

## 座標系統與模型的建立

在從事化學計算中，通常在最初的步驟中需要輸入分子結構 (Z-matrix)。一般可將分子結構的輸入方式分成三種，分別是使用

- (1) 直角座標 (cartesian coordinates)
- (2) 分子內部座標 (internal coordinates or Z-matrix)
- (3) 圖形介面 (graphic interface)

直角座標的方式是將分子中每一個原子的 xyz 座標分別列出，這是一種最簡單的結構指定方式，比如說二氧化碳的結構可以用以下的座標表示

```
O  0.0  0.0  0.00
C  0.0  0.0  1.23
O  0.0  0.0  2.46
```

直角座標是一種最直接的結構指定方式，通常在描述直線分子，或具有某些高對稱性 ( $D_{4h}$ ,  $O_h$ ) 的簡單分子時是很好的選擇，對許多大型分子而言這也是一種常用方法，如蛋白質資料庫的 pdb 檔案格式。但對於一般小分子而言，直角座標有時並不是非常方便，因為化學家通常記在心中或在表上查到的是化學鍵的鍵長與鍵角的數值，而這些結構資料並不容易直接以直角座標表示出來。而分子內部座標就是以化學分子中的鍵長鍵角等資料將分子結構指定出來。比如說水分子的座標可由二個鍵長及一個鍵角唯一指定，寫成分子內部座標則為

```
H
O  1  0.97
H  2  0.97  1  104.0
```

在以上座標中，每一列 (row) 代表一個原子的座標，第一個原子不需指定任何座標，第二個原子後面需指定與第一個原子的距離 (0.97 Å)，在第三個原子的座標中我們指定了它與第二個原子的距離 (0.97 Å) 以及它和前面二個原子所形成的鍵角 (104.0 度)。

當分子由四個以上的原子組成，以分子內部座標指定結構時常需要再輸入二面角 (dihedral angles)，如

```
Cl
C  1  1.8
H  2  1.1  1  110.0
H  2  1.1  1  110.0  3  120.0
H  2  1.1  1  110.0  3  -120.0
```

二面角的範圍習慣上是由 -180 到 180，假設我們以 ABCD 四個原子來指定 A 原子的二面角，IUPAC 的定義是：沿著 B-C 鍵看去，A-B 鍵以順時鐘方向旋轉與 C-D 鍵重合所需轉的角度。在上例中，我們建了一個  $C_{3v}$  對稱的  $CH_3Cl$  結構，因此第四、五個原子的二面角分別是 120 與 -120 度。

另外一種有用的分子內部座標定義方式是用一個鍵長及二個鍵角，以  $\text{NH}_3$  分子為例

```
N
H 1 R
H 1 R 2 A
H 1 R 2 A 3 A 1

R=0.95
A=100.0
```

第四行中最後的“1”代表最後一個 A 指的是 4-1-3 號原子的鍵角而非 4-1-2-3 號原子的二面角。有時候此種定義會更方便指定對稱性，在上例中，依此方法可以保證所指定的結構為  $C_{3v}$  對稱。

當結構中有三個原子成一直線時，加入所謂的 dummy atoms 通常比較容易定義分子內部座標，例如乙炔分子：

```
H
C 1 RCH
X 2 1.0 1 90.0
C 2 RCC 3 90.0 1 180.0
X 4 1.0 2 90.0 3 0.0
H 4 RCH 5 90.0 2 180.0
```

其中 X 就代表 dummy atom，這些原子只是方便我們建立分子結構，在實際計算中並不會出現。

關於 Gaussian 程式所接受的結構指定方式請參閱：

[http://www.gaussian.com/g\\_tech/g\\_ur/c\\_zmat.htm](http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/c_zmat.htm)

現在許多在 PC 或工作站上的化學應用程式都包含了利用圖形介面來建立分子結構的功能，簡單來說，就是使用滑鼠及已設計好的圖形及結構工具來快速的建立及檢視分子結構，對於建立較複雜的分子，這是最常用的方法，許多程式也包含了檢視各種計算結果的功能。使用較普遍的程式包括 Hyperchem, Spartan, Chem3D, GaussView 等。

胡維平

國立中正大學

化學暨生物化學系

© Copyright 2010