

Du wirst heute machen...

- **3D-Molekülstrukturen** mit dem Programm Jmol erstellen
- **Konformere suchen** mit dem Programm CREST
- **Gibbs Energien berechnen** mit dem Quantenchemie-Programm ORCA
- **Reaktionsenergien** bei der Veresterung selbst **berechnen**

Ziel deines Projekts

Berechnung der Reaktionsenergie, der Veresterung von Essigsäure und *n*-Butanol

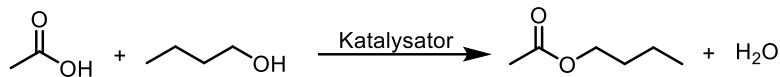


Abbildung 1. Veresterung von Essigsäure und *n*-Butanol.

Diese Software wirst du verwenden

- **Jmol**: Zeichnen von 3D-Strukturen
- **CREST**: Untersuchung des “Konformellen Raums” (finden von Konformeren)
- **ORCA**: Berechnung der Energie eines Molekül-Konformers oder von Reaktionsenergien

1. 3D-Strukturen der Moleküle erstellen mit Jmol

Starte Programm Jmol: Finden über Menüleiste (oben links) durch Eingabe im Suchfeld

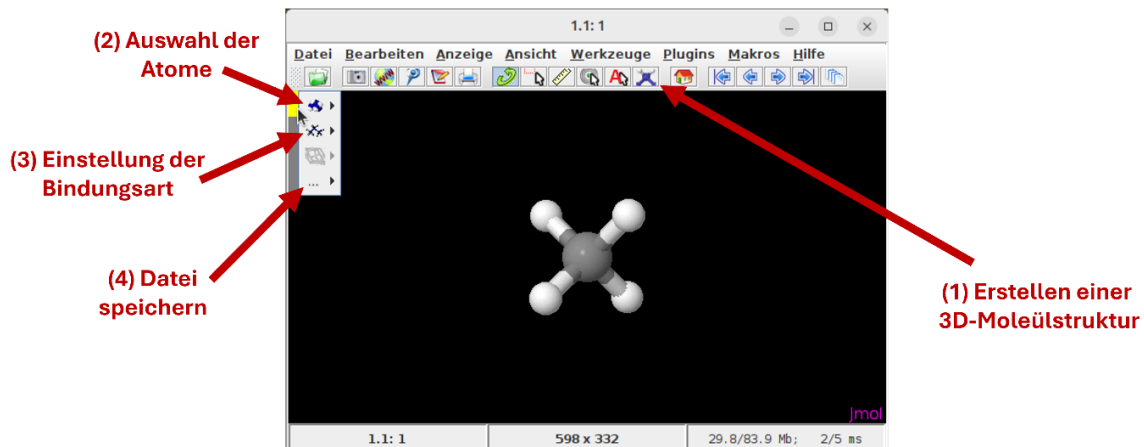


Abbildung 2. Verwendung von Jmol.

Wähle wie in *Abb. 2* einen Button durch *click* aus für folgende Funktionen im Programm:

- (1)→ Erstellen einer neuen Molekülstruktur
- (2)→
- Auswahl eines Atoms: Dadurch z.B. Atomart veränderbar (z.B. O, C, H, ...), mit Linksklick auf bereits vorhandene Atome anzuwenden
 - Löschen eines Atoms durch Kombination mit der Löschen-Taste
- (3)→ Veränderung Bindungsart (Einfach-, Doppel oder Dreifachbindung) zwischen zwei anschließend ausgewählten Atomen

(4)→ Speichern des Moleküls (für jedes Molekül in einem eigenen Ordner mit sinnvollem Namen und darin dann als Dateiformat *.mol*, z.B. *butanol.mol*)

2. Konformere finden mit CREST

Du solltest deine Moleküle jetzt erstellt und gespeichert haben. Im nächsten Schritt untersuchst du den konformellen Raum der Moleküle. Dafür werden wir **CREST** verwenden, welches neben der Konformationssuche auch eine Geometrieoptimierung mittels Kraftfeld vornehmen wird. Daher ist es kein Problem, wenn das vorher gezeichnet Molekül nicht perfekt aussieht.

CREST wird nicht wie Jmol graphisch gestartet, sondern über die **Kommandozeile** angesteuert.

Starte eine Kommandozeile mit STRG+ALT+T

Nun müssen wir in der Kommandozeile zu dem Verzeichnis navigieren, in dem sich unser soeben gespeichertes Molekül befindet. Um den Dateipfad zu finden kann man einfach im Ordner, dessen Dateipfad man wissen will, Rechtsklicken und anschließend Eigenschaften auswählen und ausführen; siehe *Abb. 3* als Beispiel. Der Unterpunkt „Ort“ zeigt dann den Dateipfad.

