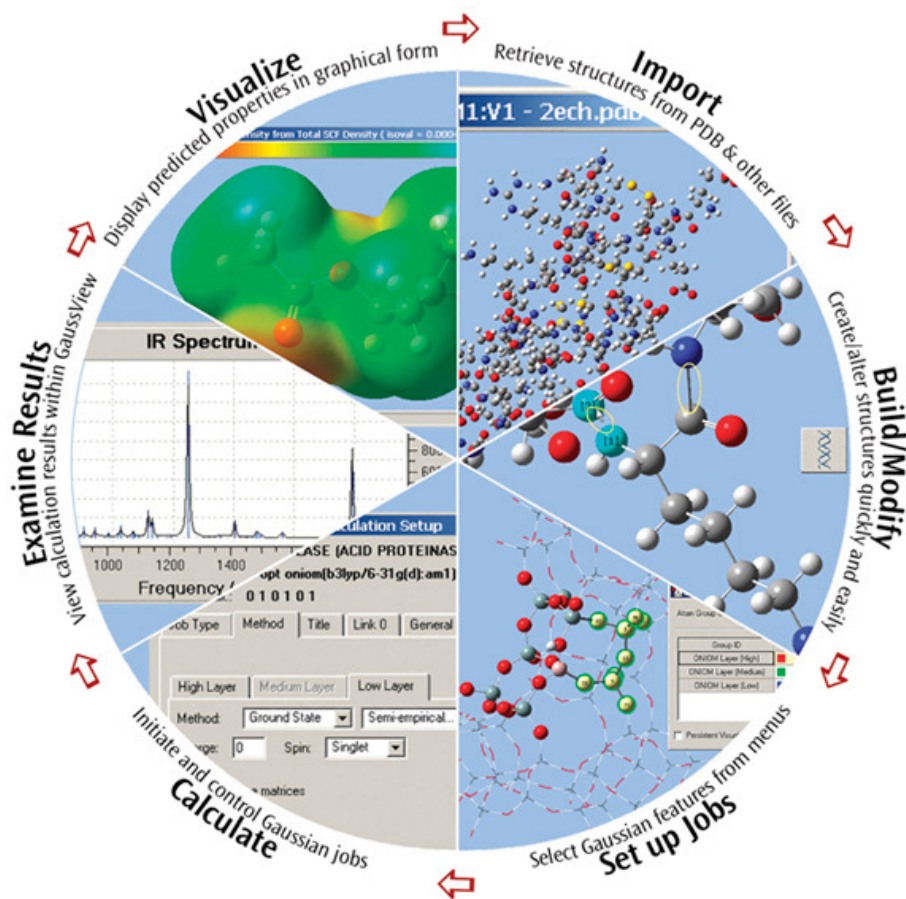


■ 觀察分子結構及反應

近觀左圖異青黴素 N 合成酵素 (isopenicillin N synthase, IPNS) 搭配 IRC (Intrinsic reaction coordinate following) 反應路徑追蹤法的質子轉換。採用 Gaussian 的 ONIOM 法研討此 5368 個原子的系統，並在 GaussView 內檢視。為清楚表示分子結構，省略部分較低層的氫原子之圖示，僅採用全分子架構及局部放大方式檢視較高的 ONIOM 精確層。較低準確層於近視圖部分採線型框架顯示方式，全分子部分，則以管狀方式表示。參考 M. Lundberg, T. Kawatsu, T. Vreven, M. J. Frisch and K. Morokuma, JCTC 5 (2009) 222。

■ 加強圖形化功能開展化學視算技術

GaussView 提供 Gaussian 最先進、功能強大的圖形界面。有了 GaussView 就可輸入及建構想要的分子結構，從 "設定"、"啟動"、"控制並檢視 Gaussian 計算"，接著取得並檢查結果，都不需要離開 GaussView 軟體。GaussView 5 (GV5) 提供化學研究人員方便直接方法處理大尺寸的分子系統，GV5 也完全支援 G09 新的功能及分子建構方式。G09 用戶不妨嘗試 GV5 的方式，建構自己的分子系統。



■ 大尺寸分子的建構與管理

GV5 提供研究大尺寸分子系統，從 PDB 檔，G09 每一階段該有的功能，開始讀入分子資料，改變分子結構與設定 ONIOM 計算。最後再檢視及繪製計算結果。此外 GV5 亦可讀取許多常用的資料輸入格式。

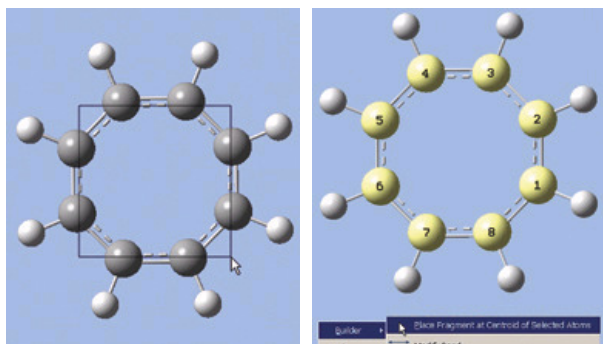
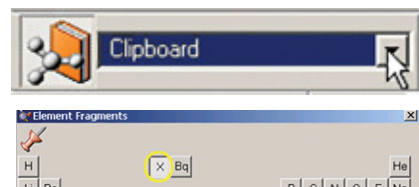
GV5 完全支援從 PDB 檔讀入的分子結構，並直接進入計算工作：

