

 winmostar チュートリアル

# MOPAC

## 化学反応解析（遷移状態・IRC計算）

V11.8.4

2024年7月1日 株式会社クロスアビリティ

注：エコノミー・学生版の方は、[ファイルモード](#)を利用してください。

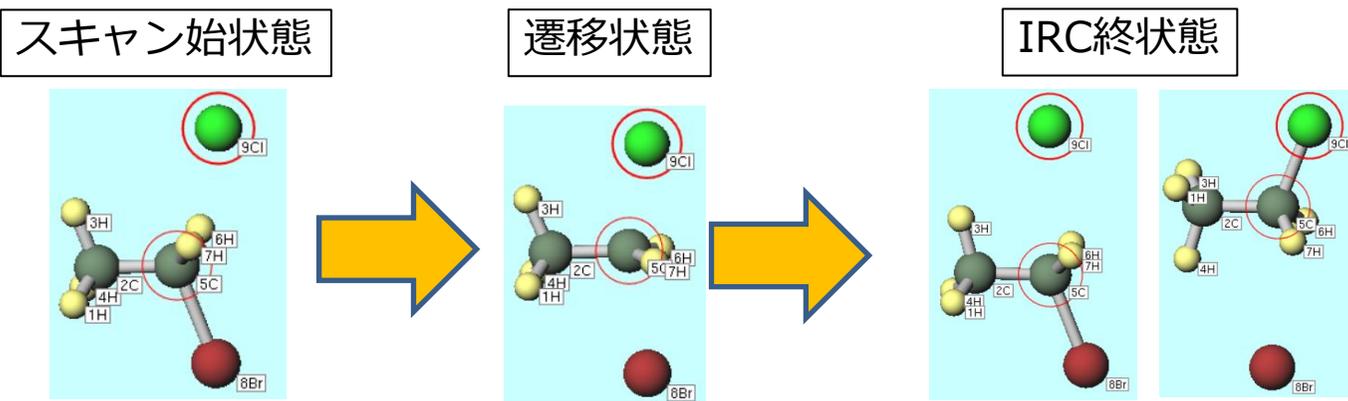
# 本書について

- 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[ユーザマニュアル](#)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。
  - [Winmostar基礎講習会](#)：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[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。
- 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。

# 概要

ブromoエタン( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$ )とCl<sup>-</sup>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AM1法で実行します。

1. C-Cl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
3. 得られたTS構造で振動計算を実施し、虚の振動数を1つ有する鞍点となっていることを確認
4. 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、反応物・生成物を確認



注意点：

- 本チュートリアルは計算は半経験的手法かつ真空中のため、高精度な結果や溶媒中での結果が欲しい場合は、GAMESS, NWChem, Gaussianなどを使用してください。
- 複数の遷移状態を経由する反応の場合は、それぞれの遷移状態を個別に計算してください。

