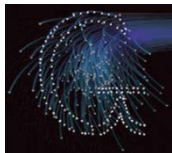


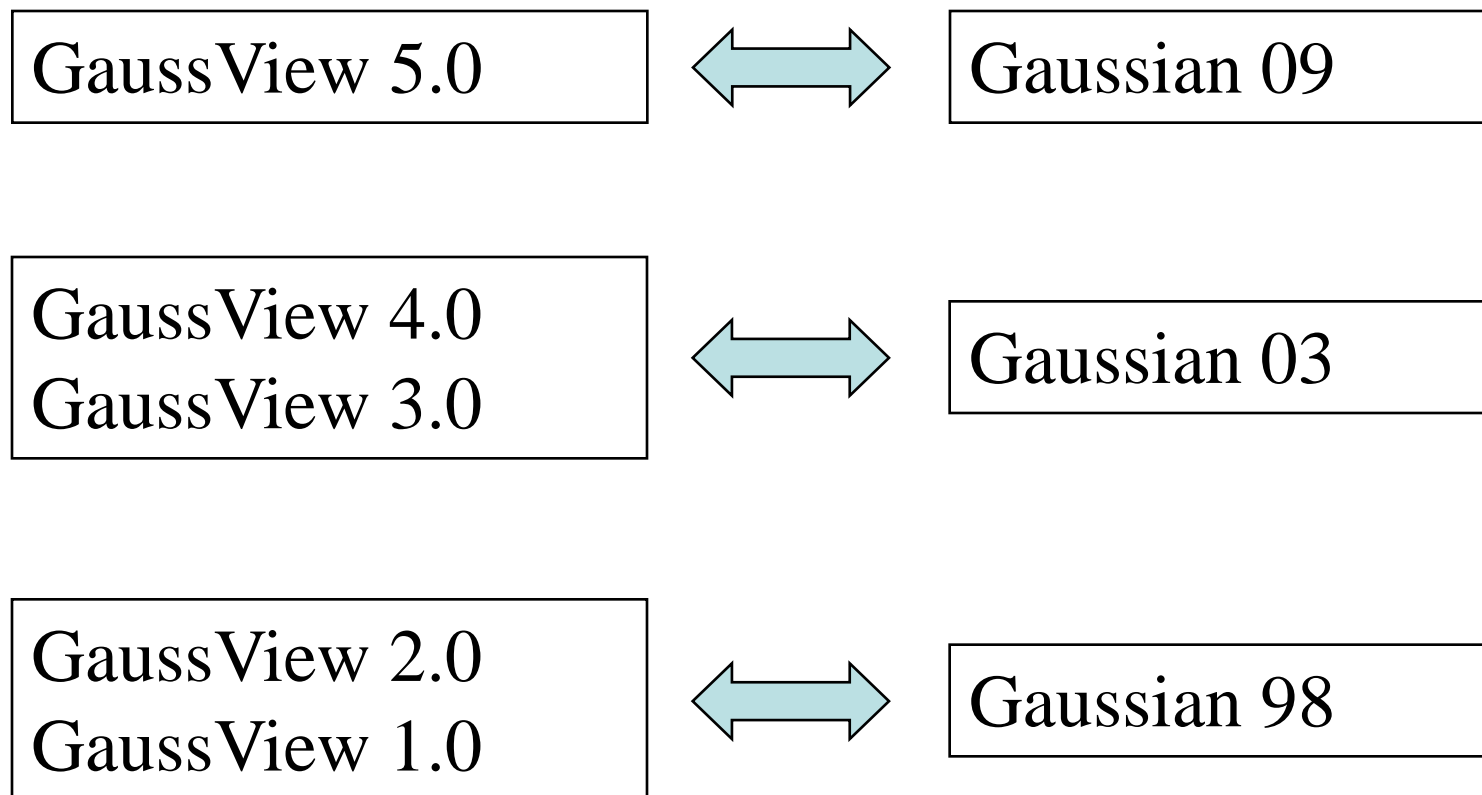
GaussView简介

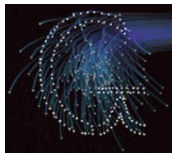




GaussView与Gaussian

➤ GaussView是Gaussian软件的图形用户界面；

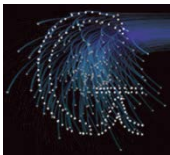




GaussView与Gaussian

- **GaussView 5.0完美的支持Gaussian09:**
1. 搭建或者导入分子结构，用以创建输入文件；
 2. 以图形化的方式自然直观的查看输出结果；
 3. 绘制各种图谱；
 4. 即时提交和监控计算（需要本机装有Gaussian软件）



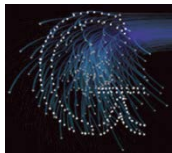


GaussView简介

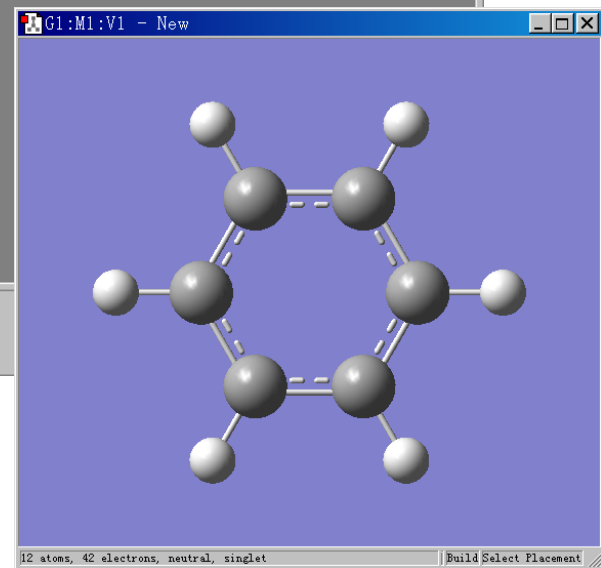
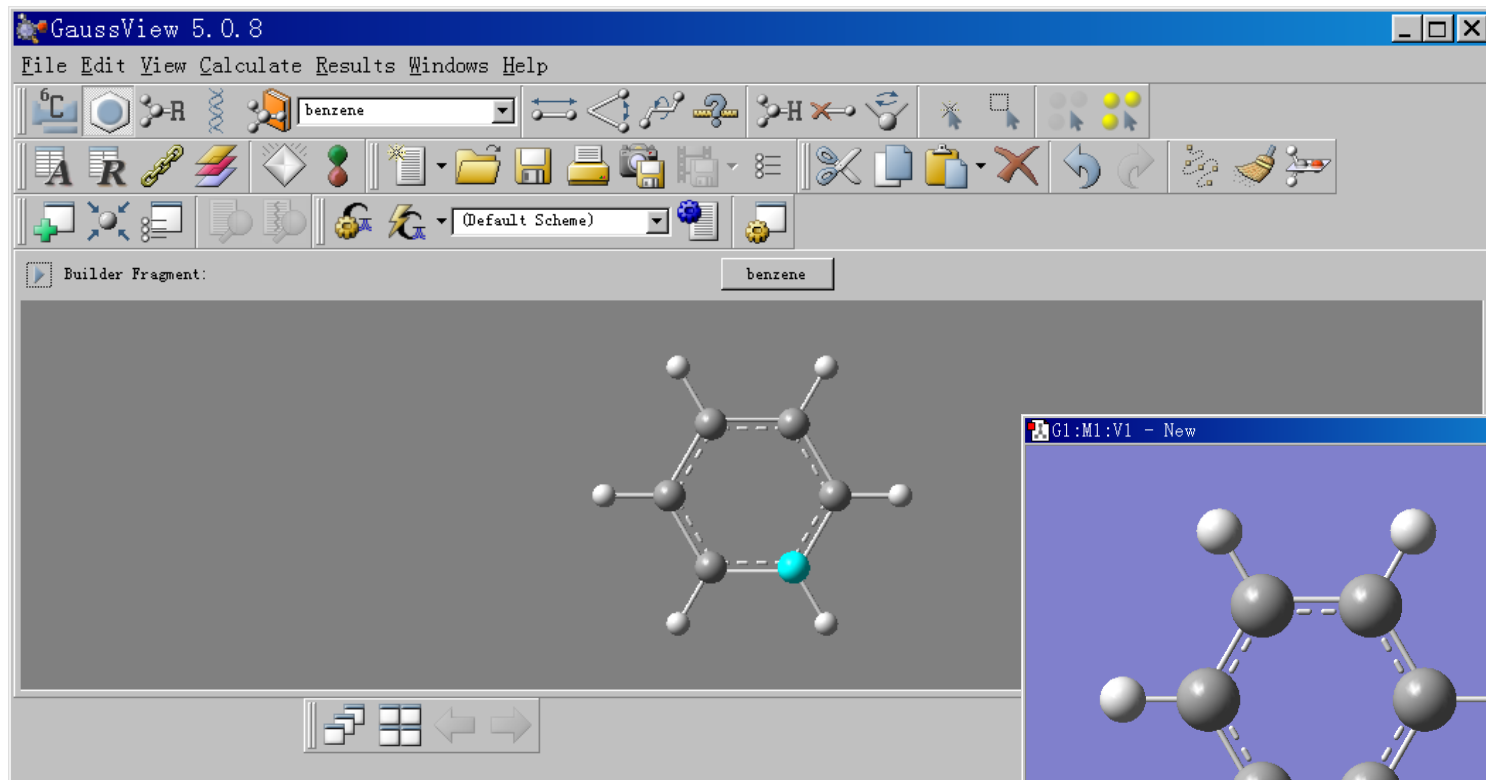
本章提纲:

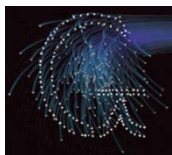
- **GaussView 的窗口组成**
- **GaussView 鼠标键盘操作**
- **构建工具面板【Builder】**
- **文件工具栏【File】**
- **坐标工具栏【Coordinates】**
- **视图工具栏【View】**
- **文件窗口工具栏【Windows】**
- **计算工具栏【Calculate】**
- **查看计算结果【Results】**





GaussView 的窗口组成





独立工具条视图

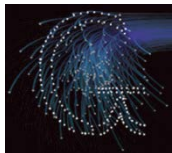
The screenshot displays the GaussView software interface with several toolbars and a floating window:

- Builder**: The top toolbar, containing icons for building molecules (e.g., ^6C , benzene ring, R group, DNA helix, book icon).
- Molecule**: A toolbar for molecular operations (e.g., scissors, copy, paste, delete, undo, redo, bond types).
- Calculate**: A toolbar for calculations, featuring a dropdown menu set to "(Default Scheme)".
- File**: A toolbar for file operations (e.g., new, open, save, print, export).
- Coordinates**: A toolbar for coordinate manipulation (e.g., A , R , bond types, planes, angles).
- View**: A toolbar for viewing the molecule (e.g., zoom in, zoom out, rotate, translate).
- Windows**: A toolbar for window management (e.g., maximize, minimize, close, previous, next).
- Builder (Floating Window)**: A separate window titled "Builder" containing a subset of the top toolbar's icons.

Labels and descriptions for the toolbars:

- 分子工具栏 (Molecule Toolbar)
- 计算工具栏 (Calculate Toolbar)
- 文件工具栏 (File Toolbar)
- 坐标工具栏 (Coordinates Toolbar)
- 视窗工具栏 (View Toolbar)
- 文件窗口工具栏 (Windows Toolbar)

构建工具面板 (Builder Panel)



GaussView 的窗口组成

1. 主控窗口

含有菜单条和当前选择的分子碎片。

2. 各类工具

默认时，位于主控窗口的菜单条下面。这些工具可以被分开，也可按要求重新排列在主控窗口内。

3. 各类对话窗口

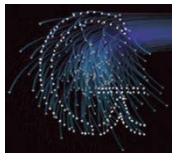
对应于 GaussView 的不同用途。

4. 一个或多个分子模型视窗

5. 控制程序功能的各类预置参数

点击 **【File】** → **【Preferences】**



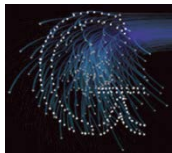


GaussView鼠标键盘操作

* 鼠标的操作

1. 在窗口内任意位置点击鼠标**左**键并按住，此时移动鼠标，窗口内所有分子跟随转动。
2. 在窗口内任意位置点击鼠标**右**键并按住
上下移动鼠标：分子会放大缩小
左右移动鼠标：分子沿垂直屏幕的轴转动。
3. 在窗口内任意位置点击鼠标**中**键（或者滚轮）并按住，此时移动鼠标，屏幕内的所有分子将跟随平移。
4. 使用**滚轮**前后滚动，当前窗口内分子放大缩小。

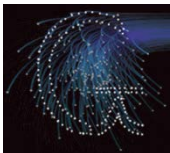




键盘与鼠标配合

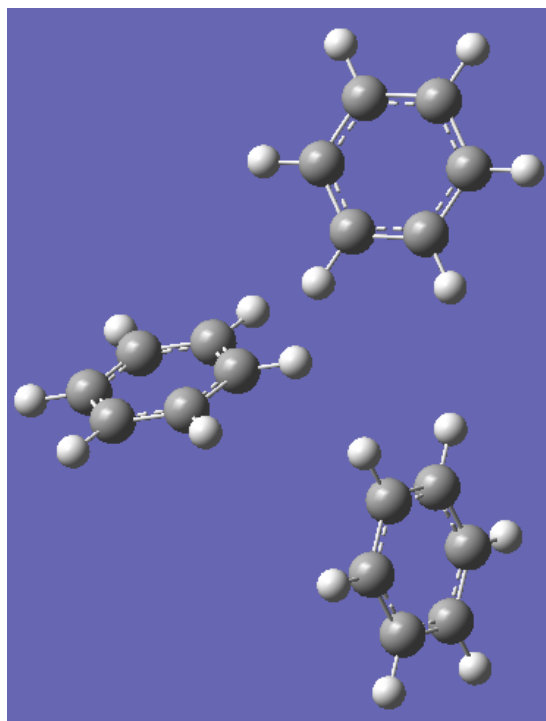
- 当窗口中有多个分子, 只想转动或者移动其中一个分子, **按住** 键盘 **【Alt】** 键
1. 用鼠标**左**键点击某个分子并按住, 此时移动鼠标, 只有被点击的分子会转动;
 2. 用鼠标**中**键 (或滚轮) 点击某个分子并按住, 移动鼠标, 只有被点击的分子会跟随鼠标移动
 3. 用鼠标**右**键分子点击某个分子并按住, 左右移动鼠标, 只有被点击的分子会沿一个垂直屏幕的轴转动;
 4. 如果鼠标没有中键/滚轮, 或者使用中失效的处理:
按住 【Alt】 + 【Shift】 键, 用鼠标**左**键点击你要转动的分子并按住, 只有被点击的分子会跟随鼠标移动



