M winmostar チュートリアル

Gaussian 化学反応解析(遷移状態・IRC計算)

V11.3.3

2023年1月12日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.



- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - Winmostar導入講習会:基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>:理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - 個別講習会:ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾な く、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。



ブロモエタン(CH₃CH₂Br)とCl⁻イオンの真空中での化学反応について、TS(遷移状態、Transition State)構造とIRC(固有反応座標、Intrinsic Reaction Coordinate)計算を次の手順で実行します。

- 1. C-CI原子間の距離を走査するスキャン計算を実行し、TS構造最適化計算の初期構造を作成。
- 2. 1.のエネルギー極大点からTS構造最適化計算を実行し、さらに得られたTS構造で振動計算を実行し、虚の振動数を1つ有する鞍点となっていることを確認。
- 3. TS構造から虚の振動数をもつ振動の2方向に沿ったIRC計算を実行し、TS構造と反応物と生成物の構造がつながっているかを確認。



注意点:

- 本チュートリアルでの計算方法はB3LYP/6-31G*です。
- 複数の遷移状態を経由する反応を調べる場合は、それぞれの遷移状態を個別に計算してください。

Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**とファイルモードの2つの動作モードが用意されています。 本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。 ファイルモードの操作方法は<u>V10のGaussianチュートリアル</u>を参照してください。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1



継続ジョブを作成するときに、ファイルモードまたはV10以前では都度継続元ジョブの最終構造を 表示する必要がありますが、プロジェクトモードでは自動で最終構造が引き継がれます。

- 1. Winmostarを起動し、新規プロジェクト(3次元構造を入力)をクリックします。(すでに起動している場合はファイル | 新規プロジェクトをクリックします。)
- 2. プロジェクト名に「ts_irc」と入力し保存をクリックします。



1. メインウインドウ右上の**ラベル/電荷**メニューから**番号&元素**を選択し、分子表示エリアで各 原子の名前を表示します。





基本的な操作方法はGaussian基礎編チュートリアルを参照してください。

- 1. フラグメントが-CH3の状態で、その右にあるReplaceボタンを2回クリックし、エタンを作成します。
- 2.8Hの原子が赤丸で選択された状態で、編集操作向けの元素を選択メニューから Br 35を選択 します。次に、元素を変更ボタンをクリックし、ブロモエタンを作成します。

୍ ପ - ପ୍ର

P

8Br

- H







- 1. 表示 | 表示項目 | メッシュメニューをクリックし、分子表示エリアにメッシュを表示します。
- 2. 編集操作向けの元素を選択メニューからCl 17を選択してます。次に、原子を追加ボタンをク リックし、塩素原子を追加します。



Winmostar Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

9CI

7H

8Br

- 1. 1C→2C→9CIと順番に続けてクリックして選択します。
- 2. 編集 | 選択原子の距離/角度を変更 | 距離をクリックし、ダイアログで「2.7」と入力しOKボ タンをクリックして、9CI-2C間距離を2.7 Å にします。
- 3. 編集 | 選択原子の距離/角度を変更 | 角度をクリックし、ダイアログで「109」と入力しOKボ タンをクリックして、9CI-2C-1C角度を109度にします。



II. 計算の実行(スキャン計算)

- 1. 9CIと2Cの間の距離をスキャンしたいため、分子表示エリアで2C→9CIの順にクリックし分子 表示エリア左上のMarked Orderが「9-2-*-*」(*は何でもよい)と表示されることを確認 します。
- 2. QM | Gaussian | Potential Energy Surface Scan | 設定をクリックします。
- **3.** Specify intervalの値を「-0.1」に変更しOKボタンをクリックします。「…続行しますか?」と聞かれたらはいをクリックすると、Z-matrixと原子の順番が自動で変更されます。 分子表示エリア下部で「PES Scan configured」と表示されることを確認します。



II. 計算の実行(スキャン計算)

- 1. ソルバを選択メニューでGaussianを選択して、ワークフロー設定ボタンをクリックします。
- 2. Taskを「Scan」、Chargeを「-1」に変更しOKボタンをクリックします。
- 3. ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします。

	🞯 Gaussian Workflow Setup		_	
ソルバ Gaussian - MOPAC	Preset Optimize	✓ (modified)	# of Jobs: +	1 -
Repla GAMESS		🗌 Enab	le parameter/structure scan	Config
	1st job		(+ •
Quantum ESPRESSO	Task Scan Method	B3LYP 🗸	Basis set 6-31G*	~
	Charge -1 Multiplicit	y 1 ~	Solvent [None]	~
			Details	
	Reset Import Export]	ок	el
	B			

