VITMO

А.С. Новиков, А.А. Ботнарь, Д.В. Ермолин, Е.В. Скорб

Применение программных пакетов Avogadro, ORCA, Putty, WinSCP и CREST для выполнения квантово-химических расчётов



Санкт-Петербург 2024 МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

А.С. Новиков, А.А. Ботнарь, Д.В. Ермолин, Е.В. Скорб

Применение программных пакетов Avogadro, ORCA, Putty, WinSCP и CREST для выполнения квантово-химических расчётов

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

РЕКОМЕНДОВАНО К ИСПОЛЬЗОВАНИЮ В УНИВЕРСИТЕТЕ ИТМО по направлению подготовки (специальности) 18.03.01 «Химическая технология» в качестве учебного пособия для реализации основных профессиональных образовательных программ высшего образования бакалавриата

I/ITMO

Санкт-Петербург

2024

А.С. Новиков, А.А. Ботнарь, Д.В. Ермолин, Е.В. Скорб, Применение программных пакетов Avogadro, ORCA, Putty, WinSCP и CREST для выполнения квантово-химических расчётов. – СПб: Университет ИТМО, 2024. – 36 с.

Рецензент: Клюкин Илья Николаевич, к.х.н., старший научный сотрудник Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН

В данном учебном пособии кратко освещены основные аспекты подготовки входных файлов для проведения типовых квантово-химических расчетов в программных пакетах ORCA и CREST, а также даны рекомендации по подключению и организации удаленной работы на вычислительных кластерах с компьютеров под управлением операционных систем Windows и MacOS. Также кратко перечислены основные параметры, на которые следует обращать внимание при анализе результатов проведенных квантово-химических расчетов.

Пособие предназначено для студентов бакалавриата направления «Инфохимия» университета ИТМО и может быть использовано для обучения в рамках дисциплин (модулей) "Компьютерные методы и моделирование", "Квантовая химия" и "Инфохимия".

ИТМО (Санкт-Петербург) — национальный исследовательский университет, корпорация. победителей научно-образовательная Альма-матер международных соревнований по программированию. Приоритетные направления: ІТ и искусственный интеллект, фотоника, робототехника, коммуникации, трансляционная медицина, Life Sciences, квантовые Art&Science, Science Communication.

Лидер федеральной программы «Приоритет-2030», в рамках которой реализовывается программа «Университет открытого кода». С 2022 ИТМО работает в рамках новой модели развития — научно-образовательной корпорации. В ее основе академическая свобода, поддержка начинаний студентов и сотрудников, распределенная система управления, приверженность открытому коду, бизнес-подходы к организации работы. Образование в университете основано на выборе индивидуальной траектории для каждого студента.

ИТМО пять лет подряд — в сотне лучших в области Automation & Control (кибернетика) Шанхайского рейтинга. По версии SuperJob занимает первое место в Петербурге и второе в России по уровню зарплат выпускников в сфере IT. Университет в топе международных рейтингов среди российских вузов. Входит в топ-5 российских университетов по качеству приема на бюджетные места. Рекордсмен по поступлению олимпиадников в Петербурге. С 2019 года ИТМО самостоятельно присуждает ученые степени кандидата и доктора наук.

Содержание

РАБОТА В AVOGADRO 5 Построение молекул 5 Генерация input-файла для расчетов в программе ORCA 14 Запуск расчета в ORCA 16 Визуализация расчетов. 17 АНАЛИЗ OUT-/LOG-ФАЙЛА 18 ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ 22 ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ 23 ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ 24 ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ 34	ВВЕДЕНИЕ	4
Построение молекул	РАБОТА В AVOGADRO	5
Генерация input-файла для расчетов в программе ORCA 14 Запуск расчета в ORCA 16 Визуализация расчетов. 17 АНАЛИЗ OUT-/LOG-ФАЙЛА 18 ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ 22 ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ 22 ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ 29 РАБОТА В CREST. 30 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ 34	Построение молекул	5
Запуск расчета в ORCA	Генерация input-файла для расчетов в программе ORCA	14
Визуализация расчетов	Запуск расчета в ORCA	16
АНАЛИЗ ОUT-/LOG-ФАЙЛА	Визуализация расчетов	17
ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ КЛАСТЕРУ (WINDOWS)	АНАЛИЗ OUT-/LOG-ФАЙЛА	18
ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ КЛАСТЕРУ (MACOS)	ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ КЛАСТЕРУ (WINDOWS)	22
РАБОТА В CREST	ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ КЛАСТЕРУ (MACOS)	29
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	РАБОТА В CREST	30
	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	34

ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день ORCA является одним из наиболее распространённых и универсальных программных пакетов для выполнения компьютерного моделирования сложных химических систем методами квантовой химии. Его основная область применения — это оптимизация геометрии органических молекул и их супрамолекулярных ассоциатов, комплексов переходных металлов, а также расчет их свойств.

В данном методическом пособии для студентов Университета ИТМО представлен минимальный перечень наиболее актуальных и необходимых (по мнению авторов) ключевых слов и спецификаций для выполнения типичной задачи по компьютерному моделированию химической системы в программных пакетах ORCA и CREST. Дан пример типичного входного файла, который может быть легко адаптирован студентами и аспирантами под их конкретные научные задачи. Также методическое пособие содержит информацию справочного характера для комфортной работы в пакетах Avogadro (подготовка и визуализация модельных структур), Putty и WinSCP (выполнение удалённых вычислений).

В процессе изучения данного методического пособия и применения пакетов программ ORCA и CREST для выполнения квантово-химических расчетов у студентов будут сформированы базовые знания в области проведения подготовки входных файлов для типовых научных исследований в соответствующих программных пакетах, а также основных приёмов работ по моделированию строения и свойств многоэлектронных атомов и молекулярных химических систем, умения выполнять поиск оптимальной геометрии модельной системы (включая нахождение конформации молекулы) определять оптимальной eë основные И дескрипторы, навыки по подключению и организации удаленной работы на вычислительных кластерах с компьютеров под управлением операционных систем Windows и MacOS.

Пособие предназначено для студентов бакалавриата направления «Инфохимия» университета ИТМО и может быть использовано для обучения в рамках дисциплин (модулей) "Компьютерные методы и моделирование", "Квантовая химия" и "Инфохимия".

РАБОТА В AVOGADRO



Avogadro – это бесплатный продвинутый редактор молекул и визуализатор, предназначенный для использования в вычислительной химии, молекулярном моделировании, биоинформатике, материаловедении и смежных областях.

Скачать: <u>https://avogadro.cc/</u>

Построение молекул

1) Открыть окно по редактированию молекул



2) Выбрать элемент из списка, который необходим для построения молекулы



- File Edit View Build Select Extensions Crystallography Settings Help 🕐 New 🔚 Open 🔚 Save 🥐 Close 🔀 Quit 📝 🔶 腔 😓 📐 🤰 🍹 🚟 🚿 Tool Settings... Display Settings... ð× Draw Settings View 1 Element: Other... -Periodic Table Bond Order: Boron (5) Carbon (6) н Не Adjust Hy Adjust Hy Oxygen (8) 1**H** Li Be 1.008 F Ne Fluorine (9) Hydrogen Na AI Si CI Ar Phosphorus (15) Sulfur (16) Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Kr K Sc Ti V As Chlorine (17) Sb Xe Y Мо In Bromine (35) Zr Nb Тс Rh Pd Ag Cd Hf На Fr Ra La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm
- 3) Выбрать элемент, используя периодическую таблицу

4) Кликнуть левой кнопкой мыши в поле, таким образом появляется заданный атом (в данном случае – азот). Наличие галочки «Adjust Hydrogens» позволяет автоматически добавлять атомы водорода согласно валентности атома (также возможно добавление атомов водорода согласно валентности атома с помощью Build-Add Hydrogens). Нажатие правой кнопкой мыши по атому приводит к его удалению.