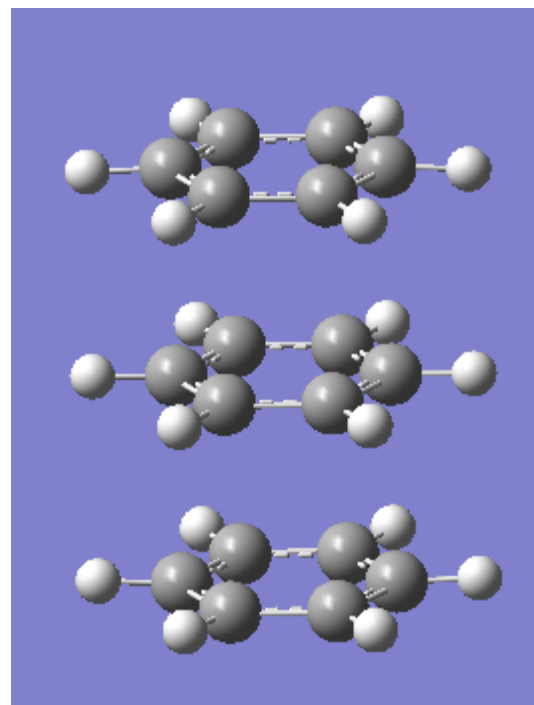


练习1

使用刚才讲述的键盘鼠标操作知识
将三个苯环摆到相互重叠的位置

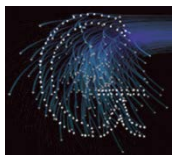


GV_exercise_1.gjf



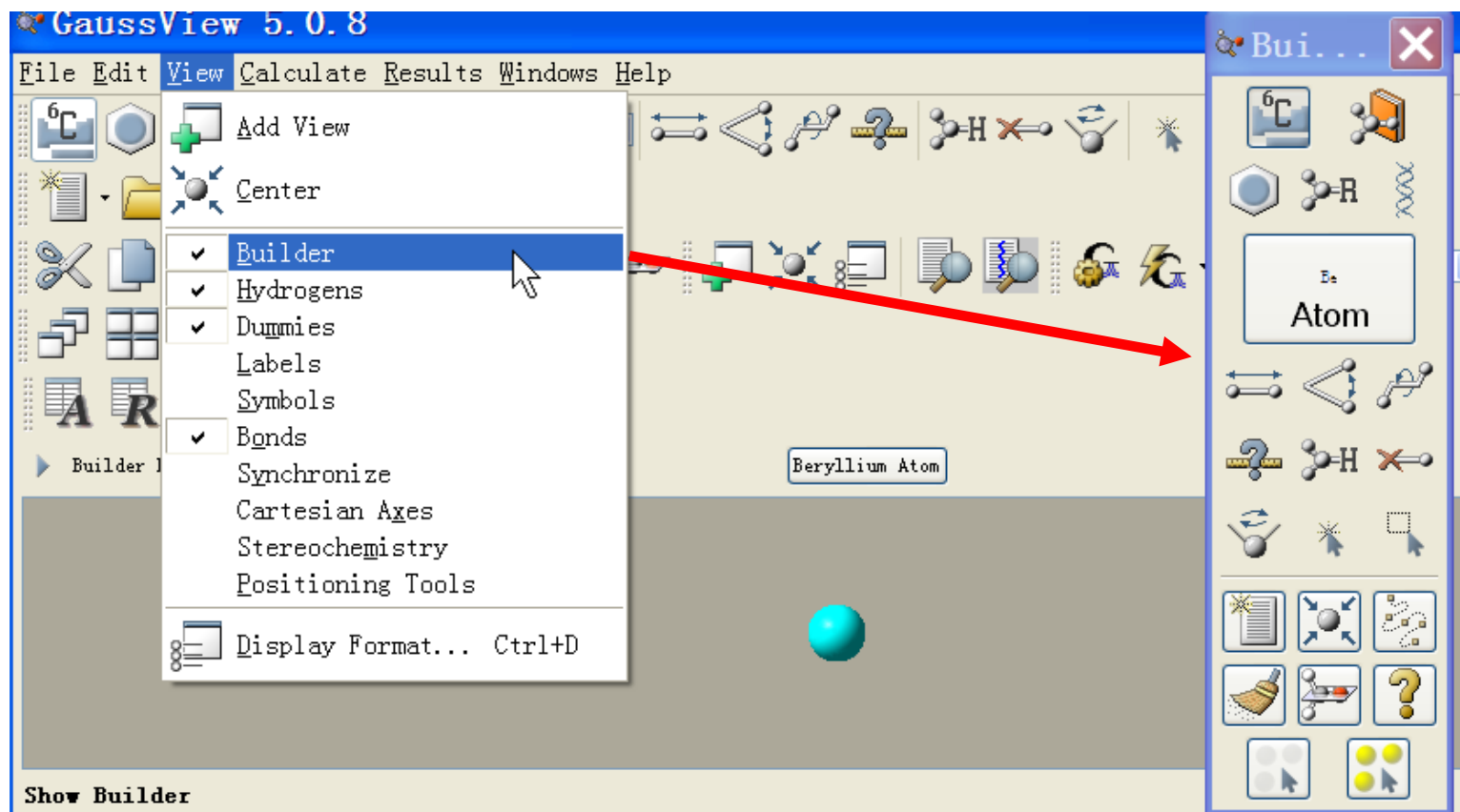
GV_exercise_1_OK.gjf

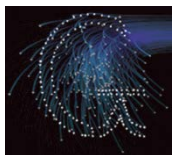




调出独立的Builder面板

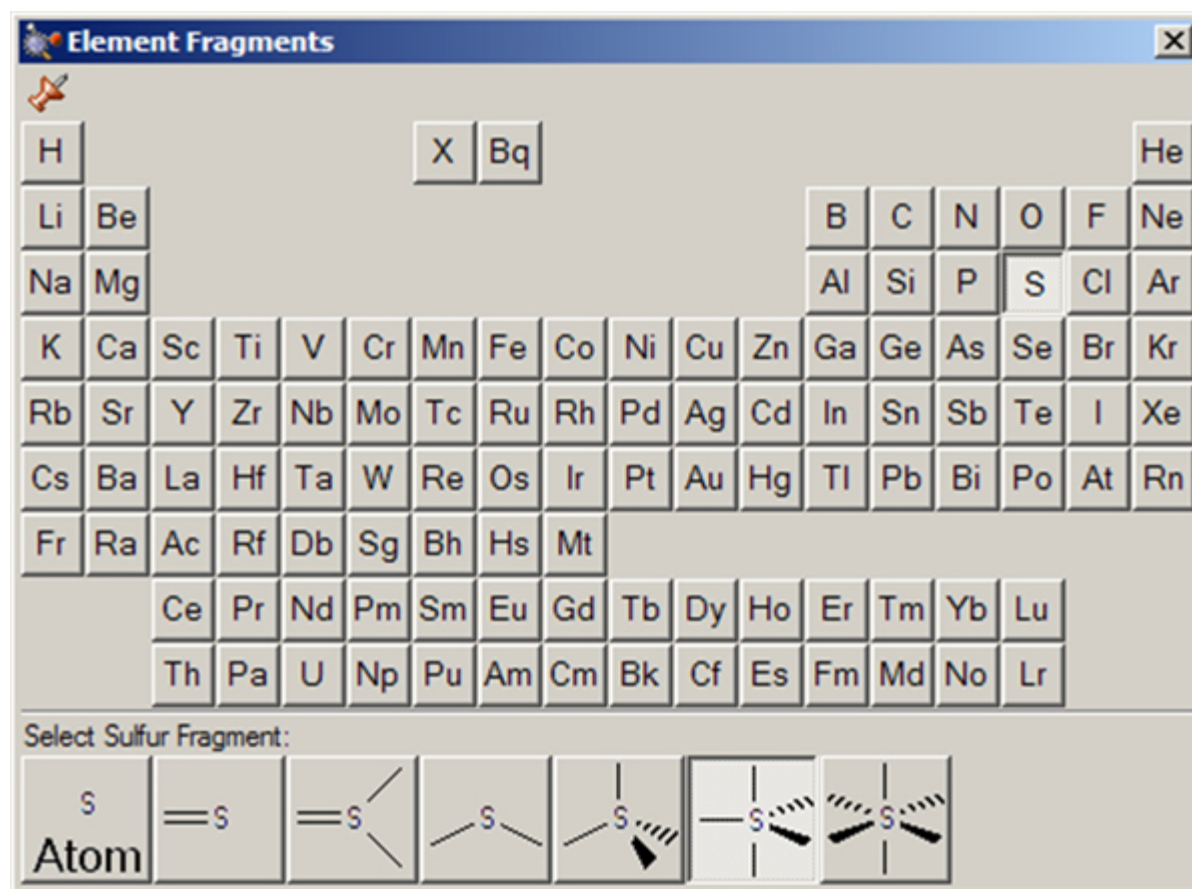
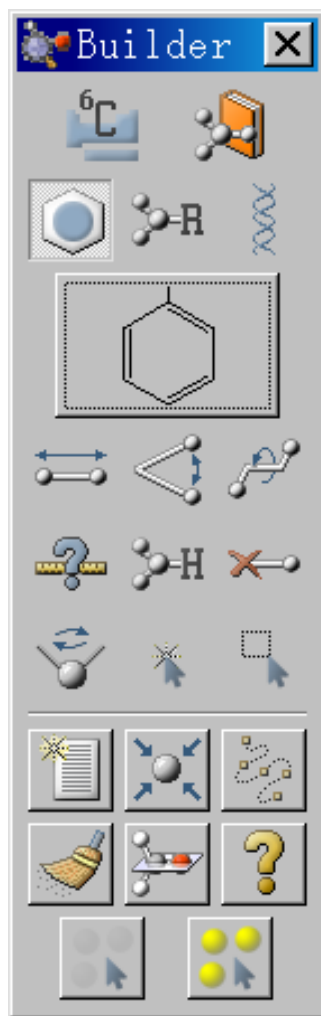
点击【View】菜单中的【Builder】即可调出独立的Builder面板，该面板是一个前置的面板，即始终显示在其它面板/窗口的上方，有利于全屏幕搭建分子时使用。

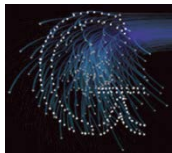




构建工具面板【Builder】

• 元素工具

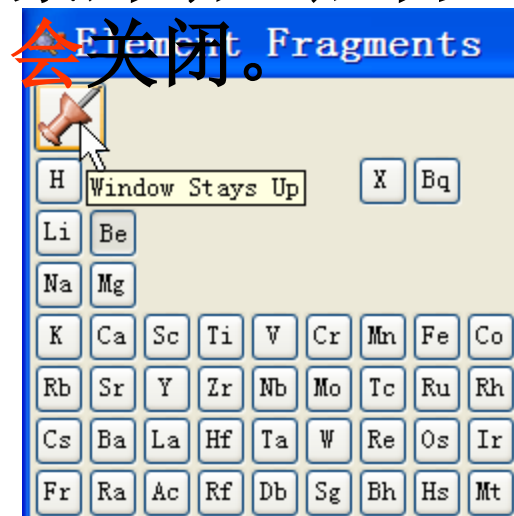




工具栏“图钉”