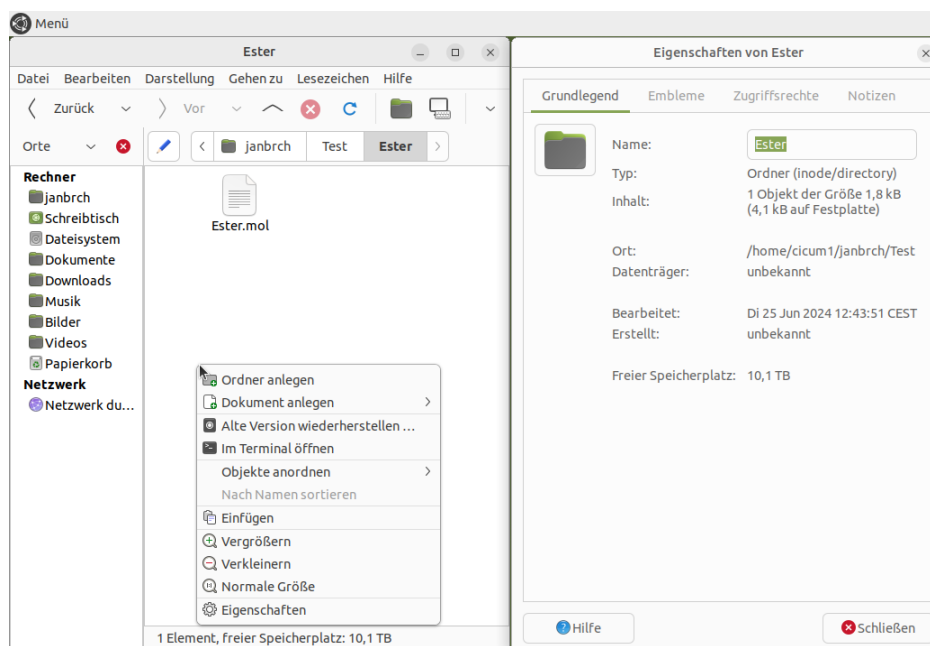


Abbildung 3. Einsehen des Dateipfads.

Befehle für die Kommandozeile:

cd [Ordnerpfad] Navigiere in einen Ordner. Beispiel: `cd /home/cicum1/janbrch/test`

ls Listet alle Dateien und Ordner im aktuellen Verzeichnis

crest_submit_mol Startet das Skript *crest_submit_mol*, das CREST für die *.mol* Datei im Ordner ausführt. Das Programm dauert ein paar Sekunden. Es sollten neue Dateien im Ordner erscheinen. Unter anderem „*crest_best.xyz*“, welche wir brauchen werden.

Führe folgende Schritte für jedes deiner erstellten Moleküle (außer Wasser) aus:

1. Navigiere mit *cd* in den Ordner mit der *.mol* Datei
2. Überprüfe mit *ls* ob deine *.mol* Datei wirklich im Ordner ist
3. Starte das Skript *crest_submit_mol* (mit dem gleichnamigen Befehl)

Sobald **CREST** fertig ist, werden mehrere neue Dateien generiert. Für uns ist die erstellte Datei „*crest_best.xyz*“ die Interessanteste, da sie die Koordinaten von dem energetisch günstigsten Konformer enthält.

4. Erstelle einen neuen Ordner und kopiere die Datei *crest_best.xyz* hinein (mache das einfach grafisch über den normalen Dateimanager)

Für deine Datei „wasser.mol“:

Nachdem wir hier CREST nicht verwenden, aber trotzdem ein *.xyz* Format brauchen, müssen wir das Dateiformat manuell anpassen (damit es für ORCA lesbar wird).

1. Navigiere mit *cd* in den Ordner mit der *.mol* Datei
2. Überprüfe mit *ls* ob deine *.mol* Datei wirklich im Ordner ist
3. Führe folgendes Kommando aus (wenn deine Datei *wasser.mol* heißt, passe sonst das Kommando an):

```
obabel wasser.mol -O wasser.xyz
```

3. Gibbs Energien der Konformere noch exakter berechnen mit ORCA

Führe folgende Schritte für jede deiner *crest_best.xyz*, bzw. *wasser.xyz* Dateien aus:

1. Navigiere mit *cd* in den Ordner mit der *.xyz* Datei
2. Überprüfe mit *ls* ob deine *.mol* Datei wirklich im Ordner ist
3. Starte das Skript *orca_HF* (mit dem gleichnamigen Befehl)

Orca führt nun eine Optimierung und Frequenz-Rechnung durch. Das kostet viel Rechenleistung und wird bis zu 5 Minuten dauern. **Nutze die Zeit für die Berechnung der verbleibenden Moleküle** (öffne dafür parallel eine neue Kommandozeile).

Sobald **ORCA** seine Rechnung abgeschlossen hat, erstellt es die Datei „*name.out*“, welche die Gibbs-Energie des Moleküls enthält und die optimierte Struktur.

4. Auswertung der Ergebnisse

Die optimierte Struktur können wir uns über das Programm **Molden** anschauen.

Führe die folgenden Schritte für jedes optimierte Molekül aus

1. Navigiere mit *cd* in den Ordner mit der *.out* Datei
2. Führe das Programm **Molden** in der Kommandozeile auf die jeweilige *.out* Datei aus:

molden name.out

3. Extrahiere die Gibbs Energien mit dem gleichnamigen Skript *G_Energies_orca* aus der *.out* Datei:

G_Energies_orca

ORCA gibt die Energien in der Einheit Hartree an: **1 Hartree = 2625.5 kJ/mol = 627.5 kcal/mol**