5) Щелчок левой кнопкой мыши по начальному атому (азоту) и перемещение курсора мыши вправо приводит к образованию связи с другим атомом азота.



6) Для получения правильных длин связи и углов в молекуле возможна оптимизация геометрии модельной структуры путем выбора наиболее оптимального метода UFF (Universal Force Field, см. математические основы в [1–4]). Таком образом, получили оптимизированную геометрию гидразина N₂H₄.

File Edit View Bu	ild Select	Extensions Crystallograp	ohy Settings H	Help
🤥 New 🔚 Open 🔚	Save 🥊 🤒 Clo	Animation		Tool Settings Display Settings
Draw Settings		Optimize Geometry	Ctrl+Alt+O	
Element: Nitrogen (7) -	Molecular Mechanics	+	Setup Force Field
Bond Order: Single 🔻		GAMESS	•	Calculate Energy
Adjust Hydrogens		Abinit		Conformer Search
		Dalton		Constraints
		Gaussian		Ignore Selection
		MOLPRO		Fix Selected Atoms
🕱 Setup Force Field		? ×		
Force Field				
Force Field				
	GAFF			
Geometry Optimization	MMFF94			
Algorithm	UFF	Descent T		
Convergence	10e-7	¢		
		ОК		
-				
File Edit View Build	d Select Ext	tensions Crystallography	Settings Help	
🛛 🕒 New 🔚 Open 🔚 S	ave 🤒 Ck	Animation	t <u>T</u> oo	I Settings Display Settings
Draw Settings		Optimize Geometry Cti	I+Alt+O	
Element: Nitrogen (7)	-			
Bond Order: Single 🔻		GAMESS Abinit	•	
Adjust Hydrogens		Dalton		
		GAMESS-UK		
		Gaussian MOLPRO		
		MOPAC		
		NWChem		
File Edit View Buil	d Select Ex	rtensions Crystallography	Settings Help	
🕒 New 📥 Open 🔚 S	ave 🤔 Close	🛛 Quit 🛛 🖉 🔶 🐚	3 🗄 🖾 \land 👖	ool Settings Display Settings
Draw Settings		₽ ×		
Element: Nitrogen (7)	•			
Bond Order: Single 👻				
🗸 Adjust Hydrogens				

7) Для построения двойной связи нужно выбрать Double и щелкнуть левой кнопкой мыши по одинарной связи N-N. Образуется молекула диимида HN=NH. Для получения оптимизированной геометрии молекулы использовать метод UFF.



8) С помощью инструмента можно перемещать молекулу в плоскости, зажав левую кнопку мыши и перемещая курсор.



9) Оптимизация геометрии молекул возможна в режиме реального времени. Для этого нужно выделить атом с помощью к и запустить процесс оптимизации с помощью , нажав Start. Далее необходимо выделить атом, который требуется переместить (в данном случае, водород, подсвеченный красным), перетаскивая в любом направлении. Спустя некоторое время, молекула примет оптимальную геометрию. Для завершения оптимизации нажать Stop.

File Edit View Build Select Ex	tensions	Crystallography Settings Help
🥐 New 🔒 Open 🔚 Save 🛛 🤒 Close	🔀 Quit	🖋 🔶 🖢 👌 🏮 🚟 🚿 🔽 Tool Settings Display Settings
AutoOptimization Settings	ē×	View 1
Force Field: UFF Steps per Update: 4 Algorithm: Steepest Descent Fixed atoms are movable	T	
Ignored atoms are movable Start		
File Edit View Build Select Ex	tensions	Crystallography Settings Help
🦻 New 📥 Open 🔚 Save Close	🔀 Quit	🖌 🛧 🖭 🗞 🕽 🚦 🔤 🔨 Tool Settings Display Settings
AutoOptimization Settings	₽×	View 1
Force Field: UFF		Autoork 8=4127(3/m)(63=0)
Steps per Update: 4 🚔		
Algorithm:		
Steepest Descent	•	
Fixed atoms are movable		
Ignored atoms are movable		
Stop		
File Edit View Build Select Ext	ensions	Crystallography Settings Help
🤥 New 📥 Open 🔚 Save 🥍 Close	🔀 Quit	🖋 🔶 🍓 📐 🤰 💺 📉 🔨 Tool Settings Display Settings
AutoOptimization Settings	₽×	View 1
Force Field: UFF		Autropy E=412712/mml(dE=0)
Steps per Update: 4		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
Algorithm:		
Steepest Descent	•	
Fixed atoms are movable Ignored atoms are movable		
Stop		

File Edit View Build Select Extensions	Crystallography Settings Help
🎐 New 🛁 Open 🔚 Save Close 🔀 Quit	🖋 🔶 🍓 💺 🤰 🍹 🚟 🗞 🛛 Tool Settings Display Settings
New Open Save ♥ Close Quit AutoOptimization Settings # × Force Field: UFF ▼ Steps per Update: 4 ↓ Algorithm: Stepset Descent ▼ □ Fixed atoms are movable	Image:
File Edit View Build Select Extensions ♥ New ● Open ■ Save ♥ Close ♥ Quit AutoOptimization Settings	Crystallography Settings Help
Force Field: UFF Steps per Update: 4 Algorithm: Steepest Descent Fixed atoms are movable Ignored atoms are movable Stop	Arbeite=d27/3/mi/(te=0) Imministiss0

10) Молекулу/фрагмент молекулы можно выделить к и перемещать по полю с помощью . Убрать выделение атомов можно в режиме к, нажав правой кнопкой в любой точке поля.



File Edit View Build Select Extensions	Crystallography Settings Help
🥊 New 📥 Open 🔚 Save Close 🔀 Quit	🖋 🔶 ⊵ 😓 🍹 🧮 🚿 🔽 Tool Settings Display Settings
Selection Settings 🗗 🗙	View 1
Selection Mode: Atom/Bond 💌	
Add Center of Atoms	
Add Center of Mass	
File Edit View Build Select Extensions	Crystallography Settings Help
Selection Settings & X	View 1
Selection Mode: Atom/Bond 🔻	
Add Center of Atoms	
Add Center of Mass	

11) В программе можно добавлять молекулы (ДНК, РНК, пептиды, различные органические молекулы) из собственной библиотеки Build-Insert. Например, можно добавить молекулу фталоцианина.







12) Чтобы ввести обозначения атомов или их нумерацию, нужно добавить окно для визуализации, для обозначения атомов символами элементов поставить галочку Label, для обозначения атомов согласно нумерации нажать гаечный ключик Label », выбрать Atom number.