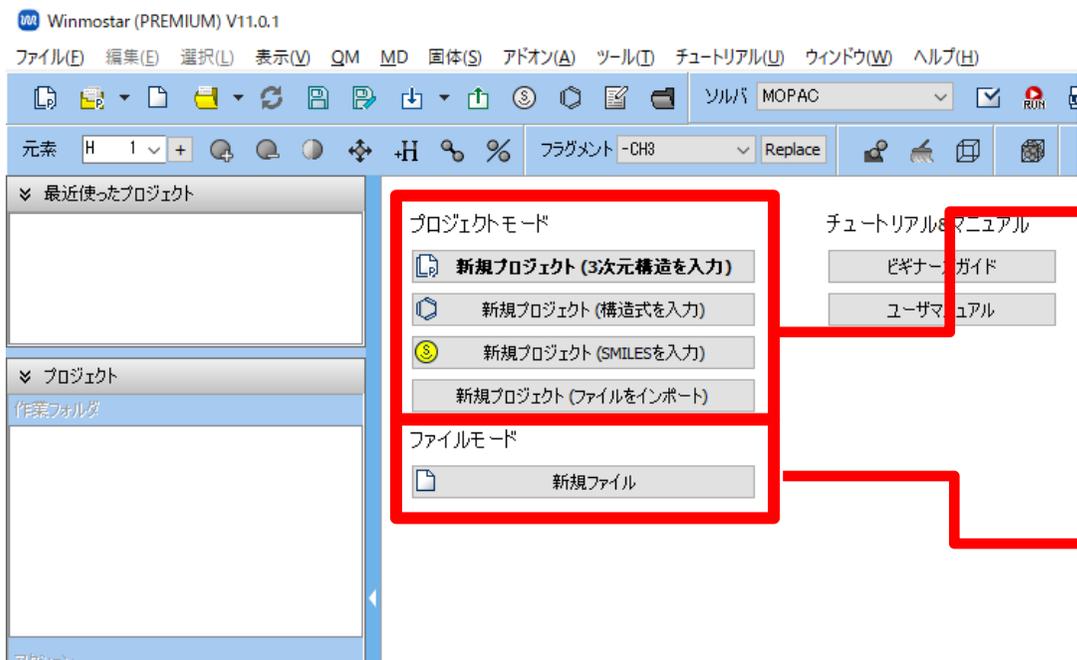
謝辞： 本資料作成にあたり元富山大学の木原寛氏の資料を参考にしました。

# 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[V10のチュートリアル](#)を参照してください。



## プロジェクトモード V11新機能

ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

## ファイルモード

ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

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。

# I. 系のモデリング

基本的な操作方法は[MOPAC基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

1. **ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、**プロジェクト名**に「sn2\_mopac」と入力して**保存**をクリックします。
2. メインウィンドウ右上の**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。



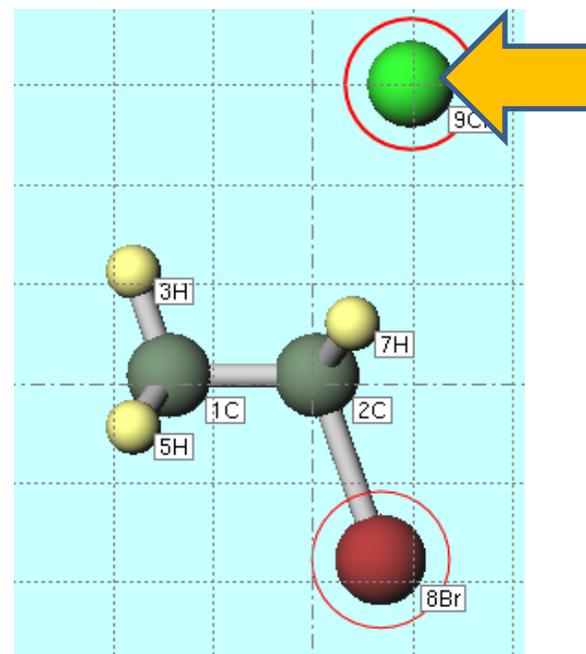
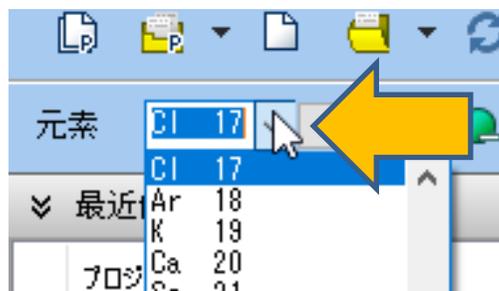
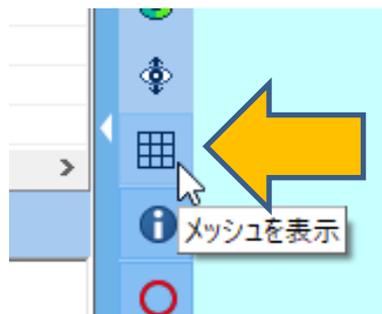
# I. 系のモデリング

1. フラグメントを-CH3に変更してから**Replace**ボタンを2回クリックし、エタンを作成します。
2. 8Hの原子を右クリックし**元素を選んで変更** | **Br 35**をクリックしブロモエタンを作成します。

The screenshot illustrates the software interface for creating bromoethane. At the top, a toolbar shows a fragment menu set to '-CH3' and a 'Replace' button. A yellow arrow points to the 'Replace' button. Below the toolbar, a ball-and-stick model of a fragment is shown with atoms labeled 1C, 2C, 3H, 5H, and 7H. A red circle highlights the 8H atom. A context menu is open over the 8H atom, with the option '元素を選んで変更(Y)' (Change element by selecting) highlighted. A yellow arrow points to this menu item. To the right, an element list is displayed, with 'Br 35' highlighted. A yellow arrow points to 'Br 35'. On the far right, another ball-and-stick model shows the final bromoethane molecule with a bromine atom labeled 8Br.

