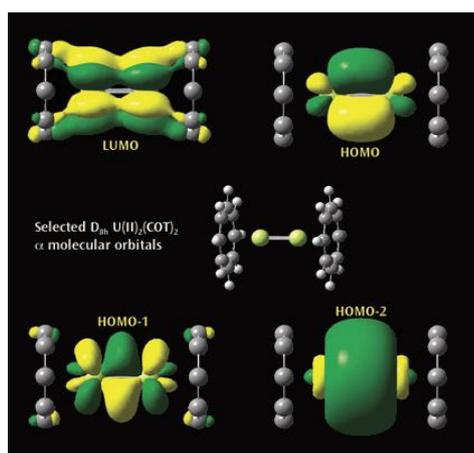


GaussView 5 教程

双铀茂络化合物的搭建

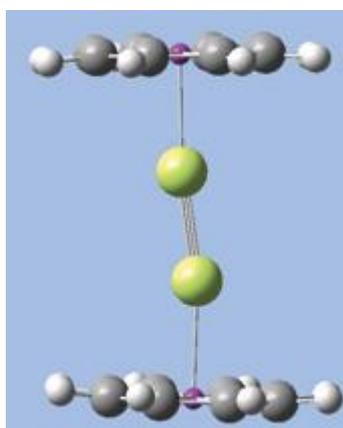


2014 年 9 月

广州市墨灵格信息科技有限公司

构建分子：比以往更容易

GaussView 早已提供了强大的分子构建特性，而 GaussView 5 则大大地扩充了这一技能。我们将示范性地介绍其中的一些特性，我们在这个小册子的封面左下方构建了一个双铀茂络化合物（diuranium metallocene）体系： $U(II)_2(\eta^8-COT)_2$ [bis(η^8 -cyclooctatetraene) diuranium]。这个分子具有 D_{8h} 对称性。Gaussian 计算预测的分子轨道也展示在封面插图上。

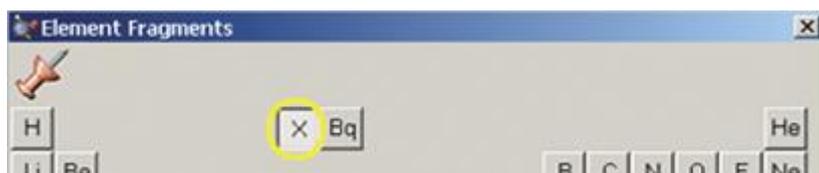


操作流程

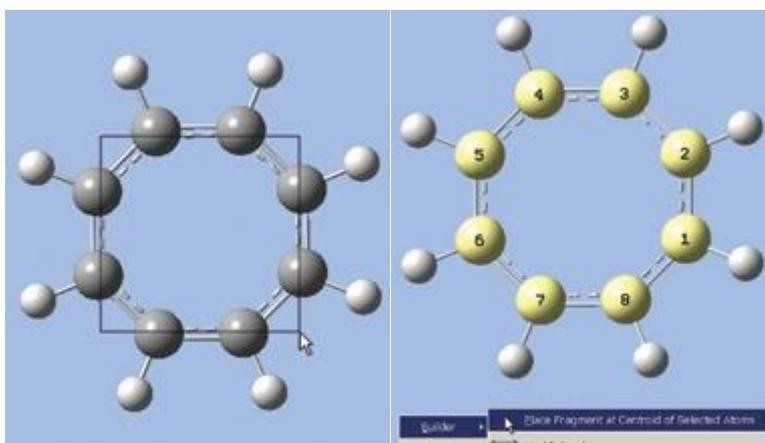
1、GaussView 5 提供了一个最常用的环片段画板。然而，这里的八元环是环辛烷（椅式构型）。我们需要一个平面的 8 碳环。我们此前已经用到这个，结构保存在我们自定义的片断库里。从构建工具栏中选择它并在视窗中点击添加。



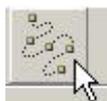
2、从 **Element Fragments** 画板中选择哑原子（dummy atom）（原子符号 X）：



3、现在选择所有的碳原子。一个便捷方法是使用 GaussView 5 的新橡皮圈选择模式。在视窗中,按下 R 键并拖动鼠标,生成一个与所有碳原子都接触的方框(见右边第一幅插图)。当放开鼠标按钮,那些选择了的原子会变成黄色(如右边第二幅插图)。