III.結果解析(スキャン計算)

- 1. 計算が終了してwork1_GAU_SCANの作業フォルダの状態がENDに変化した後、作業フォル ダのwork1_GAU_SCANをクリックし、アクションのAnimationをクリックします。
- 2. アニメーション操作パネルのグラフで、C-CI間が短くなる途中でエネルギー極大値が得られて いることを確認します。極大値である4番目の点をクリックし分子表示エリアにその構造を表 示して、次の遷移状態構造最適化計算の初期構造とします。



IV.計算の実行(TS+IRC計算)

- 1. **ソークフロー設定**をクリックします。「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたら いいえをクリックします。
- 2. Presetを「Optimize(TS)+IR + IRC」に変更してからChargeを「-1」に変更します。
- 3. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします。

reset O	ptimize(TS)+IR + IRC		(modified)			# of Jobs:	+	3	
				🗌 Enal	ble paramete	er/structure	scan	Confi	ig
lst job							- (+)(-)
ïask	Optimize(TS)+R	Method	B3LYP	~	Basis set	6-31G*		~	-
Charge	-1	Multiplicity	1 ~		Solvent	[None]		~	7
		-							
						Details.]
2nd job							- (+))
Task	IRC(Reverse)	✓ Method	B3LYP	\sim	Basis set	6-31G*		~	
Charge	-1 ~	Multiplicity	1 ~		Solvent	[None]		~	
Same	conditions as previous job	Continue fr	om previous job	\sim					

V. 結果解析(TS計算)

- work2_GAU_OPTTS-IRの作業フォルダの状態がENDに変化した後、作業フォルダの work2_GAU_OPTTS-IRをクリックし、アクションのIR/Ramanをクリックします。
- 2. IR Spectrumウィンドウの左上欄の振動数のリストで1つだけ負の値(表示上は負の値で、 正確には虚の値)があれば、遷移状態構造が得られたことを意味します。
- 3. 1番目のピークをクリックした後、Animationボタンをクリックします。Cの1つがClとBrに 近づいたり遠ざかったりする振動モードであることを確認します。
- 4. 確認後IR SpectrumウィンドウでCloseをクリックします。

♥ プロジェクト	
作業フォルダ (ts_irc)	Options V
名前	状態
work1_GAU_SCAN	END
• vork2_GAU_OPTTS-IR	END
work3_GAU_IRCR	END
- work4_GRU_INCF	ENU
<	>
	`
PODED (WORK2_GAU_OPTIS-IR	J
Coordinate (Initial)	
🔁 Coordinate (Final), Charge 8	& Dipole
🚾 Log	
Log (Extracted)	
Animation	
🕂 MO & Charge	
📑 IR/Raman	
Show in Explorer	

VI.結果解析(IRC計算)

- work3_GAU_IRCR, work4_GAU_IRCFの作業フォルダの状態がENDに変化した後、作業 フォルダのwork3_GAU_IRCRをクリックし、アクションのAnimation (IRC)をクリック します。
- 2. アニメーション操作エリアでOptions | Tools | Invert Trajectoryをクリックします。
- アニメーション操作エリアでOptions | Tools | Append Trajectory…をクリックし、 work4_GAU_IRCFフォルダのgau.logを選択し開くをクリックします。



VI.結果解析(IRC計算)

- 1. IRC計算のForwardとReverseをつなげたアニメーションが作成されます。再生して原子座標の変化をみて、反応物-遷移状態(TS)-生成物がつながっていることを確認します。
- 2. アニメーションを画像または分子構造ファイルとして保存したいときはアニメーション操作エリアのOptions | Export以下の機能を利用します。



VI.結果解析(IRC計算)

- 1. 9CI-3C間距離(p.10の操作で原子の順番が変更していることに注意)を横軸にエネルギーをプロットしたい場合、分子表示エリアの9CIと3Cの原子をクリックします。
- 2. アニメーション操作エリアのCustom Plotをクリックします
- 3. Custom Plotウィンドウ右のX axisのPlotのStep numberをDistance (norm)に変更し、 Applyボタンをクリックします。
- 4. 9CI-3C間距離を変数としたときのエネルギーのグラフが表示されます。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>の受講をご検討ください。(詳細はP.2)
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上