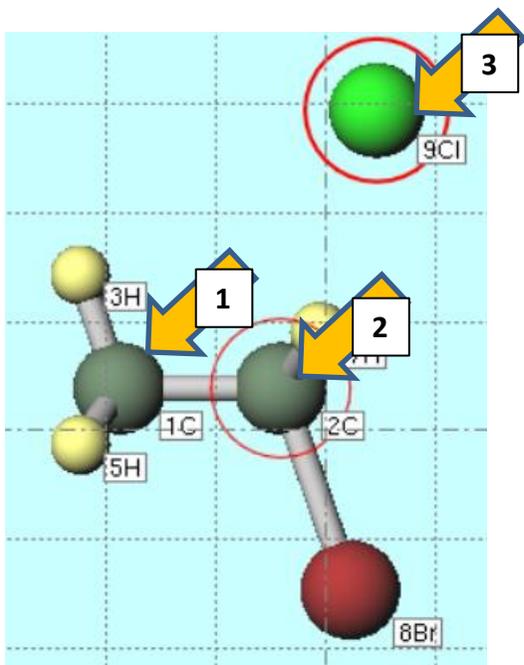
# I. 系のモデリング

1. ツールバーで **メッシュを表示** 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. ツールバーの**元素**で「Cl 17」を選択します。
3. **原子を追加** ボタンをクリックし、右下図の緑色の原子のあたりをクリックしてCl原子を追加します。



# I. 系のモデリング

1. **1C**→**2C**→**9Cl**と順番に続けてクリックして選択する。
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ます。



Change Distance ×

Enter Distance [A]

OK Cancel

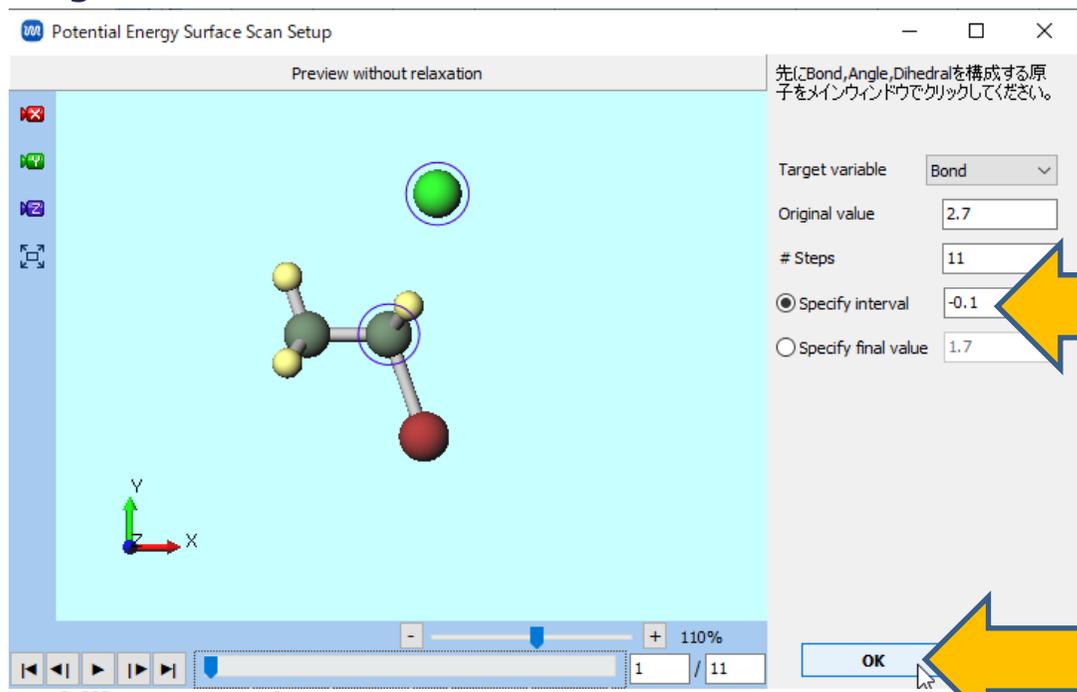
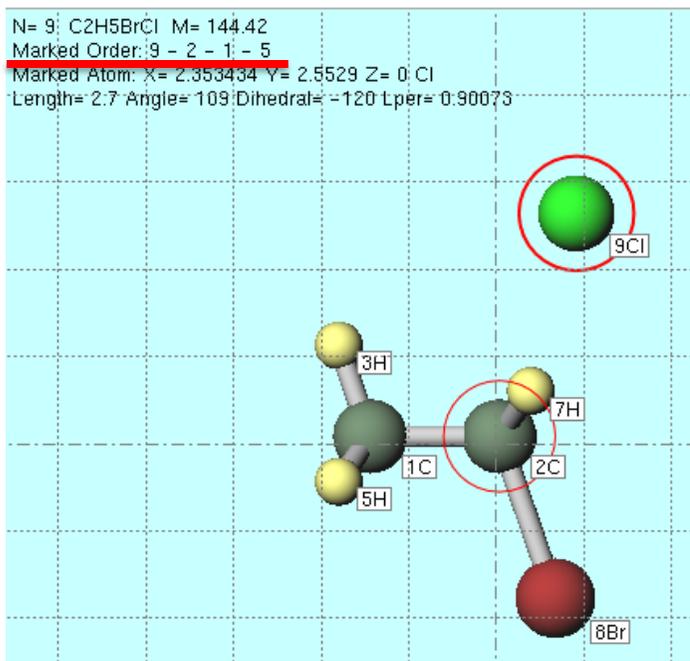
Change Angle ×