	Chorona	Crystallography	Settings He	i p		
🦻 New 📥 Open 🔚 Save 🛛 🤗 Close	🔀 Quit	1 🔶 🙋 👌	Toolbars	•	Project Tree	
Selection Settings			S. Canfinus	Aurandan	Display Types	
Selection Settings		View 1	Conligur	Avogadro	 Main Toolbar 	-
Selection Mode: Atom/Bond 🔻					 Tools 	
Add Center of Atoms					 Selection Settings 	
Add Center of Mass					Translate Atoms	
Add Center of Mass					Crystal View Options	
					Surface Slab Builder	
					Cell Parameters	
					Cell Matrix	
				•	Fractional Coordinates	
					GAMESS EFP Information	
					Orbitals	
					Nanotube Builder	
					Vibrations	
				2		
				TIL	J Y I	
			- C			
			\mathbf{U}			
				•		
						-
						0
					\mathbf{O}	
File Edit View Build Select Ext	ensions	Crystallography	Settings He	p		
🎴 New 🔚 Open 🔚 Save 🏼 🤒 Close	🔀 Quit	/ 🔶 🙋	N 🧿 🗄 🔛 💉	Tool Settings Disp	olay Settings	
Display Types						
erehiel ilhee	₽×	View 1				
	₽× &	View 1				
Axes	× 5	View 1				
Axes Ball and Stick	× 5 غر غر	View 1			6	
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole	× 8 نو نو	View 1		m		
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force	۲ × 50 علم علم علم	View 1		Ū.	H	
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force V Hydrogen Bond	5 ×	View 1				
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Label	5 ⁹ × نام نام نام نام	View 1		u.		
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Polygon Polygon	67 ×	View 1		H. H.		
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Value Polygon QTAIM	27 28 20 2	View 1		H H C		Q.
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Dipolg Oracle Carton Add Duplicate Remo	کا × نگر نگر نگر بر	View 1		(B) (C)		
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Label Polygon QTAIM Add Duplicate Remo	ی کی	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond QTAIM Add Duplicate Remo Selection Settings	ع × التي تركيم التي تركم التي تركم التي تركيم التي تركيم التي تركيم التي تركيم التي ترك	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Clabel Polygon QTAIM Add Duplicate Remo Selection Settings Selection Mode: Atom/Bond Y	کل کر کلر کلر کلر کلر کلر کلر کلر کلر کلر ک	View 1				
Axes Ball and Stick Cartcon Dipole Force Hydrogen Bond Cathel Polygon TAIM Add Duplicate Remo Selection Settings Selection Mode: Atom/Bond	کل × کل کل کل کل کل کل کل کل کل کل	View 1	ę			
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond QTAIM Add Duplicate Remo Selection Settings Selection Mode: Atom/Bond ▼ Add Center of Atoms	کل × کل کل کل کل کل کل کل کل کل کل	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Catabel Polygon QTAIM Add Duplicate Remo Selection Settings Selection Mode: Atom/Bond ▼ Add Center of Atoms Add Center of Mass	کل کر کلر کلر کلر کلر کلر کلر کلر کلر کلر ک	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Label Polygon QTAIM Add Duplicate Remo Selection Mode: Atom/Bond Add Center of Atoms Add Center of Mass	3 × 32 × 32 × 32 × 32 × 32 × 32 × 35 ×	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Cabel Polygon QTAIM Add Duplicate Remo Selection Mode: Atom/Bond Add Center of Atoms Add Center of Mass	الم الح	View 1				
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Catabel Polygon QTAIM Add Duplicate Remo Selection Settings Selection Mode: Atom/Bond Add Center of Atoms Add Center of Mass	کار نگر نگر نگر تکر تکر تکر	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond QTAIM Add Duplicate Remo Selection Settings Selection Mode: Atom/Bond Add Center of Mass	کا × نگر نگر نگر ve B ×	View 1				
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond QTAIM Add Duplicate Remo Selection Settings Selection Mode: Atom/Bond Add Center of Mass	کا × اللہ اللہ اللہ اللہ اللہ اللہ اللہ اللہ	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond QTAIM Add Duplicate Remo Selection Mode: Atom/Bond Add Center of Atoms Add Center of Mass	کا × در بر ا بر بر ا بر بر بر بر بر بر بر بر بر بر بر بر بر بر ب	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond QTAIM Add Duplicate Remo Selection Mode: Atom/Bond Add Center of Atoms Add Center of Mass	کا × در تاریخ در تاریخ با تاریخ با تاریخ ها خان ها خان ها خان ها خان ها خان ها خان ها خان ما تاریخ ها خان ها خان ه خان ها خان ما ما خان ما ما ما خان ما ما ما خان ما ما ما ما ما م م ما ما ما ما ما ما ما م ما ما ما ما م ما ما ما ما ما ما م ما ما ما م م م م	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond QTAIM Add Duplicate Remo Selection Settings Selection Mode: Atom/Bond Add Center of Atoms Add Center of Mass	کا × نام کرد کار کرد بر کار بر کار بر مر بر بر بر مر بر بر مر بر مر بر مر بر مر بر مر بر مر بر مر بر مر مر مر مر مر مر مر مر مر مر مر مر مر	View 1				
Axes Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond Other Polygon Other Cather of Mass Add Center of Mass	ع بر المراجع ا المراجع المراجع	View 1				
Axes Ball and Stick Cartoon Dipole Force Hydrogen Bond QTAIM Add Duplicate Remo Selection Mode: Atom/Bond Add Center of Mass	کار کر کلر کرد کلر کرد بر کلر Ve B ×	View 1				

File Edit View Build Select Extensions	Crystallography Settings Help
P New 🔒 Open 🔚 Save P Close 🔀 Quit	🖌 🔶 ⊵ 🕹 💽 🤰 💈 🗱 💉 🛛 Tool Settings Display Settings
Display Types 🔗 🗙	View 1
Axes	Label Settings ? × Settings Objects Atom Labels Text: Atom number Color: Mone Color: Change Font Bond & Kinnbering Formal charge Formal cha

Генерация input-файла для расчетов в программе ORCA

Для генерирования input-файла необходимо построить молекулу, предварительно оптимизировав геометрию. Далее нажать Extensions-Orca-Generate Orca Input... В поле под # прописываются различные комментарии, которые не считываются программой ORCA. Ниже необходимо прописать метод, базисный набор и другие различные параметры, необходимые для расчета (подробнее см. в [5–7]). Далее автоматически добавляются координаты молекулы. При необходимости можно изменить заряд и мультиплетность системы. Нажав кнопку Generate, необходимо выбрать папку, в которую сохранится input-файл (по умолчанию – это обычный текстовый файл с расширением .inp).

File Edit View Build Select E	xtensions Crystallography Settings	Help
🎐 New 🔒 Open 🔚 Save 📍 Clo	Animation	Tool Settings Display Settings
Manipulate Settings	Optimize Geometry Ctrl+Alt+O	
Translate by:	Molecular Mechanics	
X (Å) Y (Å) Z (Å)	GAMESS •	
0,0000 🗢 0,0000 🜩	Abinit	
Rotate around: Origin -	Dalton	
X-axis Y-axis Z-axi	GAMESS-UK	
0,00° 🖨 0,00° 🖨	Gaussian	
Reset Apply	MOLPRO	
Reset	MOPAC	
	NWChem	
	PSI4	
	Q-Chem	
	LAMMPS	
	Molecular Orbitals	
	Orca 🔸	Generate Orca Input
	QTAIM •	
	Spectra	
	Create Surfaces	
	Yaehmop •	

🖄 Orca Input I	Parameters				?	×
Basic Adva	anced					
Comment Calculation Method Charge Format	Single Point Ener RHF • 0 • Cartesian	rgy •	Basis set Multiplicity	def2-SVP •		
# avogadro gen # NH3 molecule IHF DEF2-SVP 0 * Xy2 0 1 N - 8.3310 H -7.36761 H -8.5133 H -9.0096	erated ORCA input PT FREQ 0 1.18317 8 1.58152 4 0.66968 4 1.97267	t file 2.34015 2.29738 1.45044 2.40815				
Hide Preview	Reset			Generate	Close	

Программный пакет ORCA поддерживает параллельные расчёты (через OpenMPI или Microsoft MPI). Например, для запуска расчёта на 8 ядрах во входном файле необходимо указать: ! PAL8

Следует отметить, что часто возникают трудности с расчетом мультиплетности (М), которая связана с полным спином (S) системы как M = 2S+1. Каждый неспаренный электрон имеет спин, равный 1/2 (направлен вверх \uparrow) и -1/2 (направлен вниз \downarrow). Для определения мультиплетности системы необходимо изобразить схематично диаграмму молекулярных орбиталей (МО) молекулы (ниже представлена диаграмма МО для молекулы аммиака), (подробности см. в [1–7]). Молекулы имеют заряд (q) 0, ионы: п или -n; мультиплетность частиц с закрытой электронной оболочкий (без неспаренных электронов) равна 1.