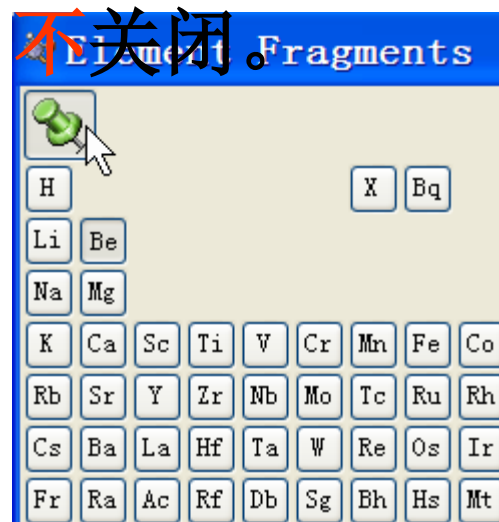
“图钉”未按
下

选择了需要的元
素片断之后窗口

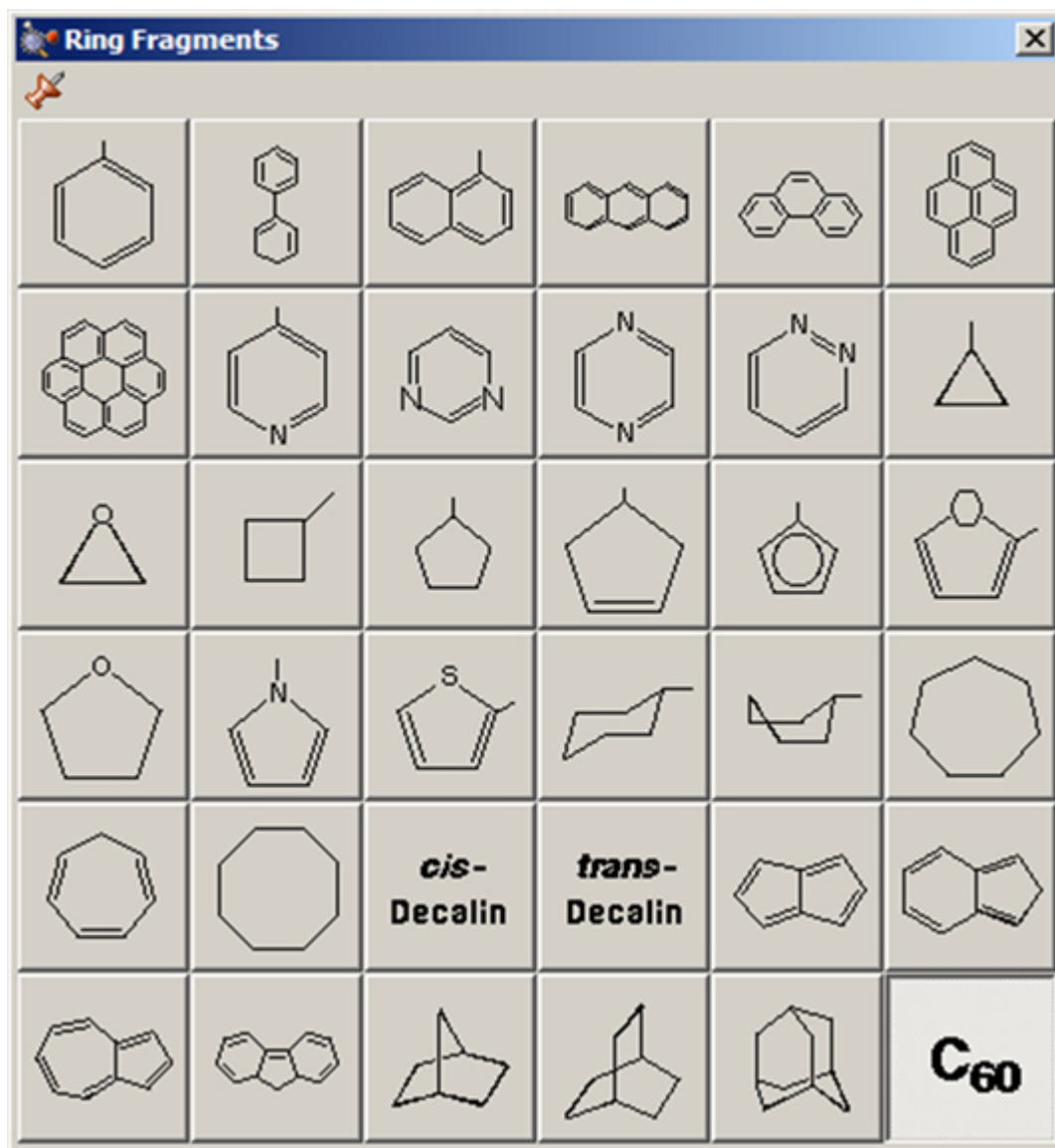
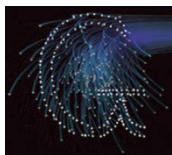


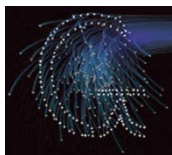
“图钉”已按
下

选择了需要的元
素片断之后窗口

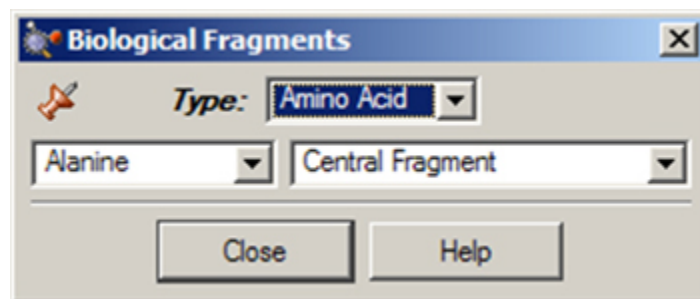
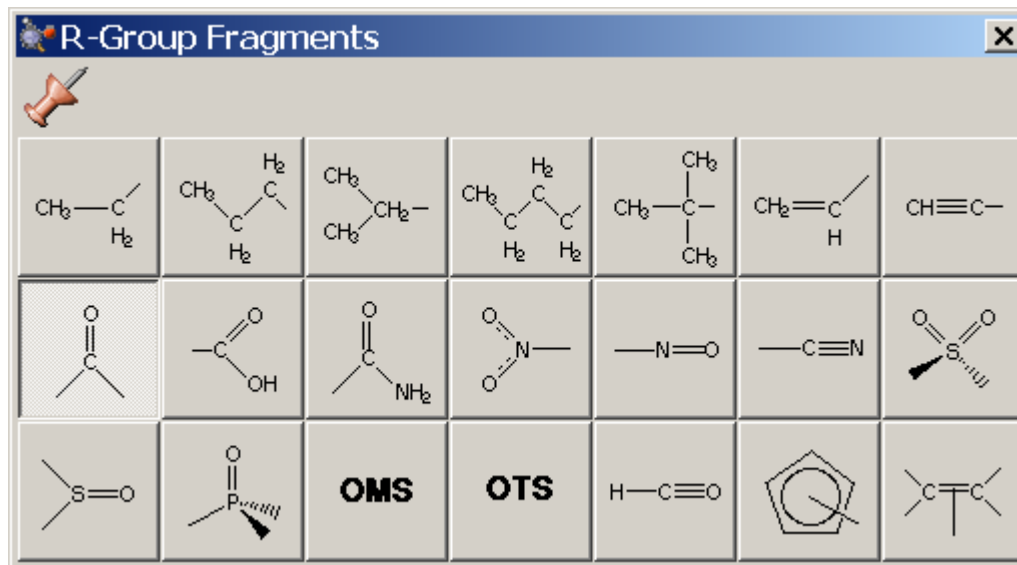


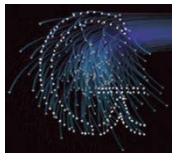
环工具



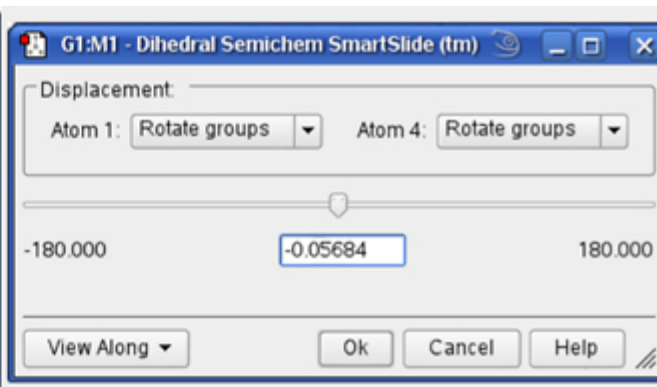
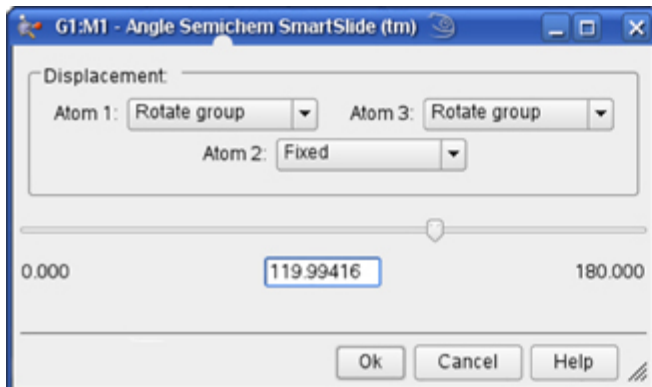
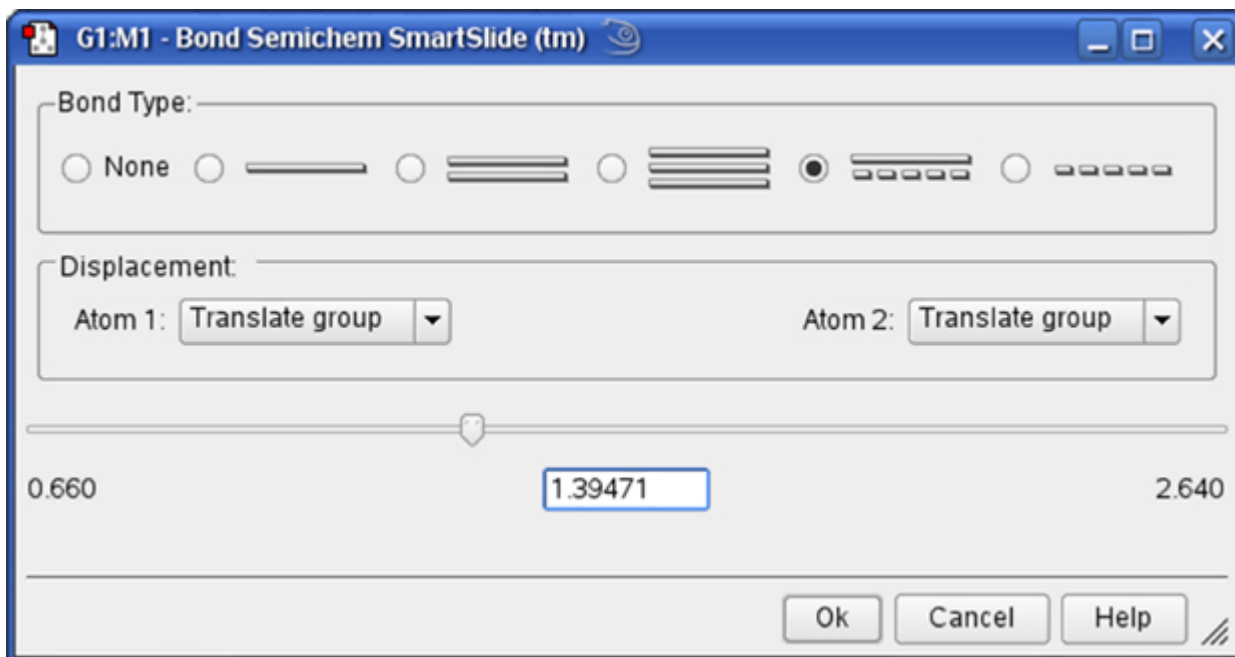


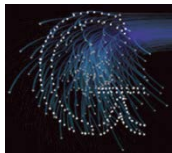
常见分子片断和生物分子残基





键长、键角、二面角





图形显示中的化学键

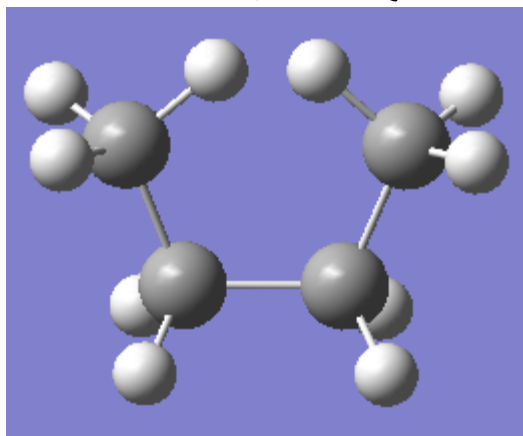
- 优化完了，用GaussView打开，发现键断了或者键级变了怎么办？
 1. 这是很正常的现象，图形界面中为了清晰显示，使用各种球棒模型来表示原子和化学键，用棒的多少表示键级，但真实的体系中只存在很小的原子核和它们周围相互重叠的电子云。
 2. GaussView的显示也只是经验性的，不能因为GaussView显示了化学键就认为原子间成键，没有显示就认为没有成键。
 3. 建模时，你可以给离得很远的两个原子之间定义化学键，使它们一起移动，也可以移除离得很近的的两个原子之间定义的化学键来调整原子之间的相对位置。



练习2

- 通过转动二面角将全重叠式丁烷转成全交叉式

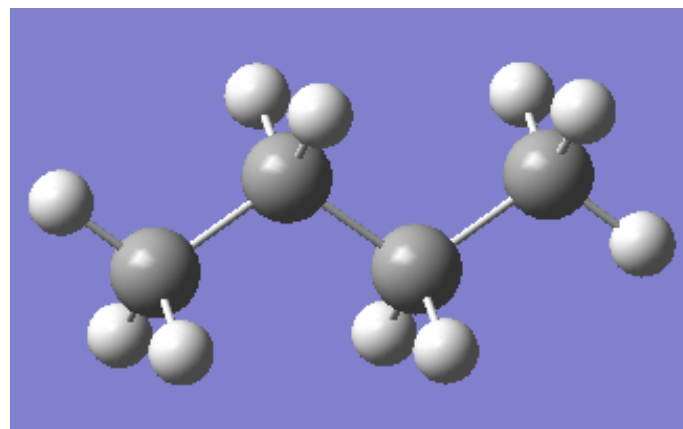
全重叠式



GV_exercise_2.gjf

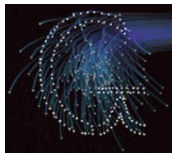


全交叉式



GV_exercise_2_OK.gjf





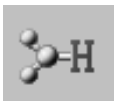
Builder面板一些图标的意义



查询



重新键和



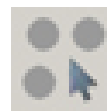
添加一个键合原子
(默认添加H)