Enter Angle [deg]

OK Cancel

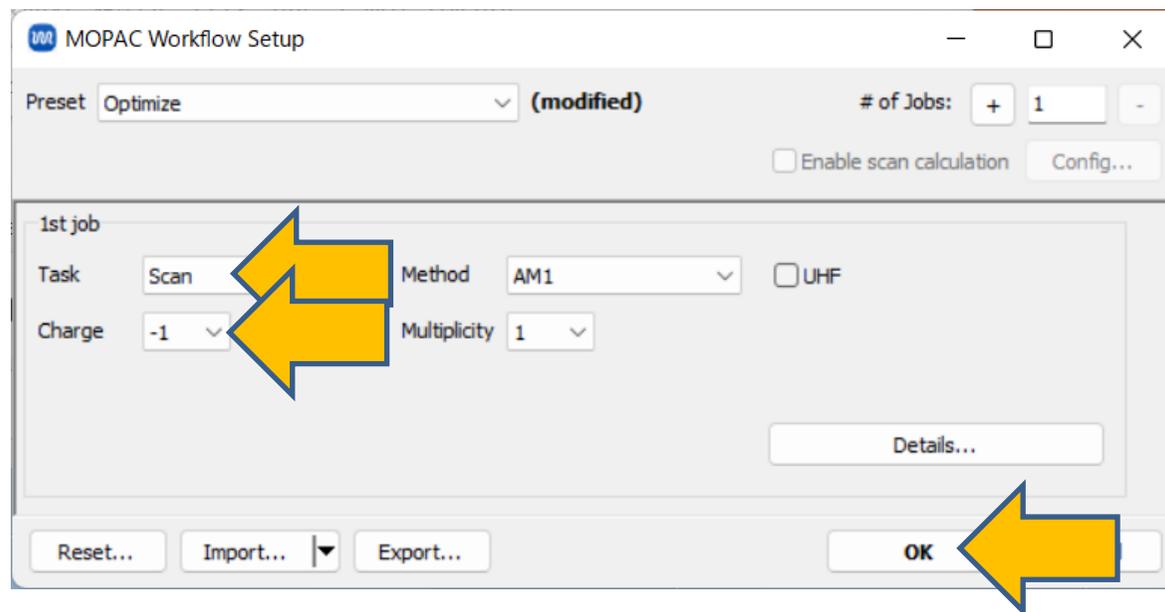
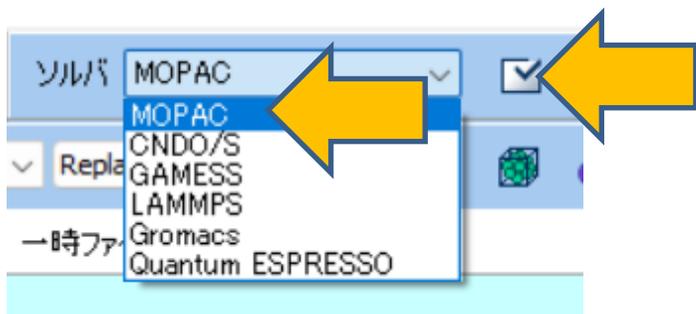
## II. 計算の実行(スキャン計算)