Однако для расчетов часто требуется правильно определить заряд и мультиплетность для, например, протонированных и возбужденных молекул, катион-радикалов и анион-радикалов. Ниже схематично

приведены расположение электронов на орбиталях для таких случаев и расчет заряда и мультиплетности системы.

E	1	E 1	E
Моле	кулярный	Протонированный	Анион-радикал-•
	LUMO ↑↓ HOMO	LUMO ↑↓ HOMO	LUMO somo th HOMO
q=0; S	= 0; M = 2S+1 = 1	q = +1; S = 0; M = 2S+1 = 1	q = -1; S = 1/2; M = 2S+1 = 2
Е ↑ Катич] ⊥ soмо ↑↓ номо	Е Возбужденный триплетный —LUMO sомо sомо sомо номо	
q = +1; ;	S = 1/2; M = 2S+1 = 2	q = 0; S = 1; M = 2S+1 = 3	

Запуск расчета в ORCA

В приведенном примере с помощью командной строки представлен запуск расчета inp-файла NH3.inp, который находится в папке C:\orca\NH3_for_ORCA. Сформированный out-файл после завершения расчета будет сохранен в этой же папке. После завершения расчета в командной строке появится строка C:\orca>, сигнализируя о том, что можно запустить следующий расчет.



После выполнения квантово-химических расчётов программный пакет файлов. ORCA несколько выходных сгенерирует содержащих интересующую нас информацию. Файл NH3.out содержит максимально подробную информацию о ходе расчётов. В файле NH3 property.txt содержится краткая наиболее важная информация о таких результатах расчёта, как полная электронная энергия системы, сольватацинные поправки, дипольный момент, термохимические свойства (энтальпия, энтропия, свободная энергия Гиббса), геометрия модельной системы. Файл NH3.hess содержит подробную информацию о расчёте гессиана модельной системы и её теоретическом ИК-спектре. Файл NH3.opt содержит подробную информацию о ходе и результате оптимизации геометрии модельной системы. Файл NH3.xyz содержит финальную оптимизированную геометрию модельной системы в формате, читаемом для визуализации результатов большинством программ квантовохимических расчётов (например, Avogadro).

Визуализация расчетов

Для этого открыть out-файл или log-файл с помощью программы Avogadro. Открывшаяся молекула имеет оптимизированную геометрию с наименьшей энергей. С помощью Toolbars визуализировать окна, например, Orbitals, Vibrations. Для визуализации теоретического ИК-спектра оптимизированной молекулы NH₃ необходимо нажать Show spectrum.





АНАЛИЗ OUT/LOG-ФАЙЛА

При открытии out/log-файла через программу Блокнот (или любом другом текстовом редакторе) можно получить некоторую полезную информацию, сгенерированную программой в результате расчета молекулы, используя поиск (ctrl + F) по ключевым словам:

1) Program Version – версия программы ORCA, в которой был выполнен расчет

Файл	Изменить	Просмо	отр								
	; ## 	,####### ########## ###'' ,,,,#####	########## ###```` ,,,,##### #########	······, ·····	####### Proc	gram Versi	ion	#	###.		
	',,##' ,,##'' ,#''	#''''		##	******	###,,,, ######### '''###	!##,,,,, !############ '''''#	##### ###'''	,,,,, ######	,###'' #'''	
	,###	####,	#######,	,#######,	#	#					
	,#'	'#,	## ##	,#' '#	, #'	'#	######	,##	##,		
	##	##	## ,#'	##	#'	'#	#	#'	'#		
	##	##	#######	##	,###	###,	#####,	#	#		
	'#,	,#'	## ##	'#, ,#	',#	#,	##	#,	,#		
	'###	####'	## #1	; '#######'	#'	'#	#####	# '##	##'		
		####### # # Di #	Depai Depai rectorsh: Max Pla	****************** *******************	####### eory an code : te fuer helm Pl	d spectr Frank Ne Kohlent atz 1	roscopy eese Forschung	#### # # # #			
		#		D-45470 M	uelheim	ı/Ruhr		#			
		#		Germ	any			#			
		#						#			
		#		All righ	ts rese	rved		#			
		#		-*	**_			#			
		*****	######################################	/ersion 5.0.	####### 3 - RE	"#####################################		####			

2) INPUT FILE – исходный код, по которому проводился расчет

Файл Изменить	Просмотр		
Your calculatior F. Weigend ar	n utilizes the ba nd R. Ahlrichs, F	asis: def2-SVP Phys. Cher 🗸	INPUT FILE
			·····
	Diasco st	WARNING	ngs vonv canofully
	Piedse st	uuy these warni	ligs very carefully:
WARNING: Geometr	v Optimization		
===> : Switchi	ng off AutoStart		
For res	start on a previo	ous wavefunction	n, please use MOREAD
			, p
INFO : the fla	ag for use of the	SHARK integral	package has been found!
	0	0	
==================			
		INPUT FI	LE
NAME = NH3_for_0	RCA/NH3.inp		
1> # avogadro	generated ORCA	input file	
2> # NH3 mole	ecule		
3>			
4> !HF DEF2-9	SVP OPT FREQ		
5>			
6> * xyz 0 1			
7> N	-8.33100	1.18317	2.34015
8> H	-7.36768	1.58152	2.29738
9> H	-8.51334	0.66968	1.45044
9> H 10> H	-8.51334 -9.00964	0.66968 1.97267	1.45044 2.40815
9> H 10> H 11> *	-8.51334 -9.00964	0.66968 1.97267	1.45044 2.40815
9> H 10> H 11> * 12>	-8.51334 -9.00964	0.66968 1.97267	1.45044 2.40815
9> H 10> H 11> * 12> 13>	-8.51334 -9.00964	0.66968 1.97267	1.45044 2.40815
9> H 10> H 11> * 12> 13> 14>	-8.51334 -9.00964	0.66968 1.97267 ****END OF INPUT	1.45044 2.40815

3) MULLIKEN ATOMIC CHARGES – атомные заряду по Малликену

Файл	Изменить	Просмотр		
16	0.0000	1.456213	39,6256	
17	0.0000	1.889260	51.40	
18	0.0000	1.973889	53.71	MULLIKEN ATOMIC CHARGES
19	0.0000	2.095294	57.01 ₂₈	
20	0.0000	2.095303	57.0161	
21	0.0000	2.461150	66.9713	
22	0.0000	2.461160	66.9716	
23	0.0000	2.790824	75.9422	
24	0.0000	3.187407	86.7338	
25	0.0000	3.187415	86.7340	
26	0.0000	3.297097	89.7186	
27	0.0000	3.719582	101.2150	
28	0.0000	3.719597	101.2154	
		ale ale ale de de de de de ale ale ale ale d	e die die die die die die die die die di	5 - 30 - 30 - 30 - 30
		*****	* * * * * * * * * * * * * * * * * * * *	• * * * * *
		* MULLIKEN F	POPULATION ANALY	/SIS *
		********	******	*****
MULLIK	EN ATOMIC CH	IAKGES		
		996		
1 4	· 0.3013	164		
2 4	· 0.1004	161		
2 1	· 0.1004	161		
Sum of	atomic char	-0 000	000	
Juli OI	acomic char	BC31 -0.0000		