删除一个原子



选择所有的原子



不选择任何原子

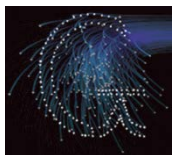


选择单个原子



选择多个原子

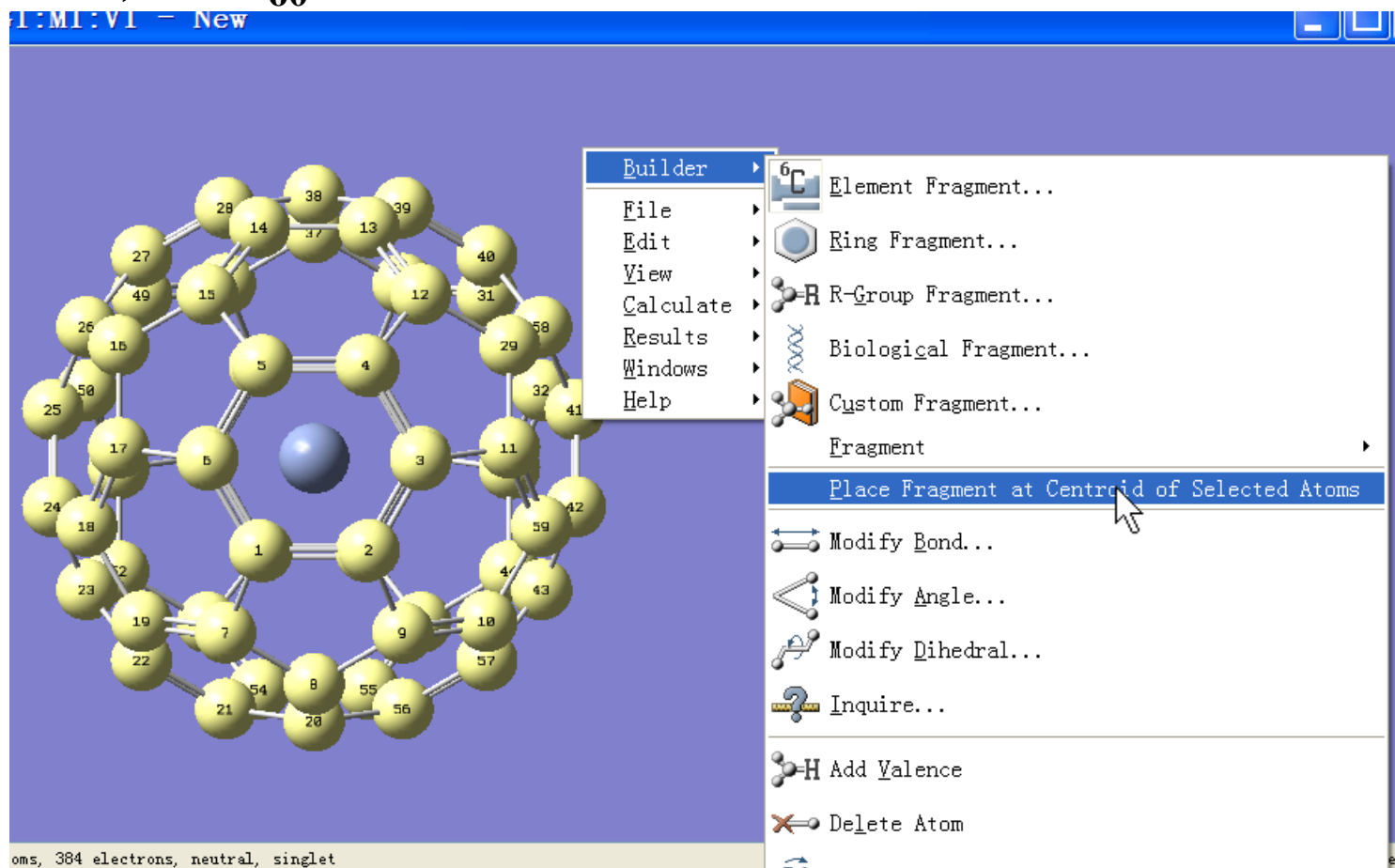


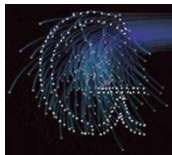


在质心添加一个原子/碎片

GaussView 5.0新增功能

例如, 在 C_{60} 中所有原子的质心放置一个原子



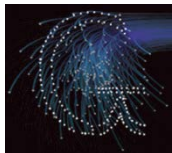


GaussView的三个层次视图

分子集合-----分子模型-----模型视图

1. 分子集合（Molecular **G**roup）
2. 分子模型（**M**olecule）
3. 模型视图（**V**iew）

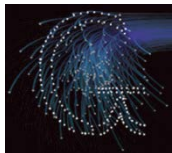




分子集合(Molecule Group)

1. 分子集合中可以包括一个或多个分子。
2. 对于包括一个以上分子的分子集合，有两种显示模式:单分子视图模式和多分子视图模式。
3. 单分子视图模式每次只显示单个分子，当前显示的分子编号显示在工具栏上，并可在单分子视图模式和多分子视图模式间切换。
4. 如果有多个窗口打开同一分子，可能涉及不同的观察视图。因此，可以按不同视图观察、显示同一分子的不同取向和不同性质。

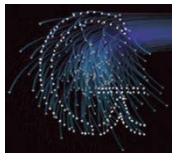




标题栏的识别信息

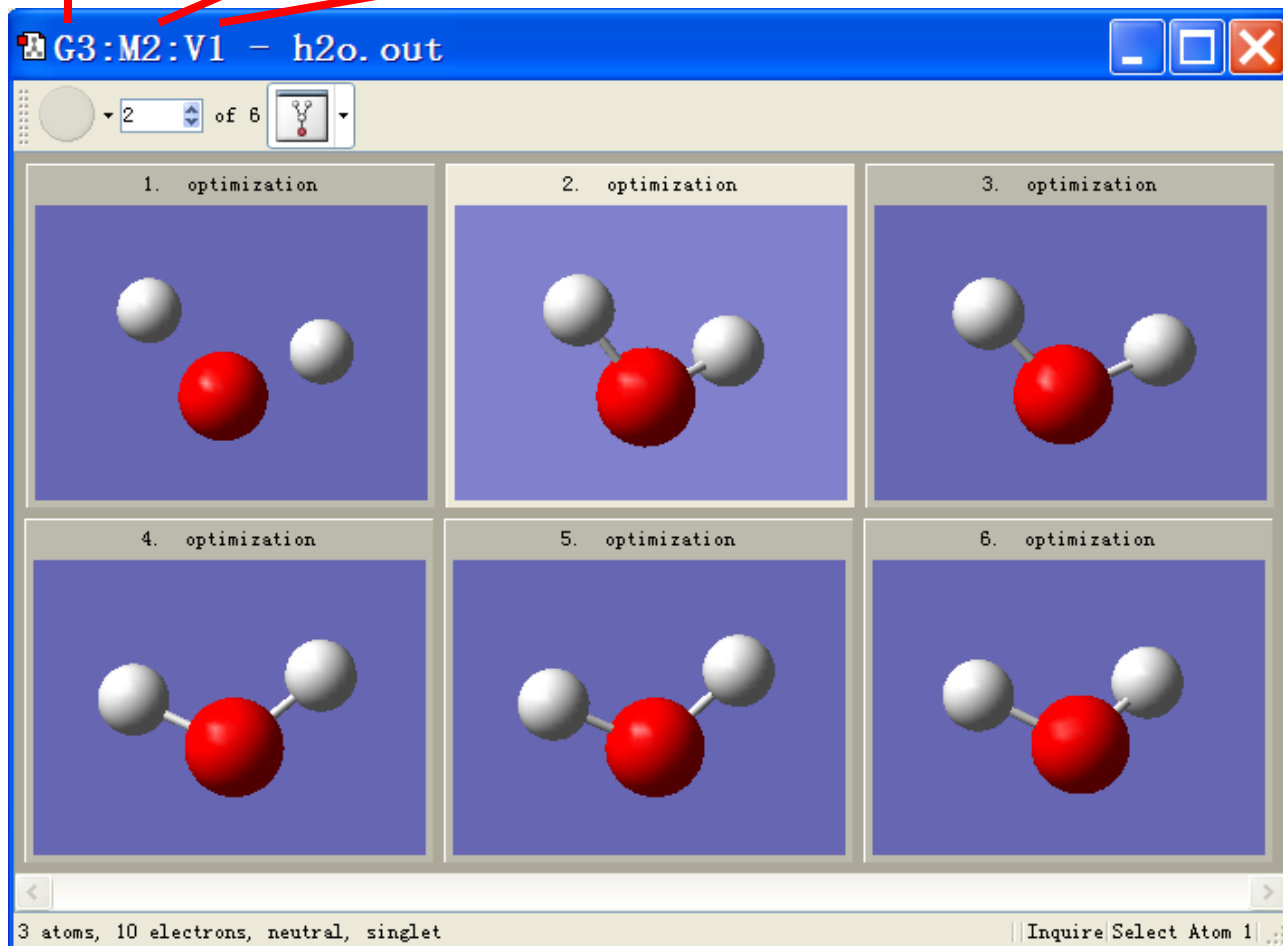
- 每个视图上的标题栏也显示当前分子集合、分子模型及模型视图的信息
- 1. 每一个分子集合用不同颜色加以区别，与某分子集合相关的其他视图都将采用与分子集合相同的图标颜色，即用颜色识别分子集合。
- 2. 除了颜色标识外，每个视图都通“**Group/Molecule/View**”标识符进行唯一识别。该标识符由分子集合(G)、分子编号(M)和视图编号(V)组成。
- 3. 分子集合中的每个分子从1开始连续编号，如果某个分子被从分子集合中删除，分子将重新编号以保持其连续性。