4、右键点击视窗,然后在快捷菜单中选择 **Builder=>Place Fragment at Centroid Selected Atoms**。一个品红色的哑原子就会出现在环的中心。

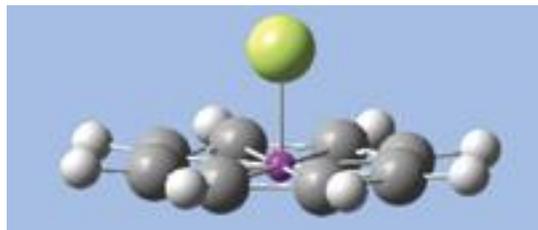


5、点击 **Rebond** 图标,从哑原子到 8 个碳原子添加化学键。

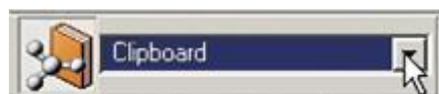


6、点击 **Add Valence** 按钮,然后点击哑原子。氢原子将键连在哑原子上

并垂直于环平面。将氢原子改成铀原子。分子现在如下图所示：



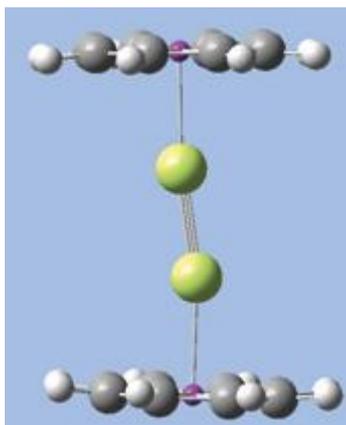
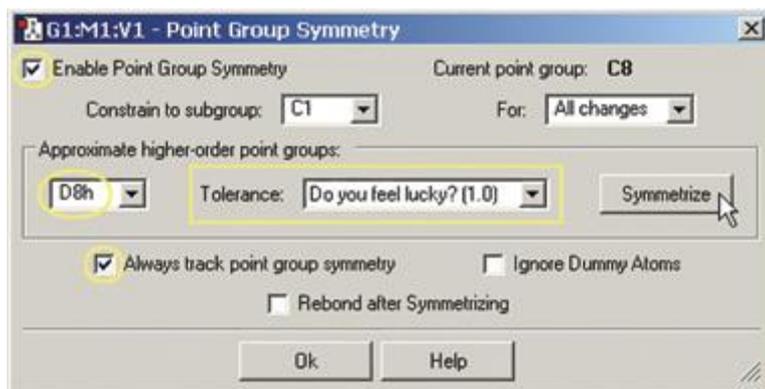
7、选择整个分子。在 GaussView 5 中完成该动作的一个快捷方式是当激活视窗时按住 **A** 键。然后，输入 Ctrl-C 或者 Command-C，将它复制到粘贴板上。粘贴板上任何一个结构都可以在自定义的片断菜单中使用。选择 Clipboard 项，然后在适合的地方点击一下，向视图添加另一个单体。



8、按下 Alt 键来限定鼠标对新片断的活动，将它移到大致合适的位置。提示：将第二个 U 原子放到第一个里边，会使两个相互平行的环摆放起来更容易些。之后，将第二个片断拖离第一个。

9、添加一个长度为 2.24Å 的三键。然后将 X-U-U-X 二面角调整成 180°。

10、最后一步是通过 Point Group Symmetry 对话框（在 Edit 菜单上）对分子施加适当的对称性。我们使用点组对称性（point group symmetry），该分子具有 C1 对称性。设置 Tolerance 为最宽松水平，从弹出菜单中选择 D8h，然后点击 Symmetrize 按钮，将对称性施加到分子上（见右边的对话框）。现在结构构建完成。



联系我们

广州市墨灵格信息科技有限公司

地址：广州市天河区龙口东路 34 号龙口科技大厦 2002

邮编：510630

电话：020-38261356

电邮：info@molcalx.com

主页：<http://www.molcalx.com.cn>

新浪微博：<http://weibo.com/molcalx>

腾讯微博：<http://t.qq.com/molcalx>

联系我们所要一个月的免费测试用软件!!!

你可以选择在线申请，简单又方便：登陆我们的网站，点击联系我们。