4) LOEWDIN ATOMIC CHARGES – атомные заряду по Лёвдину

Файл И	зменить	Просмотр		
dx2 dxy 1 H s pz px py 2 H s pz px py 3 H s pz px py	y2 : ; ; ; ; ; ; ; ; ; ; ; ; ; ; ; ; ; ; ;	0.001894 0.007743 0.849181 0.011770 0.026155 0.012431 0.849184 0.023482 0.009484 0.017389 0.849184 0.017389 0.849184 0.017956 0.020119	s : p : s : p : s : p :	0.8 0.849184 0.050355 0.849184 0.050355
0 N : 1 H : 2 H : 3 H :	-0.1498 0.0499 0.0499 0.0499	********* * LOEWDI ********** ARGES 	******** N POPULA ********	:*************************************

5) MAYER POPULATION ANALYSIS – анализ заселенности по Майеру, где рассчитаны эффективные заряды атомов, формальные заряды и порядок связи

Файл	Изме	нить	Просмотр							
2 H	px py s	:	0.057303 0.033705 0.825438	s :	0.8 ~	MAYER POP	PULATION	ANALYSIS		
	pz	:	0.064185	р:	0.1z4ozo					
	рх	:	0.020630							
	ру	:	0.039805							
3 H	s	:	0.825438	s :	0.825438					
	pz	:	0.034002	р:	0.124620					
	рх	:	0.038450							
	ру	:	0.052168							
			******* * <mark>MAYER</mark> ******	******* POPULA ******	**************************************	***** SIS * ****				
NA	- Mul	liken	gross atomi	c popul	ation					
ZA	- IOU	ai nuc	lear charge							
AQ	- Mui	iiken	gross atomi	c chang	e					
VA DVA	- May	erst op'st	conded valence	e						
DVA EA	- May	erst	Sonueu Varen	ce						
FA	- Hay	EI 5 I	Tee varence							
ATOM	1	NA	ZA	0	A V	/A I	BVA	FA		
0 N	7	.3014	7.0000	-0.3	014 2.9	845 2.9	9845	0.0000		
1 H	0	.8995	1.0000	0.1	005 0.9	951 0.9	9951	0.0000		
2 H	0	.8995	1.0000	0.1	005 0.9	951 0.9	9951	-0.0000		
3 H	0	.8995	1.0000	0.1	005 0.9	951 0.9	9951	-0.0000		
Maye B(0-	er bond N , 1	order -H) :	rs larger th 0.9948 B	an 0.10 (0-N	0000 , 2-Н):	0.9948 B	(0-N,	3-н):	0.9948	

6) FINAL SINGLE POINT ENERGY - финальная полная электронная энергия. В файле присуствует множество значений final single point energy. Неодходимо выбирать наименьшую энергию (обычно – самое последнее значение).

Энергия в файле выдается в Хартри, длина – в Борах, частота – в обратных сантиметрах. Перевод единиц: 1 Хартри = 27,2 эВ = 627,503 ккал/моль = 2625,5 кДж/моль; 1 Бор = 0,529 Å. [4]

Файл Изменить Просмотр						
Total SCF time: 0 days 0 ho	urs 0 min 0	se v	FINA	L SINGLE	POINT E	NERGY
Total time		0.302 Sec				
Sum of individual times		0.083 sec	(27.5%)		
Fock matrix formation		0.059 sec	(19.5%)		
Diagonalization		0.000 sec	(0.0%)		
Density matrix formation		0.000 sec	(0.0%)		
Population analysis		0.014 sec	(4.6%)		
Initial guess		0.002 sec	(0.7%)		
Orbital Transformation		0.000 sec	(0.0%)		
Orbital Orthonormalization		0.000 sec	(0.0%)		
DIIS solution		0.001 sec	(0.3%)		
SOSCF solution	••••	0.007 sec	(2.3%)		
Maximum memory used through	out the enti	ire SCF-ca	lcul	ation:	224.6 ME	3
FINAL SINGLE POINT ENERGY	-56.148	3884435607				

*** OPTIMIZATION RUN DONE ***

* ORCA property calculations * ***********************************
Active property flags

(+) Dipole Moment

7) DIPOLE MOMENT – дипольный момент

Файл Изменить Просм	мотр			
	Active	property flag	s	
(+) Dipole Moment		∽ Dipole Mo	oment	
	DRCA FLECTRIC PROPER	RTTES CALCULAT	TON	
Dipolo Momont Calculatio	an an	on		
Quadrupole Moment Calcul	lation	off		
Polarizability Calculati	ion	off		
GBWName		NH3	for ORCA/NH3.gbw	
Electron density		NH3	for ORCA/NH3.scfp	
The origin for moment ca	alculation is the CE	ENTER OF MASS	= (-15.732627, 2.306167 4	. :
DIPOLE MOMENT				
	Х	Υ	Z	
Electronic contribution:	-0.01564	-0.10314	0.13222	
Nuclear contribution	0.08057	0.53107	-0.68079	
Total Dipole Moment	0.06493	0.42794	-0.54857	
Magnituda (a.v.)				
magnitude (a.u.)	0.698//			
magnitude (Debye)	1.7/613			

8) VIBRATIONAL FREQUENCIES – колебательные частоты, теоретический ИК-спектр молекулы. Отсутствие мнимых частот (imaginary frequencies) говорит о нахождении молекулы в глобальном или локальном минимуме энергии

Файл Изменить Просмотр
Total SCF Hessian time: 0 days 0 hours 0 VIBRATIONAL FREQUENCIES
Maximum memory used throughout the entire SCFHESS-calculation: 51.1 MB
VIBRATIONAL FREQUENCIES
Scaling factor for frequencies = 1.000000000 (already applied!)
0: 0.00 cm**-1
1: 0.00 cm**-1
2: 0.00 cm**-1
3: 0.00 cm**-1
4: 0.00 cm**-1
5: 0.00 cm**-1
6: 1132.02 cm**-1
7: 1781.31 cm**-1
8: 1781.35 cm**-1
9: 3697.21 cm**-1
10: 3825.77 cm**-1
11: 3825.82 cm**-1

9) GIBBS FREE ENERGY – значения рассчитанных термодинамических характеристик: энтальпии, энтропии, энергии Гиббса. Энергия в файле выдается в Хартри.