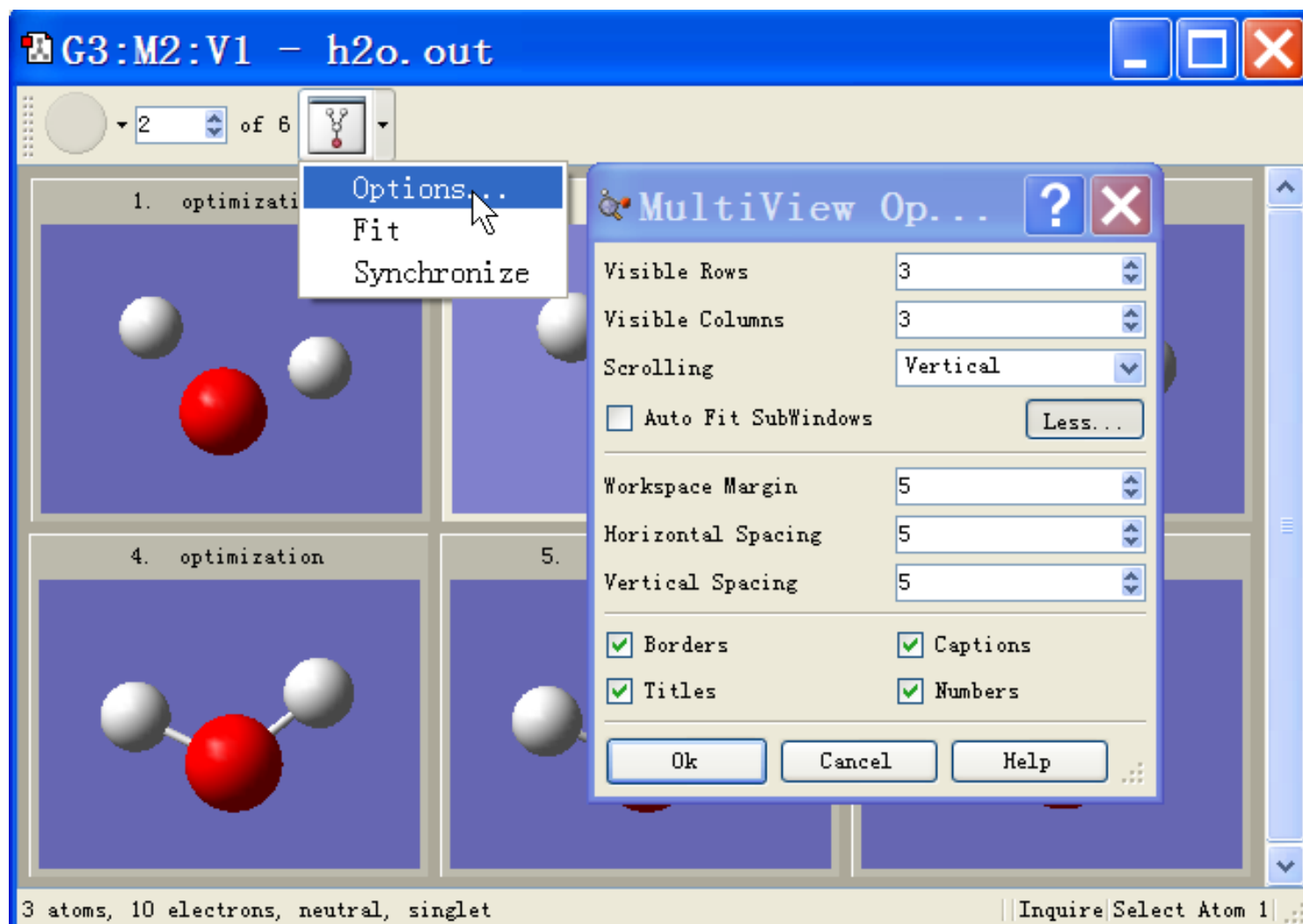


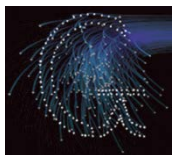
标题栏识别

Group 3 Molecule 2 View 1



视图显示设置



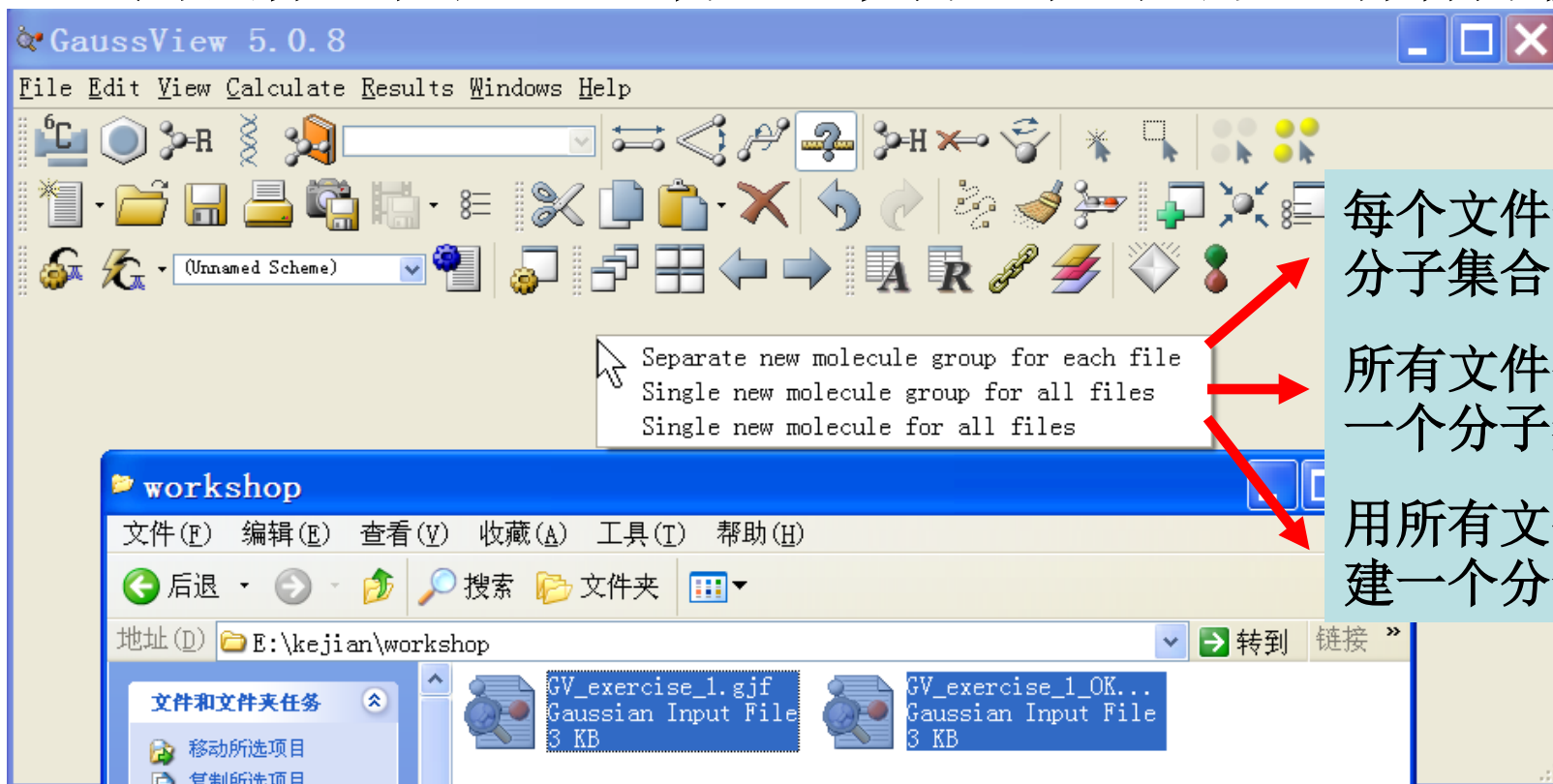


文件工具栏【File】

1. 从浏览器中拖入GV窗口

可以次选择多个文件用鼠标**左**键直接拖入GV窗口中，此时默认是为每个文件创建一个分子集合窗口；

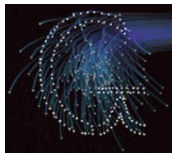
用鼠标右键拖入GV窗口，松开右键时可以选择打开模式



每个文件一个
分子集合

所有文件做成
一个分子集合

用所有文件创
建一个分子



File菜单：文件打开保存

【New】

新建分子模型，有两种创建形式：

- (1) 创建新的分子集合；
- (2) 在当前分子集合中添加新的分子。

【Open】

打开已有模型和其他输出文件

【Recent Files】

快速打开最近打开过的文件；

【Related Files】

快速打开与当前活动分子相关的文件

【Refresh】

从原始文件重新加载当前分子。

【View File】

打开计算结果文件

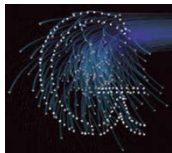
【Results】

打开当前模型分子的结果文件。

【Save】

保存分子，将当前分子保存成输入文件。





File菜单：其它功能

【Print】

命令或点击打印按钮进行打印。

【Save Image File】

将当前视图窗口中的影像保存到一个外部影像文件中。

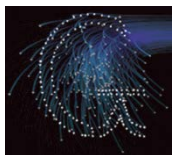
【Save Movie】

用于保存当前分子集合中的不同帧作为一个电影文件。

【Preferences】

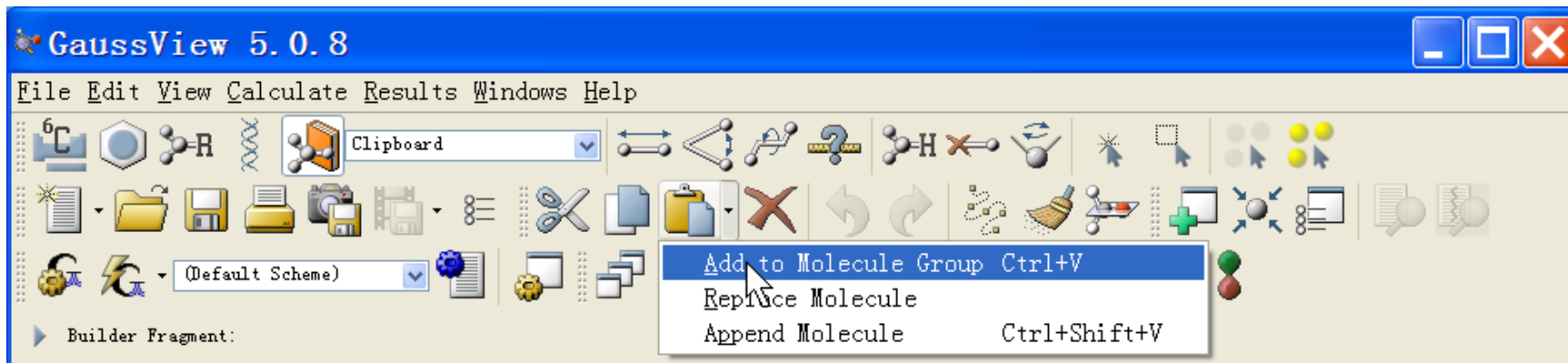
指定GaussView的各项默认设置。





剪切、复制、粘贴、删除

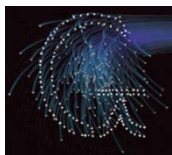
■ 粘贴有三种方式：



1. 添加到同一个分子集合中的新的分子
2. 替换当前视图中的分子（不可恢复，慎重使用！）
3. 附加到当前视图中

■ 删除执行后不可恢复，慎重使用！





坐标工具栏【Coordinates】

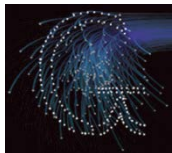
■ 原子列表编辑器【Edit】→【Atom List】

G1:M1:V1 - Atom List Editor

File Edit View Rows Columns Go To 9

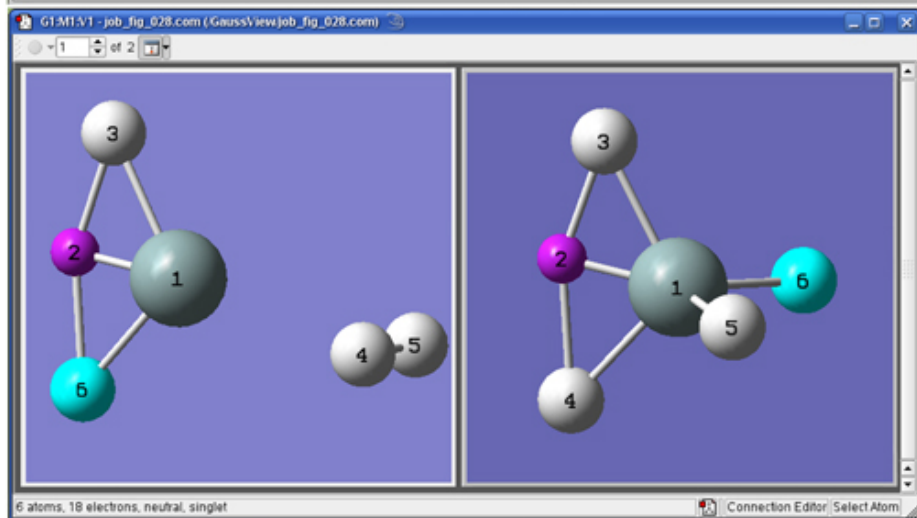
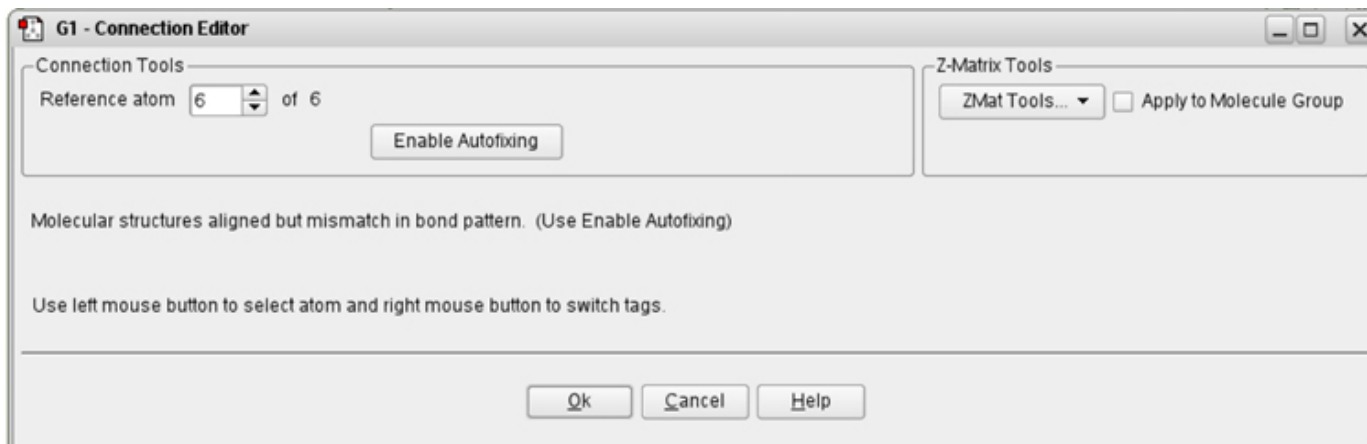
Row	Highlight*	Display	Tag	Symbol	NA	NB	NC	Bond	Angle	Dihedral	X	Y	Z
1	<input type="radio"/>	Show	1	N							-0.1189705	-1.9355552	-3.7300177
2	<input type="radio"/>	Show	2	H	1			1.0100000			0.8910295	-1.9355552	-3.7300177
3	<input type="radio"/>	Show	3	H	1	2		1.0100000	108.7472526		-0.4435785	-0.9791402	-3.7300177
4	<input type="radio"/>	Show	4	H	1	2	3	1.0100005	108.7472427	132.2826996	-0.4435785	-2.5790212	-4.4376067
5	<input type="radio"/>	Show	5	C	1	2	3	1.4490002	108.0999907	-113.8586666	-0.5691405	-2.4926472	-2.4704157
6	<input type="radio"/>	Show	6	H	5	1	2	1.0900002	109.4999531	119.9999991	-1.1704975	-1.7541922	-1.9401757
7	<input type="radio"/>	Show	7	C	5	1	2	1.5249999	111.0999857	-120.0000110	-1.4158755	-3.7411732	-2.6936807
8	<input type="radio"/>	Show	8	C	5	1	7	1.5219993	111.1000055	120.0000378	0.6103245	-2.8817372	-1.5906697
9	<input type="radio"/>	Show	9	H	7	5	1	1.0900001	109.4999641	-180.0000000	-1.7399165	-4.1378852	-1.7315387

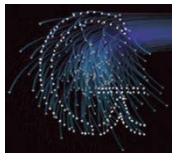
Active Sublist Filters: None



连接关系编辑器

【Edit】→【Connection】





冗余坐标编辑器

【Edit】→【Redundant Coordinates】

G1:M1 - Redundant Coordinate Editor

Status	Coordinate
	Activate Angle (20, 12, 3)
	Bond (21, 20); Set Hessian to 0.05 au
<input checked="" type="radio"/>	Add Bond (9, 20)
<input type="radio"/>	Add

Bond: Coordinate: 9 20

Add:

Current value: 1.90546 angstroms.

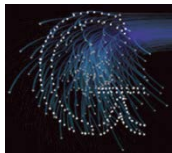
Don't Set: bond length to: 0 angstroms.

☐ Apply if greater than: 0 angstroms.

☐ Apply if less than: 0 angstroms.