1. 9Cl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→9Cl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 | MOPAC | 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MOPAC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。



# III.結果解析（スキャン計算）

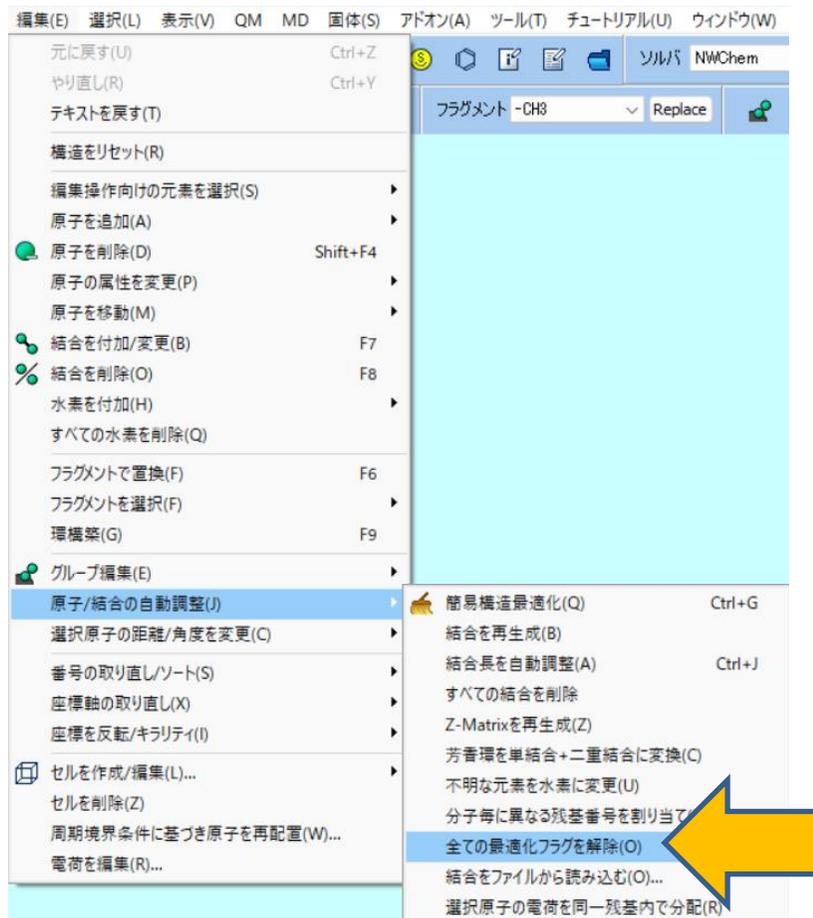
1. 計算が終了してwork1\_MOP\_SCANの作業フォルダの状態が**END**に変化した後、**作業フォルダ**のwork1\_MOP\_SCANをクリックし、**アクション**の**Animation**をクリックします。
2. アニメーション操作エリアのグラフで、**C-Cl**間が短くなる途中でエネルギー極大値が得られていることを確認します。極大値である7番目の点をクリックし分子表示エリアに表示して、次の遷移状態構造最適化計算の初期構造とします。