Файл	Изменить	Просмотр			
sn= sn=	1 S(rot)= 2 S(rot)=	0.00644907 0.00579461	Eh Eh	4.05 kcal/mol	
sn=	3 S(rot)=	0.00541178	Eh	✓ GIBBS FREE EN	IERGY
sn=	4 S(rot)=	0.00514016	Eh	J.23 (Cu1/mo1	
sn=	5 S(rot)=	0.00492947	Eh	3.09 kcal/mol	
sn=	6 S(rot)=	0.00475732	Eh	2.99 kcal/mol	
sn=	7 S(rot)=	0.00461178	Eh	2.89 kcal/mol	
sn=	8 S(rot)=	0.00448570	Eh	2.81 kcal/mol	
sn=	9 S(rot)=	0.00437449	Eh	2.75 kcal/mol	
sn=	10 S(rot)=	0.00427501	Eh	2.68 kcal/mol	
sn=	11 S(rot)=	0.00418502	Eh	2.63 kcal/mol	
sn=	12 S(rot)=	0.00410287	Eh	2.57 kcal/mol	
GIBBS	FREE ENERGY	-			
The Gi	bbs free ene	rgy is G = H - T*	s		
Total Total	enthalpy entropy corr	ection .	·· -	56.10853299 Eh -0.02180538 Eh	-13.68 kcal/mol
Final	Gibbs free e	nergy	- 56	.13033838 Eh	
For co G-E(el	mpleteness -)	the Gibbs free e	nergy m: 	inus the electron 0.01854606 Eh	ic energy 11.64 kcal/mol

ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ КЛАСТЕРУ (WINDOWS)

1) Для подключения к кластеру необходимо скачать программы-клиент: Putty (используется для удаленного управления компьютерами и генерирования открытого и личного ключа) и WinSCP (предназначена для безопасной передачи файлов между локальным компьютером и удаленным сервером).

/putty.org.ru/do	wnload?ysclid	I=lt2vsihvb8167119				_
Главная Ска	ачать Доку	ментация Стать	м Модификац	ии Лицензи	ទេ	
Скачать І	PuTTY: P	усская верс	ия			
Русскоязычная	а сборка РиТ	TY 0.73-RU-17 OT 2	1 декабря 2019:			
Обычная верс	ия:	putty-0.73-ru-1	7.zip			
Портативная в	ерсия:	putty-0.73-ru-1	7-portable.zip			
PuTTY:		putty.exe				
PuTTY Portable	e:	putty_portable.	exe			
PSCP:		pscp.exe				
PSFTP:		psftp.exe				
Plink:		plink.exe				
Pageant:		pageant.exe				
PuTTYgen:		puttygen.exe				
Исхолный кол-		putty-0.73-ru-1	7-src.zip			
исходный код.						
Контрольные о	суммы:	sha256sums				
Контрольные о	суммы:	sha256sums				
Контрольные о	СуММЫ: Ioad.php	sha256sums				A٩
Контрольные о s//winscp.net/eng/down	суммы: load.php CP	sha256sums			Search	A٩
Контрольные (s://winscp.net/eng/down winscp. rec втл scn; Home	Ioad.php CP Bit and FTP citent for Windows News	sha256sums	Download	Install	Search Documentation	AN
Контрольные (s://winscp.net/eng/down WinSC New Strin Son ; Horme	CYMML: load.php CP Sa and FTP clert for Windows News	sha256sums	Download	Install	Search Documentation	A
Контрольные о ://winsep.net/eng/down 	CYMML: Noad php CP CP News	sha256sums Introduction WinS	Download CP 6.3 Dow	install vnload	Search Documentation	A ⁸
контрольные о «/winsep.net/eng/down winsep.net/eng/down winsep.net/eng/down Home	Dymme: load.php CP CP News	sha256sums recoduction WinS	Download CP 6.3 Down	unstall vnload	Search. Documentation	A ^a
Контрольные (s//winsep.net/eng/down winsep.net/eng/down Preserver.com	Ioad php CP E and 17T clere for Worksows News	sha256sums Introduction WinS	Download CP 6.3 Dow Advertisement	unstail vnload	Search Documentation	A ^a
Контрольные о c//winsep.net/eng/down winsep.net/eng/down инстри несто	CP Is and The General for Worksons Nerves	sha256sums Introduction WinS	Download CP 6.3 Dow Advertisement	unstail vnload	Search. Documentation	A ³
Kontrponshiele (://winsep.net/eng/down WinSc Home	Road.php CP News	sha256sums Introduction WinS	Download CP 6.3 Dow Advertisement	install vnload	Search Documentation	A ^a
Kontrponshie (z/winschnet/eng/down Home	Road php CP Dear of 177 dear for Windows News	sha256sums Introduction WinS	Download CP 6.3 Dow Advertisement features and enhancement	install vnload	Search Documentation	A ⁸
Kontrponshile (://winsep.net/eng/down WinSc Home	CP CP Exact for the forwardward News WinSCP 6.3 is a - Single farg	sha256sums	Download CP 6.3 Dow Advertisement Ifeatures and enhancement g multiple SFTP connections	install vnload s include: s.	Search. Documentation	A
Контрольные (://winscp.net/eng/down winscp. Winscr Home	CPMML: Read php CP Bread The clean for Worksons Nerves WinSCP 6.3 is a - Single farg - Single farg - Single farg	sha256sums Introduction WinS major application update. New ge file can be downloaded using or OpenSSH certificates for how are build as or treinion for exer	Download CP 6.3 Dow Advertisement features and enhancement g multiple SFTP connections truerification.	install vnload s include: s.	Search. Documentation	A*
Контрольные (к/winscp.net/eng/down winscp.net/eng/down не вто вос ното	CP CP CP CP CP CP CP CP CP CP CP CP CP C	sha256sums Introduction WinS major application update. New ge file can be downloaded using or OpenSSH certificates for for bankor when duplicating and	Download CP 6.3 Dow Advertisement features and enhancement gmultiple SFTP connection th verification, wichronization,	vnload s include: s.	Bearch Documentation	A ³
Kontponshee (s/winschnet/eng/down Winss Henre	CP CP CP CP WinSCP 6.3 is a Single larg Support for Support for	sha256sums Introduction WinS major application update. New ge file can be downloaded using or OpenSSH certificates for hos can be used as officientor for sys can be used as officientor for thos can be used as officient for	Download CP 6.3 Dow Advertisement features and enhancement gmultiple SFTP connections it verification. gmultiple SFTP connections it verification.	Install VNIOAd s include: s.	Bearch. Documentation	A ³

2) После установки в папке программы Putty запустить приложение puttygen (предназначено для генерирования открытого и личного ключа для аутентификации на удаленных серверах). После нажатия кнопки «генерировать» будут сформированы ключи, для ИХ сохранения нажать «Открытый ключ» и «Личный ключ». Открытый ключ необходимо отправить электронной почте ПО new user.computing@nrcki.ru вместе с заполненной формой "Регистрация пользователя" и сканом-копией подписанной формы "Регистрация пользователя". Регистрация пользователя проводится у ответственного в НОЦ. «Личный ключ» следует переместить на диск с Вашего компьютера для обеспечения сохранности файла.