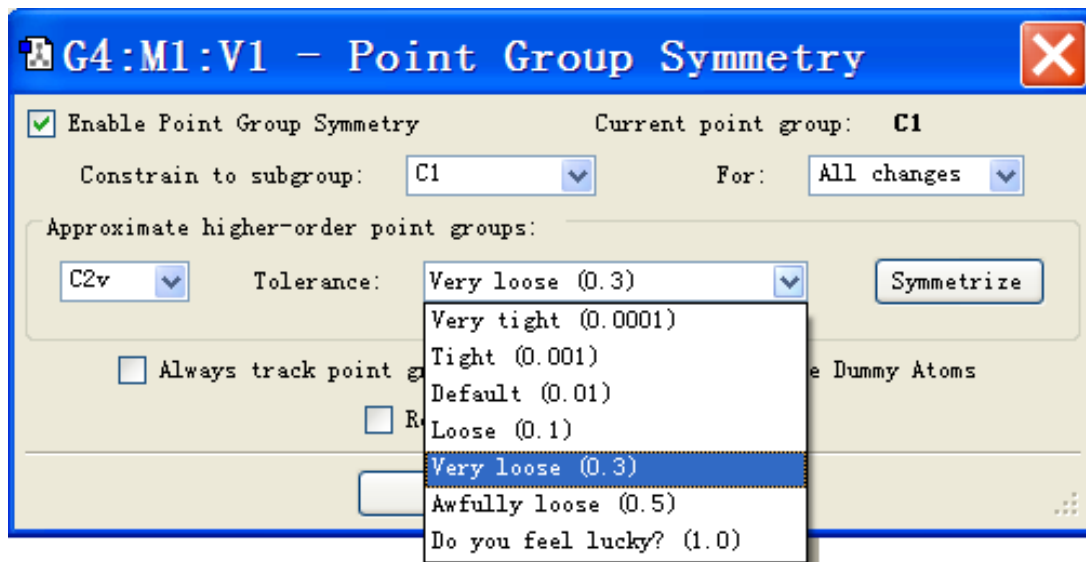
Status: Valid

Ok Cancel Help



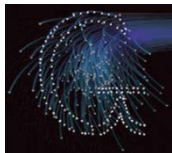
点群对称性

【Edit】→【Point group】



- 有对称性的分子，在计算中使用对称性能极大的提升计算速度。

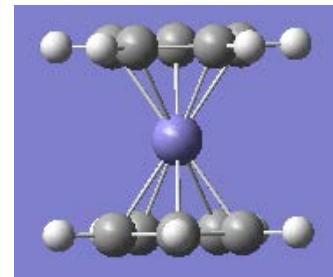
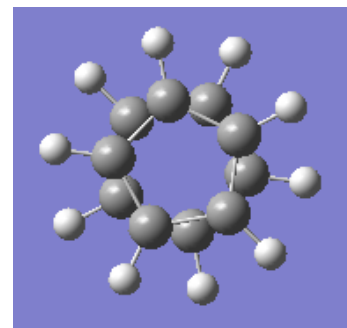
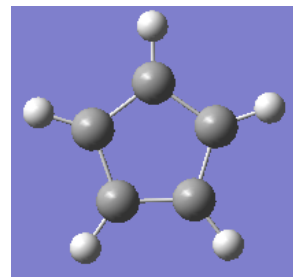




练习3

- 从头构建二茂铁分子，并将分子对称化到 D_{5d} 。推荐步骤如下：

 1. 搭建茂环 (D_{5h} C_5H_5)
 2. 将搭建好的茂环append一份到窗口中，然后将两个茂环放置为堆积状态，调整环间距离约3.3埃
 3. 旋转其中一个环，使两个茂环处于交叉构象，并使用点群对称化。
 4. 用在质心加入原子的方法加入铁原子并对称化。
 5. 调整键长到标准距离并定义联接关系。



目标键长

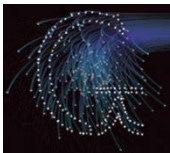
$$R_{C-C}=1.44$$

$$R_{C-H}=1.07$$

$$R_{C-Fe}=2.10$$

GV_Exercise_3_OK.gjf



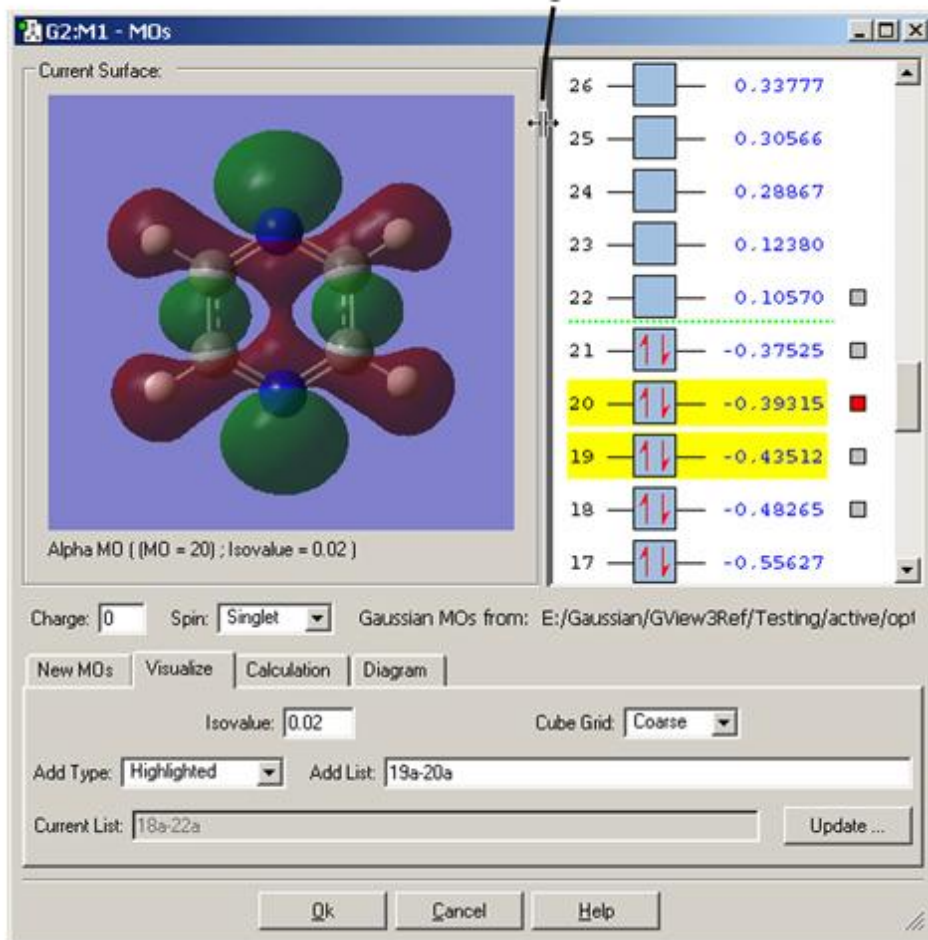


分子轨道编辑器

【Edit】→【MOs】

调整窗口大小

显示当前选定
分子轨道表面



电子占据状
态及MO能量

灰色表示可用

红色表示当前显示

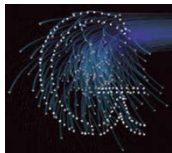
黄色表示已
选择的轨道

状态信息

电荷与自
旋多重度
调整分子轨道
表面选项面板

要查看分子
轨道图形需
要打开chk或
者fchk文件





一些注意事项

- 连接编辑器

使用鼠标也可对原子进行重排，其操作以参考原子为基础进行：

- ①左键点击。指定点击原子为参考原子。
- ②右键点击。点击原子与参考原子交换原子标签，该原子成为新的参考原子。

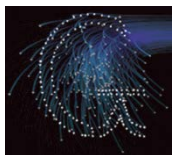
- 冗余坐标编辑器

用于创建和编辑冗余坐标,冗余坐标常用于Gaussian 优化或势能面扫描中。

- 分子轨道编辑器

注意需从检查点文件中读入文件。





计算工具栏【Calculate】

◆创建 Gaussian 作业

【Calculate】→【Gaussian Calculation Setup】

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title:

Keywords: `#p opt=(calcfc,tight) freq=(roa) cphf=rdfreq hf/6-31g`

ChargeMult.: 0 1

Job Type: **Opt+Freq**

Optimize to a: **Minimum** ☐ Use RFO step ☐ Use Quadratic Macrostep

Calculate Force Constants: **Once** ☒ Use tight convergence criteria

Compute Raman: **Yes** ☐ Compute VCD ☐ Save Normal Modes

Compute ROA: **Yes** Read Incident Light Freqs: **Yes** ☐ Skip diag. of full matrix

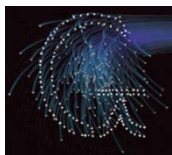
☐ Select Normal Modes Modes: Atoms: Thresh: 0.5

☐ Anharmonic Corrections ☐ Specify Anharmonic Modes: 1

Additional Keywords: **Update**

Scheme: (Unnamed Scheme)

Submit... **Quick Launch** **Cancel** **Edit...** **Retain** **Defaults** **Help**



【Job Type】选项卡

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title:

Keywords: # irc=(forward,recalc=5,calcfc,phase=(1,5)) hf/6-31g geom=connectivity

Charge/Mult.: 0 1

Job Type | Method | Title | Link 0 | General | Guess | NBO | PBC | Solvation | Add. Inp.

IRC

Follow IRC: Forward only Do IRCMax calculation

Force Constants: Calculate Once Compute more points, N= 10

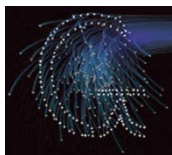
☒ Recalculate Force Constants Every nth Point, n= 5

Recorrect Steps: Default

Additional Keywords: IRC(Phase=(1,5)) Update

Scheme: (Unnamed Scheme)

Submit... Quick Launch Cancel Edit... Retain Defaults Help



【Method】选项卡

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title:

Keywords: # b3lyp/6-31+g(d,p)

Charge/Mult.: 0 1

Job Type Method Title Link 0 General Guess NBO PBC Solvation Add. Inp.

Method: Ground State DFT... Default Spin B3LYP

Basis Set: 6-31G + (d , p)

Charge: 0 Spin: Singlet

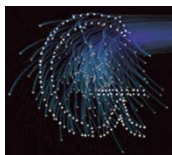
☐ Multilayer ONIOMModel

☐ Use sparse matrices

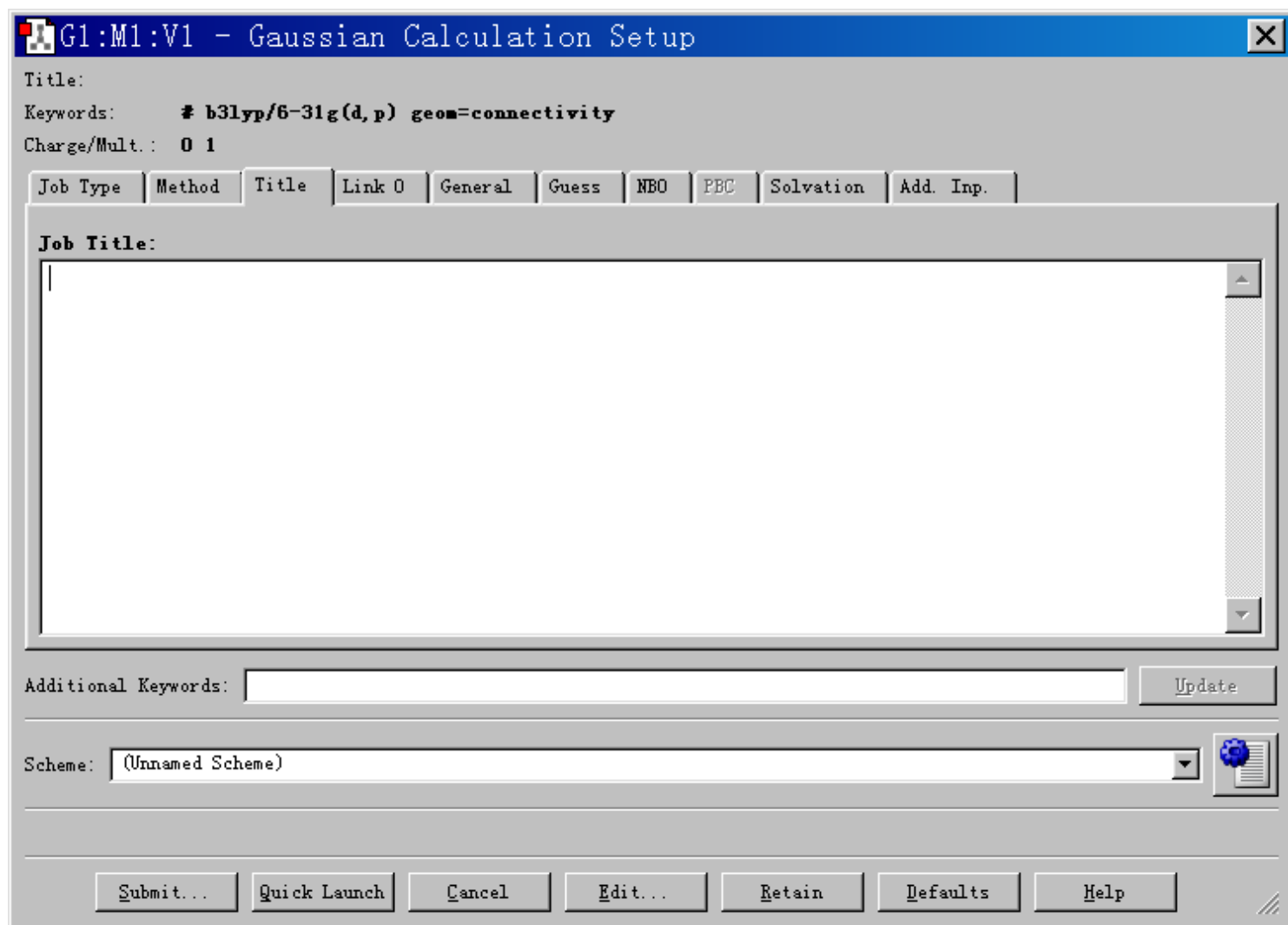
Additional Keywords: Update

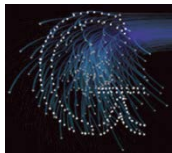
Scheme: (Unnamed Scheme)

Submit... Quick Launch Cancel Edit... Retain Defaults Help



【Title】选项卡





【Link 0】选项卡

Link 0

Options Edit

Memory Limit: Default

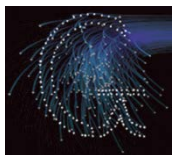
Checkpoint File: Default name (parent file name).chk ... ☒ Full Path

Read-write File: Don't save ...