- * 由多結構文件選擇所需的結構。
- * 依據使用者習慣選擇自動或手動，在所有原子上添加氫原子。
- * 選擇性添加氫原子到單一或多個副產物、化學鏈、螺旋或其他已定義的實體結構。
- * 在個別副產物或次結構標出 / 選擇原子。
- * 利用滑鼠快速標出原子副產物之成分。
- * 依據不同的彈性準則指定給 ONIOM 層。
- * 保留 G09 計算中的殘基訊息，並取得 G09 計算結果。

■ 建構分子更容易

GV5 提供較 GaussView 早期版本更彈性的功能：

1. GV5 提供一組常見的工具盤視窗，若需要一組平面八碳環類的素材，則可透過顯示的建構工具視窗從自訂建好的分子結構資料庫擷取。
2. 從元素週期表版面選取 X 原子符號的啞原子。



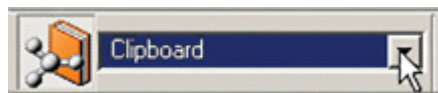
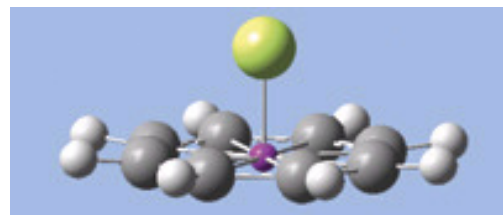
3. 現在選用所有需要的碳原子。方法之一是採用 GV5 新的 **rubberband** 選擇模式。在視窗上，按住 **R** 鍵並拖曳滑鼠，框出一個接觸到所有碳原子的矩形。當鬆掉滑鼠按鍵時，被選到的碳原子會呈現黃色。
4. 在視窗上單擊右鍵，然後移至選到的原子再從內容選單選擇 **Builder → Place Fragment**。此時環的中心就出現一個紫紅色的啞原子。



5. 按下 **Rebond** 游標；把分子鍵從啞原子加到選到的八個碳原子。

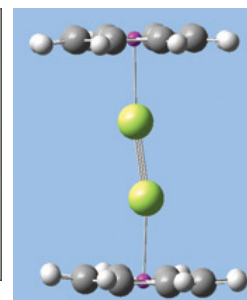
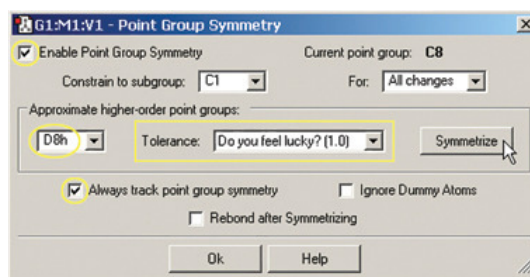


6. 點擊 **Add Valence** 添加原子價按鈕，然後移到啞原子。將出現一個氫原子結合到垂直於平面環的啞原子。更改氫原子為鈷原子。出現的分子如右圖。



7. GV5 內選擇整個分子的快速方法是在視窗打開時按 **A** 鍵。然後鍵入 **Ctrl -C** 或輸入命令 **-C**，將分子複製到剪貼板。剪貼板上的任何分子結構，都會出現在自訂的元件選單，選擇剪貼板，點選適當位置，加入另一單元於視窗內。

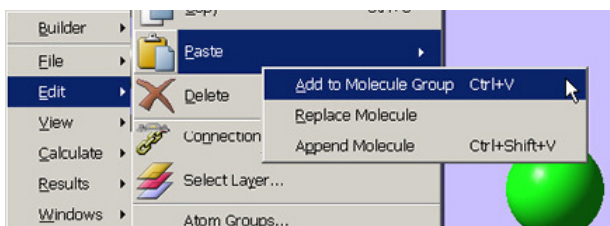
8. 按住 **Alt** 鍵，限制鼠標對新組件的操作，並將其移到所需位置附近。
9. 新增一組長 2.24Å 三價鍵 然後調整 XUUX 二面角為 180°。
10. 最後透過 Point Group Symmetry 對談視窗 (Edit 視窗內) 加強分子的對稱性。



■ 準備 G09 的計算

GV5 透過圖形化機制，設定特定計算型態，全力支持 G09 所有功能：

- 多種方法指定原子於 ONIOM 層。GV5 也簡化指定分子力學原子的類型與電荷。
- CASSCF 及其他工作對 MOs 的重排與重配。
- 增加及重訂重覆的內部座標。
- 幾何優化過程中指定鎖定的原子及座標。
- 設定 STQN 等價原子激態最佳化。
- 常態分析 (頻率計算) 選定原子。
- 指定核磁共振自旋耦合的原子。
- 建構用於週期邊界條件 (PBC) 計算的聚合物單位細胞、二維表面和晶體。



系統需求：

處理器： 64 位元 AMD64, 64 位元 Intel EM64T 或 32 位元 x86 多核心處理器, MD Opteron, Phenom, Athlon 或 Turion, 或 Intel Pentium II/III/4/M/D, Centrino, Core, Core 2 或 Xeon, Apple Intel Mac, IA64, HP alpha, IBM Power 5/6/7

支援作業系統：

Linux: 核心 2.6 及 glibc 2.4.x 以上 - 作業系統 SUSE Linux Enterprise Server (SLES) 10.0 以上, OpenSUSE 9.3 以上, Red Hat Enterprise Linux 5.3 以上, CentOS5.3 以上, Mac OS X10.5.8 或 Mac OS X10.6.4 Apple Mac OS X G4 或 G5 CPU 系統

Microsoft Windows - Windows 7, Vista, Windows Server 2008(x64) Edition 或 Windows XP Professional x64 Edition (最多四核心)

Enhanced Visualization, Expanded Chemistry

緯凌資訊有限公司

h: www.wavelink.com.tw e: info@wavelink.com.tw
t: 886-2-85227288 f: 886-2-85227187
24254 新北市新莊區中山路一段 107 號 12 樓