💕 Генератор ключей Р	uTTY		×		
Файл Ключ Конвер	тация Справка				
Ключ					
Открытый ключ для в	ставки в файл authorize	d_keys формата OpenS	SH:		
ssh-rsa AAAAB3NzaC1yc2EAA AnUGQIsy/ABvzOJ4gfł +xIHHxLBcfRgARrgtPR BSV12fjltvJLPYVeTpS	AABJQAAAQEAnHuZCS (v1Qh3IAP80BUqnmH5SI HeATkDCopwNiApmy4v 7YvxsIIJiLAH1b6SyrR0TC	X3oFomGaKTuli7QvfzEb b0fECKqtJhsSVS3w9z8Sl bkmeLXdK1rq4oVnKMXS JfPZeG9gLeI1QXP	iksL423dJMtL9LMc QT+pwkdR SMJEEYRDkYbHB		
Отпечаток ключа	ssh-rsa 2048 3f.26:ab:8f.	34:4e:29:1e:9a:3c:c0:2e:2	b:49:06:63		
Комментарий:	rsa-key-20240226				
Парольная фраза:					
Повторить пароль:					
Действия					
Генерировать ключее	вую пару		Генерировать		
Загрузить существук	ощий файл личного клю	ча	Загрузить		
Сохранить сгенерированные ключи Открытый ключ Личный ключ					
Параметры					
Тип ключа для генера О RSA О [ации: DSA OECDS	A 🔿 Ed25519	⊖ SSH-1 (RSA)		
Длина генерируемого	о ключа (в битах):		2048		

3) Запустить Putty. Далее необходимо выполнить настройку. Во вкладке «Сеанс» ввести «Имя хоста»: <u>https://ui4-el7.computing.kiae.ru</u>

азделы:							
- Сеанс - Журнал	Основные настройки сеанса PuTTY						
- Сценарии	Укажите адрес, к которому хотите подключиться						
Комментарий	Имя хоста (или IP-адрес)	Порт					
🖃 Терминал	https://ui4-el7.computing.kiae.ru	22					
— Клавиатура — Уведомления — Особенности	Тип соединения:) Telnet O SSH Raw Rlogin S	Serial OADB					
Окно	Управление сеансами						
⊟-Поведение		Очистить					
— Кодировка ⊞-Выделение	Default Settings	Загрузить					
— Цветовая схема — Прозрачность		Сохранить					
— Гиперссылки — Иконки		Удалить					
-Соединение Данные		Новая папка					
— Прокси — Telnet		Удалить папку					
Rlogin ⊞-SSH		Уровень выше					
ZModem							

4) Во вкладке SSH выбрать «Аутентификация». В поле «Файл с личным ключом для аутентификации» загрузить Личный ключ.

🗾 Настройки PuTTY		×
Разделы:		
Клавиатура	Параметры управления SSH аутентификацией	
Особенности	🗹 Показывать пред-аутентификационный баннер (только для SS	H-2)
⊡∙Окно	Полностью блокировать аутентификацию (только для SSH-2)	
Поведение	Методы аутентификации	
Кодировка	Пробовать аутентификацию с использованием Pageant	
Выделение	Пробовать аутентификацию TIS или CryptoCard (SSH-1)	
Прозрачность	Пробовать аутентификацию с "интерактивной клавиатуры" (SS	SH-2)
- Гиперссылки	Параметры аутентификации	
Иконки	Разрешить перенаправление агента	
Данные	Разрешить порытку смены имени пользователя (SSH-2)	
Прокси	Файл с личным ключом для аутентификации:	
- Telnet	06300	o
Riogin E-SSH		
Обмен ключами		
- Ключи узла		
Шифрование		
TTY		
X11		
Туннели		

5) Вернуться во вкладку «Сеанс» и сохранить введенные изменения.

🗾 Настройки PuTTY		
Разделы:		
🖃 Сеанс	Основные настройки сеанса Р	JTTY
— Журнал — Сценарии — Комментарий	Укажите адрес, к которому хотите подключиться Имя хоста (или IP-адрес)	Порт
 Терминал Клавиатура Уведомления Особенности 	https://ui4-el7.computing.kiae.ru Тип соединения: TelnetSSHRawRlogin	22 ⊖ Serial ◯ ADB
 Окно Внешний вид Поведение 	Управление сеансами	Очистить
— Кодировка ⊕-Выделение	Default Settings	Загрузить
— Цветовая схема — Прозрачность		Сохранить
Иконки		Удалить
— Соединение		Новая папка
Прокси Telnet		Удалить папку
Rlogin ⊟-SSH Обмен ключами		Уровень выше
Ключи узла Шифрование	Папка Default	~

6) Далее открыть программу WinSCP. Добавить новое подключение. Ввести «Имя хоста», имя пользователя, пароль (при необходимости). Далее нажать «Еще» для загрузки «Личного ключа».

новое подключение		Соединение Протокол передачи: SFTP V	
		Имя хоста: ui4-el7.computing.kiae.ru	Порт:
		Имя пользователя:	Пароль:
		Сохранить 🔽 Отмена	Ещё

7) Перейти во вкладку «Аутентификация». В поле «Файл закрытого ключа» загрузить «Личный ключ» и сохранить изменения.

асширенные настройки	соединения ? Х
асширенные настройки Среда – Каталоги – Корзина – Шифрование – SFTP – Оболочка Подключение – Прокси – Туннель SSH – Обмен ключами – Аутентификация – Обработка ошибок Заметка	 Полностью игнорировать аутентификацию (SSH-2) Настройки аутентификации ✓ Пытаться аутентифицировать с помощью Pageant ✓ Пытаться аутентифицировать с помощью клавиатуры (SSH-2) ✓ Отвечать с паролем на первый запрос Настройки аутентификации Разрешить обращение к агенту через себя
	Файл закрытого ключа: C:\Users\user\Downloads\ Показывать публичный ключ Инструменты Сертификат для использования с приватным ключом:
	GSSAPI GSSAPI GSSAPI (SSH-2) Разрешить передачу мандата GSSAPI
Цвет 🔻	ОК Отмена Справка

8) Сохранить изменения. Далее следует войти в свою папку.

Нов	зое подключение	Соединение	
@ui4-el7.computing.kiae.ru	Протокол передачи:		
		SFTP	
		Имя хоста:	Порт:
		ui4-el7.computing.kiae.ru	
		Имя пользователя: П	ароль:
			•••••
		Изменить	Ещё

9) В своей папке следует создать .bash_profile, в котором будет прописаны необходимые команды. Bash-файлы по умолчанию скрыты от пользователя. Для их демонстрации необходимо в программе WinSCP нажать «Настройки» , «Панели», добавить галочку во вкладке «Показывать скрытые файлы». Сохранить изменения.



10) Сочетание клавиш Shift+F4 позволит создать новый файл, в который необходимо ввести следующее:

```
export PATH=$PATH:/s/ls4/groups/g0141/bin
export PATH=$PATH:/s/ls4/groups/g0141/orca_5_0_4
export PATH=$PATH:/s/ls4/groups/g0141/orca_5_0_4/openmpi/bin
export
```

LD_LIBRARY_PATH=\$LD_LIBRARY_PATH:/s/ls4/groups/g0141/orca_5_0 _4/openmpi/lib

export PATH=\$PATH:/s/ls4/groups/g0141/orca_5_0_4/orca

Редактировать файл		?	Х
<u>В</u> ведите имя файла:			
.bash_profile			\sim
ОК	Отмена	<u>С</u> прав	ка
/s/ls4/users/ /.bash_profile - @ui4-el7.computing.kiae.ru -	Редактор – WinSCP		
🗟 🖓 🗟 🖣 🛪 💼 🗙 🖪 🦻 🖓 🕅 👪 🕼 🖌 Кодировка -	• 🗌 Цвет • 🔅 💡		
export PATH=\$PATH:/s/ls4/groups/g0141/bin export PATH=\$PATH:/s/ls4/groups/g0141/orca_5_0_4/o export PATH=\$PATH:/s/ls4/groups/g0141/orca_5_0_4/o export LD_LIBRARY_PATH=\$LD_LIBRARY_PATH:/s/ls4/groups/g0141/orca_5_0_4/o	penmpi/bin ups/g0141/orca_5_0 rca	_4/openmp	i/lib

11) Запуск расчетов можно проводить двумя способами – используя Putty или WinSCP. Рассмотрим оба способа.

Рассмотрим запуск расчета с помощью Putty. После запуска программы необходимо ввести Ваше имя пользователя.