Linda Workers: Don't use

Shared Processors: Default



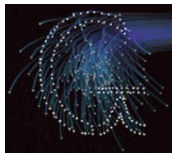


【General】 和 【Guess】

Job Type	Method	Title	Link 0	General	Guess	NBO	PBC	Solvation	Add. Inp.
<div><input type="checkbox"/> Use Quadratically Convergent SCF</div> <div><input checked="" type="checkbox"/> Use Modified Redundant Coordinates</div> <div><input type="checkbox"/> Ignore Symmetry</div> <div><input type="checkbox"/> Use Counterpoise</div> <div><input checked="" type="checkbox"/> Write Gaussian Fragment Data</div> <div><input type="checkbox"/> Use MaxDisk= <input type="text" value="2"/> <input type="text" value="GB"/></div> <div><input type="checkbox"/> Additional Print</div> <div><input checked="" type="checkbox"/> Write Connectivity</div> <div><input type="checkbox"/> Compute polarizabilities</div> <div><input checked="" type="checkbox"/> Write PDB Data</div>									

Job Type	Method	Title	Link 0	General	Guess	NBO	PBC	Solvation	Add. Inp.
<div>Guess Method: <input type="text" value="Default"/></div> <div>Options:<div><div><input type="checkbox"/> Mix HOMO and LUMO orbitals</div><div><input type="checkbox"/> Only do guess (no SCF)</div><div><input type="checkbox"/> Save orbitals to checkpoint file</div><div><input type="checkbox"/> Use fragments (atom groups) for generating guess</div><div><input type="checkbox"/> Always generate guess in optimizations</div><div><input type="checkbox"/> Localize orbitals</div><div><input type="checkbox"/> Permuted orbitals from MOs Dialog</div></div></div>									





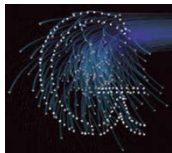
NBO、Solvation和PBC

7. 【NBO】面板

8. 【Solvation】面板

9. 【PBC】面板

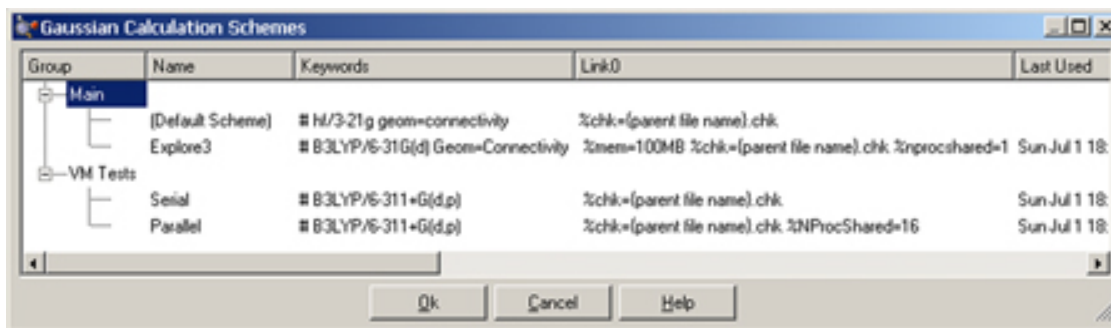


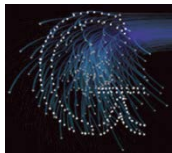


为计算设置默认值

【File】→【Preferences】→【Gaussian Setup】

1. 在 Gaussian Calculation Setup 对话框的底部可以看到已有的计算方案。
2. 点击【Calculate】→【Gaussian Calculation Scheme】，可弹出 Gaussian Calculation Schemes 窗口，从中选择要使用的计算方案，并应用到当前分子中。
3. 对于新分子，初始将采用 Default 方案。但可以在如下对话框中查看或修改各种已有方案的属性。

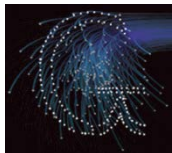




底部按钮说明

- | | |
|----------------|---|
| 【Submit】 | 使用当前输入文件运行 Gaussian 计算。 |
| 【Quick Launch】 | 直接运行 Gaussian 作业。 |
| 【Cancel】 | 关闭对话框返回所有选项为默认值。 |
| 【Edit】 | 使用外部文本编辑器直接编辑输入文件，未保存之前，是不可直接编辑的。 |
| 【Retain】 | 关闭对话框，但输入文件不会被创建或更新，也不会提交 Gaussian 作业。 |
| 【Defaults】 | 恢复所有的选项为默认值。 |
| 【Help】 | 提供对话框的在线帮助。 |






快速运行作业

1. 传统方法

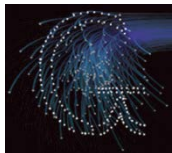
点【**Calculate**】→【**Gaussian Calculation Setup**】，然后在其中修改其作业选项，完成后点击【**Submit**】按钮，并为要保存的输入文件指定文件名和文件位置。

2. 快速运行作业

点击【**Calculate**】→【**Gaussian Quick Launch**】，或在工具栏的图标  (Quick Launch)上点击右边的下拉菜单，引出含有【**Temp File**】(从临时输入文件提交计算作业)、【**Save File**】(保存输入文件后提交计算作业)以及【**Save and Edit File**】(保存并编辑后提交计算作业)三项的子菜单。

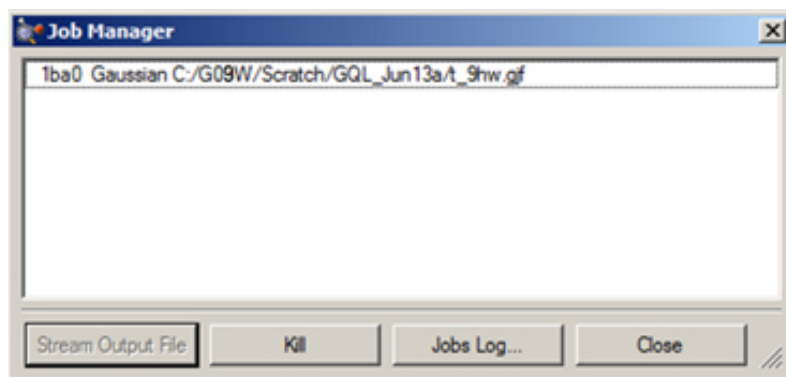
3. 本机需要安装有Gaussian09软件





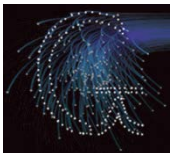
观察和控制计算

【Calculate】→【Current Jobs】



1. 该窗口显示了当前正在运行的由 **GaussView** 启动的所有计算作业(只有本次 **GaussView** 启动以后的作业才会显示)。
2. 这里显示的作业包括由 **Gaussian** 对话框提交的 **Gaussian** 作业、**GaussView** 提交的输入文件编辑的 **Gaussian** 作业以及为创建和显示表面而运行的 **Cubegen** 这类 **GaussianUtilities** 作业。





查看 Gaussian 结果

■ 显示结果数据摘要

1. **【Results】 → 【Summary】**
2. 点击 **【Results】 → 【View File】**，或在上述对话框中点击 **【View File】** 按钮，可打开该计算作业的日志文件(*.log)

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Summary

Gaussian Test Job 626 (Part 6): propargyl radical CH2CCH
ub3lyp/6-31G*/ub3lyp/6-31G*

File Name	test626
File Type	.log
Calculation Type	FREQ
Calculation Method	UB3LYP
Basis Set	6-31G(d)
Charge	0
Spin	Doublet
E[UB+HF-LYP]	-116.00128130 a.u.
RMS Gradient Norm	0.00008033 a.u.
Imaginary Freq	0
Dipole Moment	0.0193 Debye
Point Group	C2V

Job cpu time: 0 days 0 hours 12 minutes 25.6 seconds.

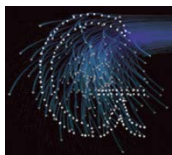
Ok View File Save Data

G4:M1:V1 - Gaussian Calculation ...

Title Card Required

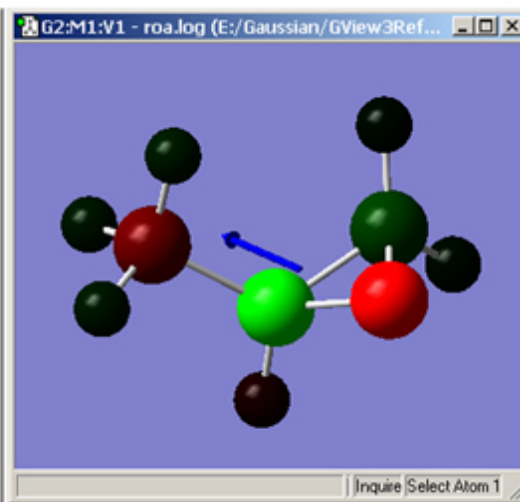
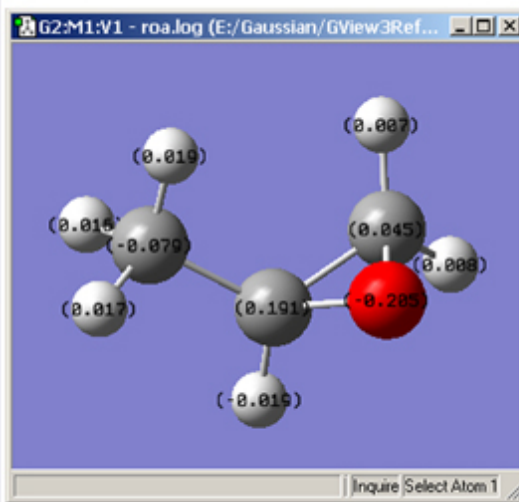
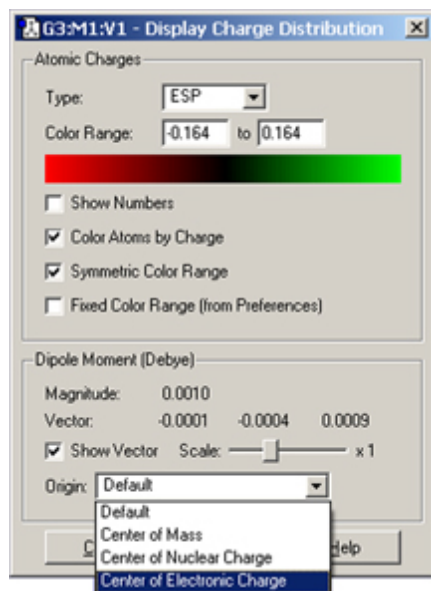
File Name	CC14
File Type	.chk
Calculation Type	FREQ
Calculation Method	RHF
Basis Set	STO-3G
Charge	0
Spin	Singlet
Total Energy	-1855.67851100 a.u.
RMS Gradient Norm	0.00000723 a.u.
Imaginary Freq	
Dipole Moment	0.0000 Debye
Point Group	

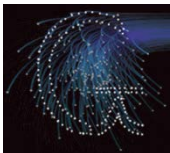
Ok View File Save Data



显示原子电荷

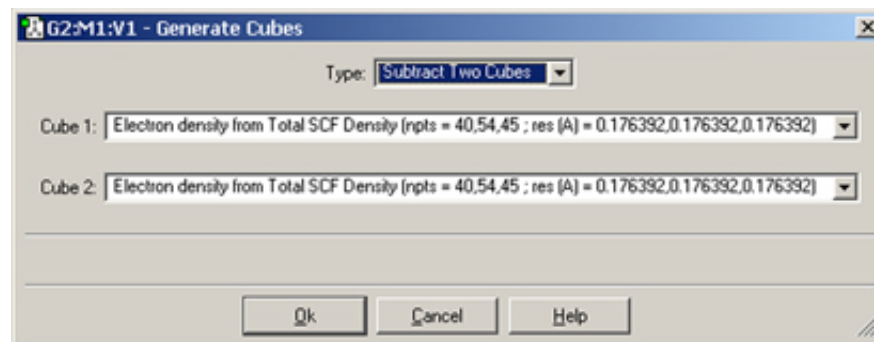
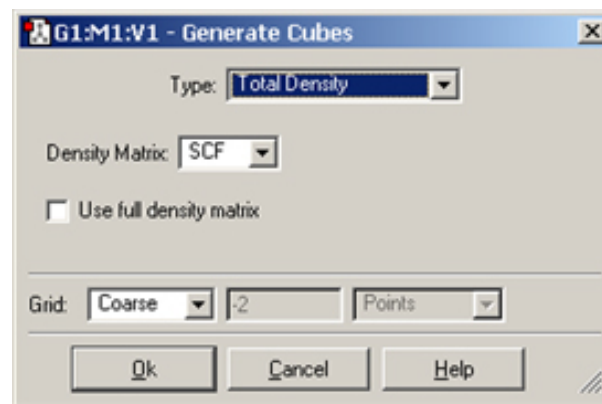
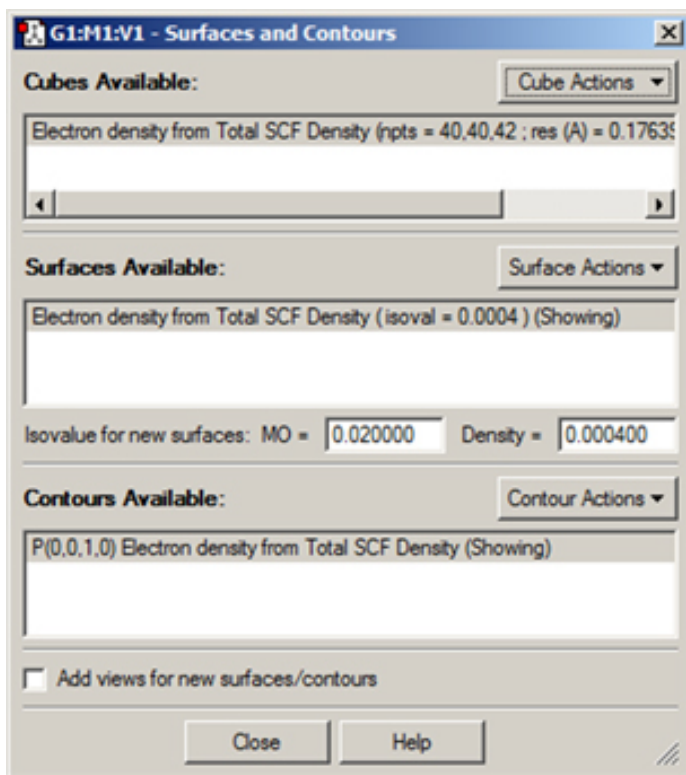
【Results】→【Charge Distribution】

