convergence

Tính toán các bước SCF
bán kính nghiệm mới (kết thúc)
khi sai khác nhau về năng lượng
sau hai lần lặp liên tiếp bé hơn
giới hạn mới (nguyên nhân
0.01kcal/mol) hoặc tính toán kết
thúc khi sai lệch (nguyên nhân là 50).

Convergence

V i tính toán t i u hình h c phân
t , gi i h n
h i t là s vòng tính toán (s
ng m nh b ng 15 l n s nguyên
t) ho c
gradient RMS c a h phân t
(ng m nh 0.1 kcal/Angstrom
mol).

Iteration



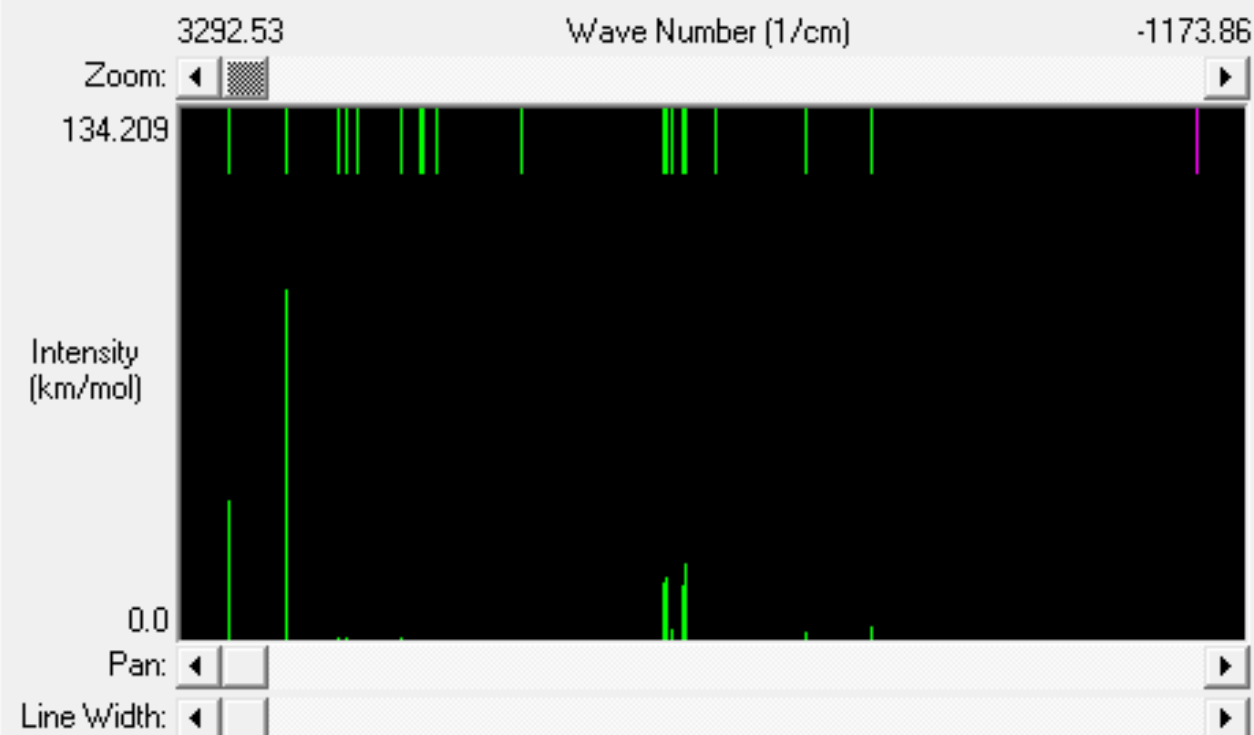
Iteration

Trong một phương pháp
học máy SCF, mỗi tính
toán các orbital phân bố
và cùng sự phân bố
kiểu của các orbital.

Interaction

Mixing (hay interaction: self-consistent) calculation for the mixing process. When different groups are mixed together, the convergence of SCF calculation (convergence).

Vibrational Spectrum



Normal Mode: 1
Degeneracy: 1
Frequency: -970.84
Intensity: 0.454
Symmetry: 1 A'

Animate vibrations

Animation Cycle

Frames: 11
Amplitude: 0.5 Å

Apply

Copy

OK

Cancel



symmetry

- n. exact correspondence between parts on either side of a central line; proportion, balance between the parts of something

s i x ng; tính i x ng

- degeneracy

s suy bi n, s thoái
hoá

frequency

- n. quality of occurring frequently or regularly; rate at which a function reoccurs; number of occurrences within a given period of time; number of wave cycles within a given period of time (i.e. the frequency of a radio wave)

T n s

intensity

- n. quality of being intense; strength, energy; strength of feeling; extreme degree; depth; clarity, amount of light emitted from a graphics device or from a pixel (Computers)

m nh, c ng

thực hiện
phân tích đạo
đúng ta làm
như sau:

✓ 1. Chọn Geometry Optimization trong Compute menu, tiến hành tối ưu theo Polak-Ribiere với RMS gradient: 0.1. hitting SCF thích hợp nên sử dụng là 0.01.