ß	ui4-el7.computing.kiae.ru - PuTTY
2	login as:

12) Далее в строку вводят различные команды, чтобы прописать путь к inp-файлу.

ls – вывести все файлы внутри текущей папки;

cd (имя папки) – переместиться в папку;

cd .. – выйти на шаг назад из папки;

cd – выйти в первоначальную папку пользователя;

prop504 (имя инпута).inp – запустить расчет с таким именем;

proplease – создать отдельную папку для каждого inp файла внутри

текущей папки и запустить их;

squeue – посмотреть очередь своих расчетов;

scancel (jobid) – отменить расчет с номером jobid;

queue – посмотреть всю очередь сервера.



13) Рассмотрим запуск расчета с помощью WinSCP. В этой программе можно не прописывать путь к inp-файлу. Для этого следует в папке пользователя открыть папку, в которой находится inp-файл. Сочетание клавиш Shift+ctrl+T откроет в консоль, в которой вводят команды prop504 NH3.inp или proplease.



ПОДКЛЮЧЕНИЕ К ОБЪЕДИНЕННОМУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ КЛАСТЕРУ (MACOS)

Для генерации публичного и приватного ключей на macOS необходимо ввести команду ssh-keygen -t rsa в терминале и нажать ввод. Далее необходимо ввести путь (оставить тот, который предложен по умолчанию). Затем нужно ввести passphrase (фразу для экстренного восстановления доступа), и ещё раз нажать ввод. Ключи будут сохранены по адресу /.ssh/.



Для подключения к серверу необходимо ввести команду: ssh имя_пользователя@IP-адрес (или Имя_хоста). Для подключения к вычислительному кластеру Курчатовского института необходимо ввести имя хоста: ui4-el7.computing.kiae.ru. Команды для выполнения задач и bash-файл смотри выше для Windows.

PAEOTA B CREST



CREST (Conformer-rotamer sampling tool) – программа для автоматического и эффективного поиска наиболее энергетически выгодных конформеров и ротамеров для исследуемой структуры (более подробная информация представлена здесь: <u>https://crest-lab.github.io/crest-docs/</u>). Каждой конформации молекулы соответствует минимум на поверхности потенциальной энергии. Наша задача – найти наиболее выгодную конформацию для молекулы, т.е. ту геометрию, которая ниже всего по энергии, выполняя следующие шаги.

- 1) Нарисовать структуру в любом химическом редакторе, например, в Avogadro (см. выше) или в ChemDraw (далее экспортировать файл в формате .sdf или .mol, зачем открыть молекулу в Avogadro), сохранить в формате .xyz (File–Save As).
- 2) Перед тем как запустить конформационный поиск, можно предварительно оптимизировать геометрию молекулы. Это возможно с помощью XTB, используя объединенный вычислительный кластер. Для этого файл с координатами молекулы формата .xyz помещаем в папку и запускаем оптимизацию XTB командой:

sxtb file.xyz --alpb H2O --opt -P24

где *file.xyz* – координаты молекулы с именем file,

aplb solvent – модель растворителя (более подробная информация представлена здесь: https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/gbsa.html), *Р 24* – количество процессоров, необходмое для проведения расчета.



Метод является достаточно быстрым, после его завершения генерируется файл *xtbopt.xyz*, который можно открыть с помошью Avogadro. При необходимости полученную геометрию молекулы можно отредактировать.

3) Запуск конформационного поиска. Полученную геометрию после оптимизации XTB (*xtbopt.xyz*) необходимо использовать для запуска расчета с помощью команды:

screst xtbopt.xyz --alpb H2O -T24

Продолжительность зависит от размера системы/заданных условий/возможности существования конформеров.

4) После завершения расчета генерируются следующие файлы: crestconformers.xvz, crest-rotamers.xvz, crest-best.xvz. Файлы crestconformers.xvz, crest-rotamers.xvz включают в себя все конформации и их значения энергии, которые были сгенерированы программой CREST. Файл crest-best.xyz содержит только одну, самую оптимальную конформацию, т.е. с наименьшим значением энергии. Полученные файлы удобно открывать с помощью программы Chemcraft (https://www.chemcraftprog.com/ru/):



5) Рекомендуется брать несколько полученных геометрией из конформационного ансамбля, например, первые 3–5, а не только геометрию молекулы, полученной из файла *crest-best.xyz*, и затем данные структуры оптимизировать более дорогостоящим методом, так как в программе CREST используется полуэмпирический метод оптимизации, что также может приводить к неадекватным, с точки зрения химических представлений, структурам. Поэтому критически оцениваем получаемые геометрии конформеров!

Рассмотрим некоторые примеры. Проведено моделирование конформеров полиэлектролитной возможных сборки: три звена поли(акриловой) кислоты (PAA) три звена хлорид И поли(диаллилдиметиламмония) (PDADMAC). Первые шаги с оптимизацией в XTB выполнены так же, как описано выше. Рассмотрим полученный конформационный ансамбль.



В данном случае сгенерировано достаточно большое количество конформеров, а именно 71, что связано со сложностью и подвижностью выбранной системы.



Как следует из значений энергий, разница между первой и десятой конформацией достаточно велика, поэтому имеет смысл взять не одну конформацию в качестве итоговой. В данном случае были выбраны 10–11, но для других систем может быть иначе. Важно помнить, что конформеры должны отличаться друг от друга. В этом и смысл конформационного поиска.

Затем внутрь полученного коацерватного тримера был помещен альдегид, снова проведен конформационный поиск, так как включение молекулы альдегида внутрь полости изменяет геометрию системы. Молекула ванилина, включенная внутрь тримера, выглядит следующим образом:



Так как рассматриваемая система является достаточно большой (большое количество атомов, сложная геометрия), то для дальнейших расчётов был использован метод r²SCAN-3c, который обладает необходимым балансом между точностью расчета и его ресурсозатратами. Выбор метода будет зависеть от изучаемой системы и желаемой точности.

Таким образом, мы посчитали первые десять геометрий системы после конформационного поиска и сравнили между собой значения энергии Гиббса для точного определения наиболее энергетически выгодной конформацию.

Также можно посмотреть, как проходила оптимизация изучаемой системы в процессе квантово-химических расчетов. Для этого необходимо открыть файл с расширением .log или .out: Optimization Steps–Tools–Show optimization convergence.





Как следует из графика изменения относительной полной электронной энергии в процессе оптимизации геометрии системы, значения энергии выходят на плато, что говорит о приближении системы к минимому на поверхности потенциальной энергии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абаренков И. В., Братцев В. Ф., Тулуб А. В. Начала квантовой химии. — М.: Высшая школа, 1989. — С. 303. — ISBN 5-06-000492-9.

2. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. — М.: Мир, 2001. — С. 519. — ISBN 5-03-003414-5.

3. Грибов Л. А., Муштакова С. П. Квантовая химия. — М.: Гардарика, 1999. — 390 с.

4. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учебное пособие. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 495 с.

5. Майер И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул. — БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. — 384 с. — ISBN 5-94774-499-6

6. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. — М.: Химия, 1986. — 248 с.

7. Гельман Г. Г. Квантовая химия М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. ISBN 978-5-94774-768-3 Новиков Александр Сергеевич Ботнарь Анна Александровна Ермолин Данила Владимирович Скорб Екатерина Владимировна

Применение программных пакетов Avogadro, ORCA, Putty, WinSCP и CREST для выполнения квантово-химических расчётов

Учебное пособие

В авторской редакции Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО Зав. РИО Н.Ф. Гусарова Подписано к печати Заказ № Тираж Отпечатано на ризографе

Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО

197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49, литер А