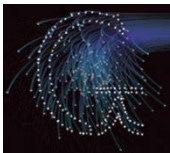




显示表面和等高线

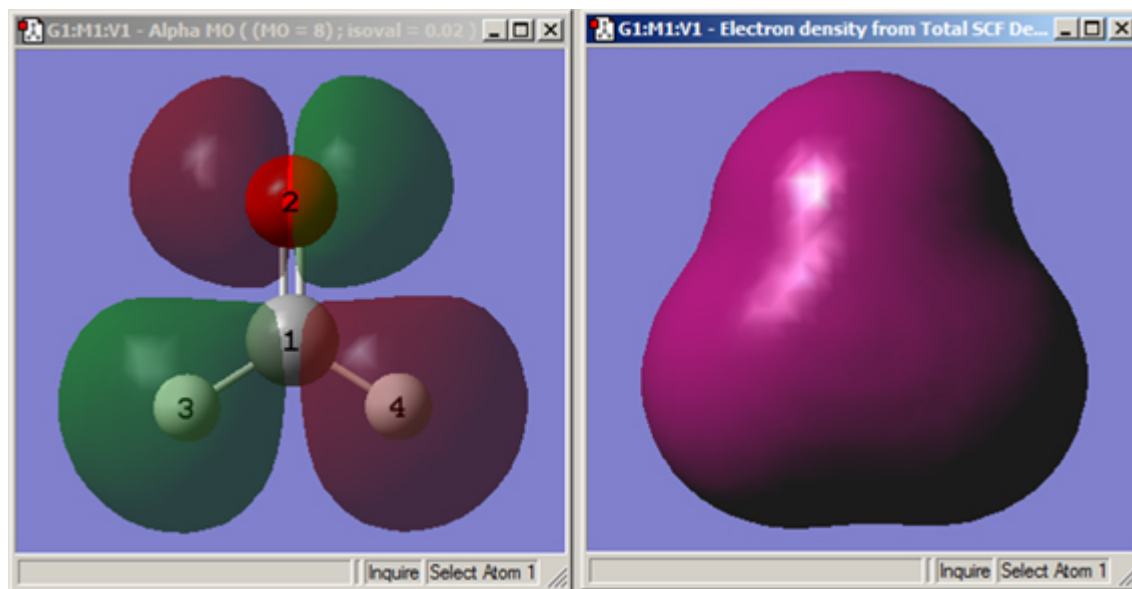
【Results】→【Surfaces/ Contours】

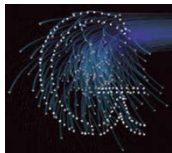




一些例子

分子轨道和静电势表面



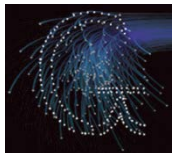


练习4

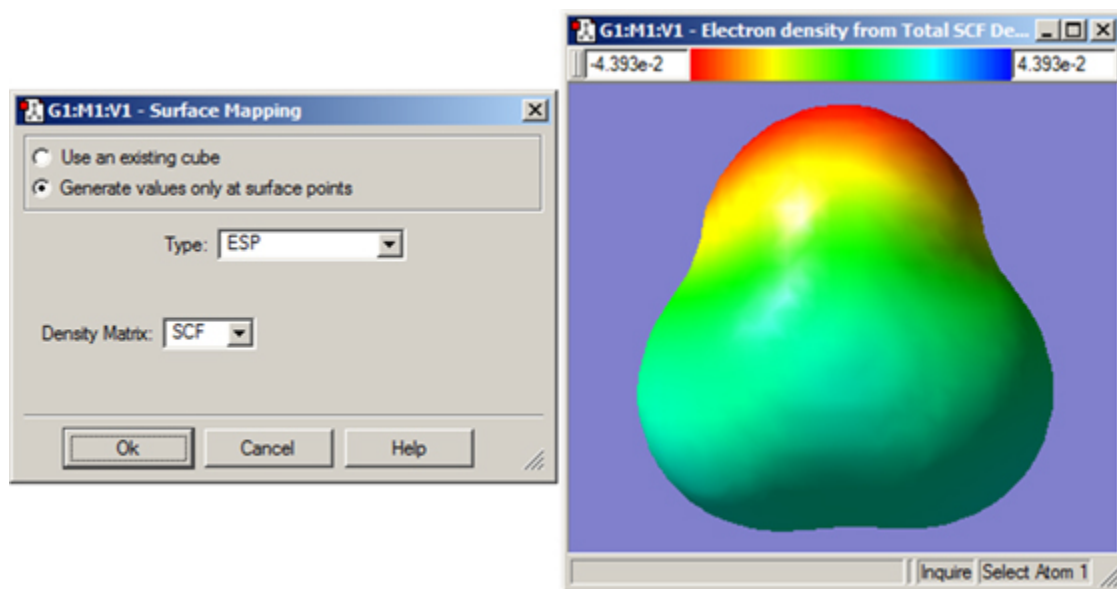
- 查看苯环分子的分子轨道



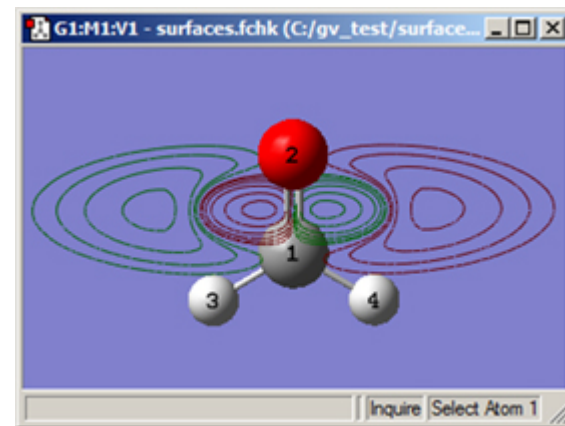
一些例子

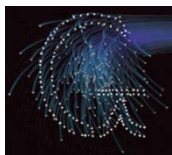


映射表面



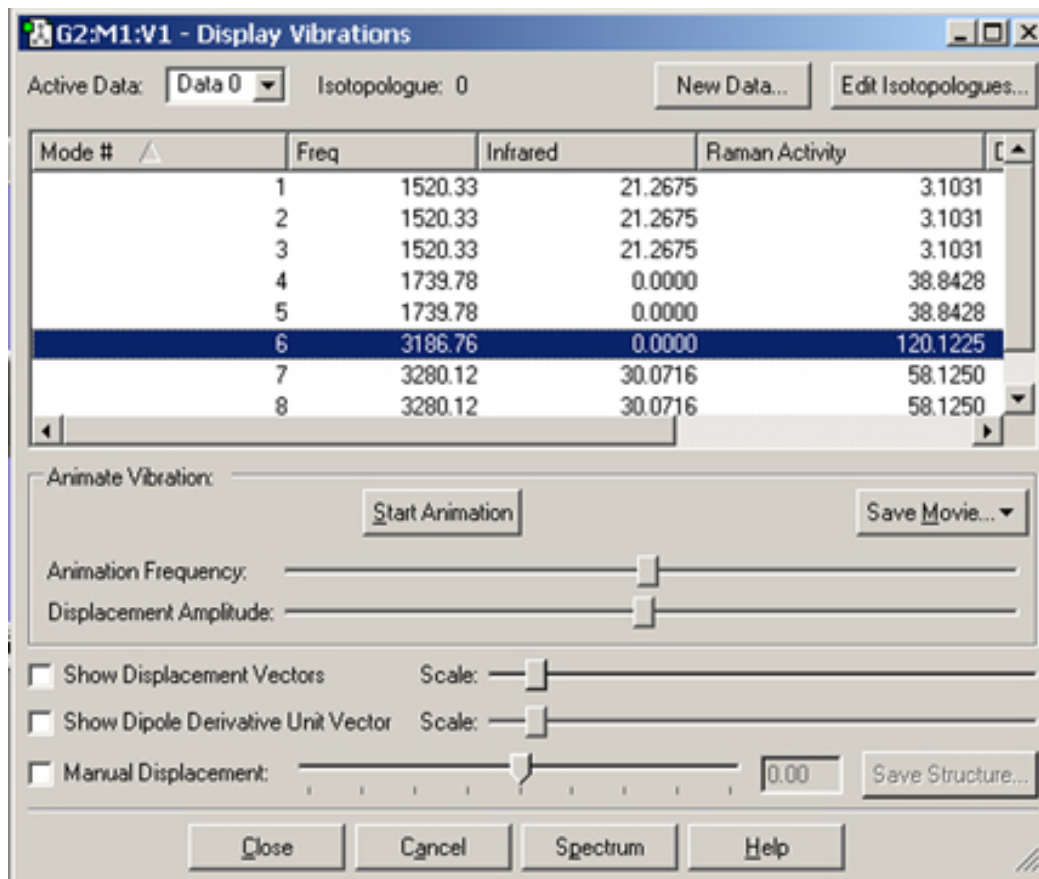
轨道等高线

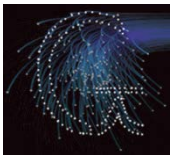




显示振动模式及光谱等

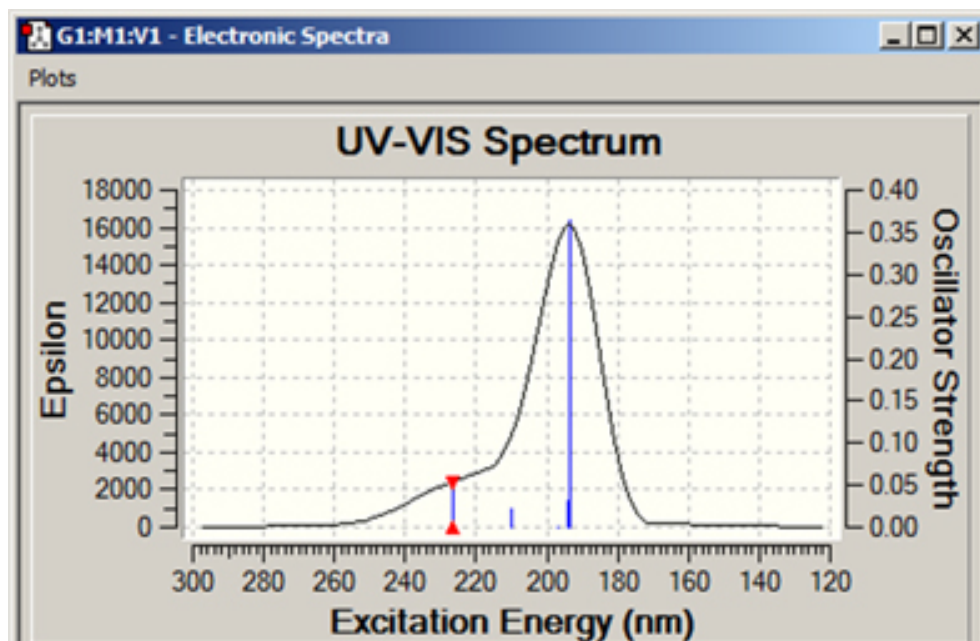
【 Results 】 → 【 Vibrations 】

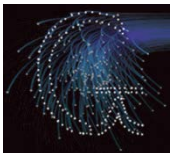




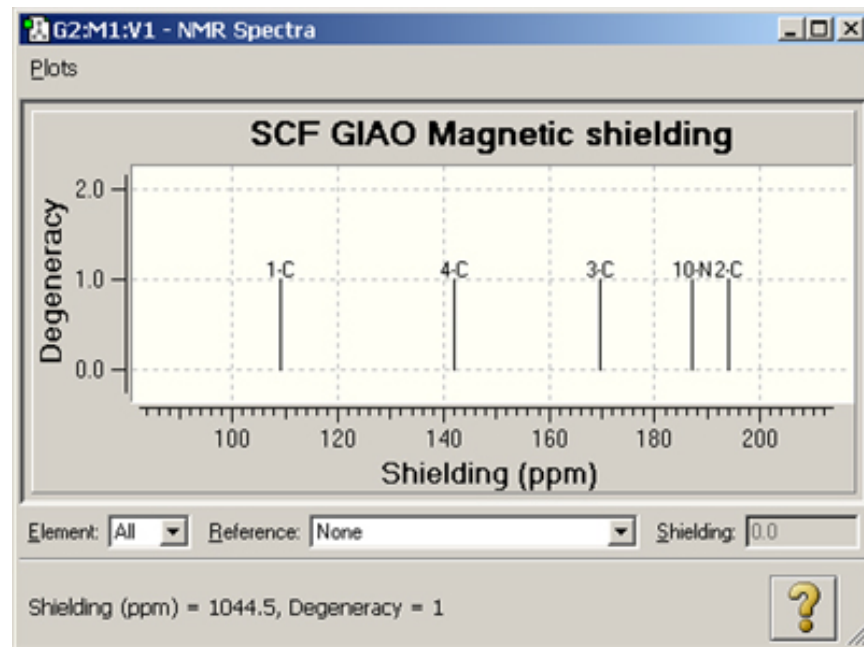
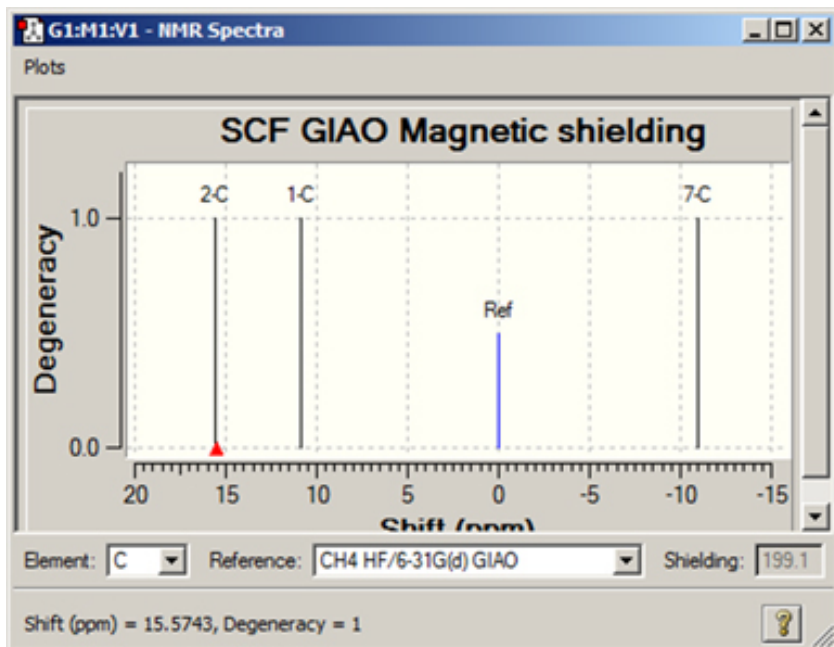
显示紫外可见光谱

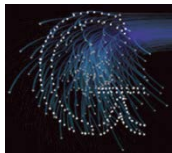
如果计算了分子的激发态，
点击【**Results**】→【**UV-VIS**】将显示由激发态计算的光谱。





显示 NMR 光谱





查看其他图形

例如观察二变量扫描计算的三维图