Compute

Annotations

Script

Mode

Single Point

Single Point CI...

Geometry Optimization...

Vibration, Rotation Analysis

Entropy and Free Energy...

Semi-empirical Method



Semi-empirical Options



Charge and Spin

Total charge:

Spin multiplicity:

Spin Pairing



UHF



RHF

State



Lowest



Next Lowest

SCF Controls

Convergence limit:

Iteration limit:



Accelerate convergence

Overlap Weighting Factors

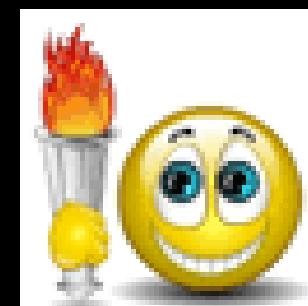
Sigma-Sigma:

Pi-Pi:

Polarizabilities...

OK

Cancel



- Chọn **Single Point** trong Compute menu tính năng làm việc toàn phần.

Compute

Annotations

Script

Mode

Single Point

Single Point CL...

- Chọn **Vibrations** trong Compute menu để tiến hành phân tích dao động trên hình học đã cấu hình.

Compute

Annotations

Script

Mode

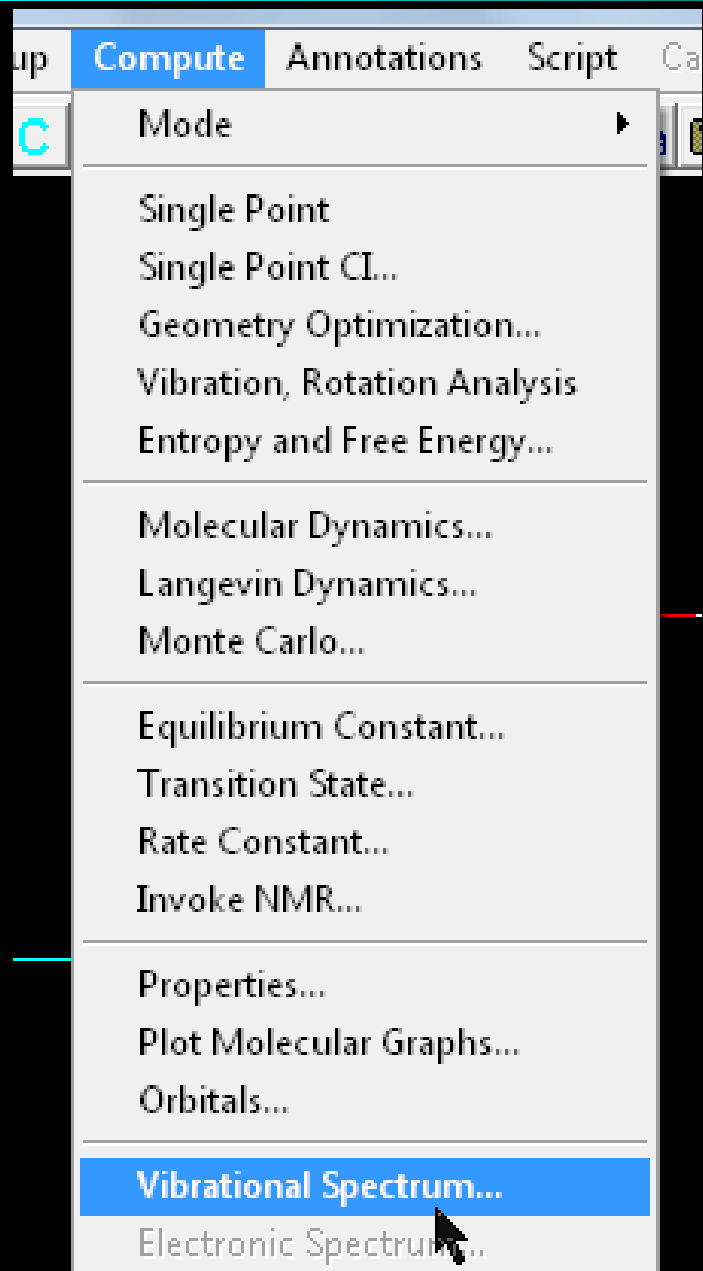
Single Point

Single Point CL...

Geometry Optimization...

Vibration, Rotation Analysis

- Nh p tr ái chu t ch n
Vibrational Spectrum
trong Compute menu
bi u
di n ph dao ng.



Vibrational Spectrum



3292.53

Wave Number (1/cm)

-1173.86

Zoom: ◀ ▶

134209

Intensity
(km/mol)

0.0

Pan: ◀ ▶

Line Width: ◀ ▶

Normal Mode:

1

Degeneracy:

1

Frequency:

-970.84

Intensity:

0.454

Symmetry:

1 A'

Animate vibrations

Animation Cycle

Frames:

11

Amplitude:

0.5

Å

Apply


Copy

OK

Cancel

SEE ME





Bài Tập

áp dụng

Mi n thi n u t các yêu c u sau:

- Thi t k phân t 2D, 3D.
- Ch y ph dao ng.
- Phân tích ph dao ng.