The screenshot displays the winmostar software interface. On the left, the 'プロジェクト' (Project) panel shows the '作業フォルダ (sn2\_mopac)' (Working Folder) with 'work1\_MOP\_SCAN' in the 'END' state. Below it, the 'アクション (work1\_MOP\_SCAN)' (Action) panel lists 'Coordinate (Initial)', 'Coordinate (Final)', 'Log', 'Log (Archive)', 'Animation', and 'Show in Explorer'. A yellow arrow points to the 'Animation' option. The central 3D molecular model shows a structure with atoms labeled 1H, 2C, 3H, 4H, 5C, 6H, 7H, 8Br, and 9Cl. Red circles highlight the C1-H1 and C2-Cl9 bonds. The right panel shows the animation controls, including a speed slider, 'Loop' checkbox, and 'Open Viewer' button. Below these are energy values for different frames: 2.4000 -50.778234 KCAL, 2.3000 -47.503532 KCAL, 2.2000 -44.481247 KCAL, and 2.1000 -42.938841 KCAL. The 'Frame' slider is set to 7 / 11. The 'Plot' section shows a graph with a peak at frame 7, with a value of -42.938841000. A yellow arrow points to this peak. The '表示形式' (Display Format) is set to 'Z-Matrix'.

# IV.計算の実行(TS+IR+IRC計算)

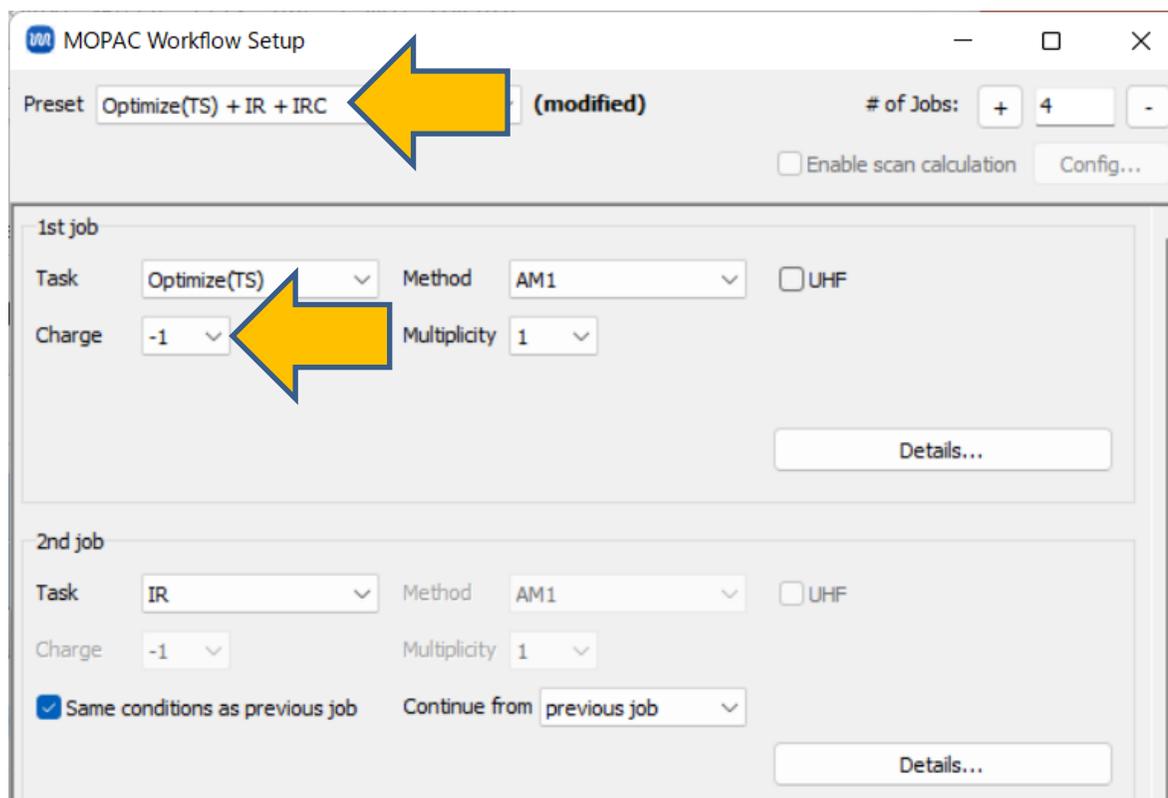
Scan計算の設定を解除します。

1. 編集 | 原子/結合の自動調整 | 全ての最適化フラグを解除をクリックします。



## IV. 計算の実行(TS+IR+IRC計算)

1.  **ワークフロー設定**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。



## V. 結果解析 (TS+IR計算)

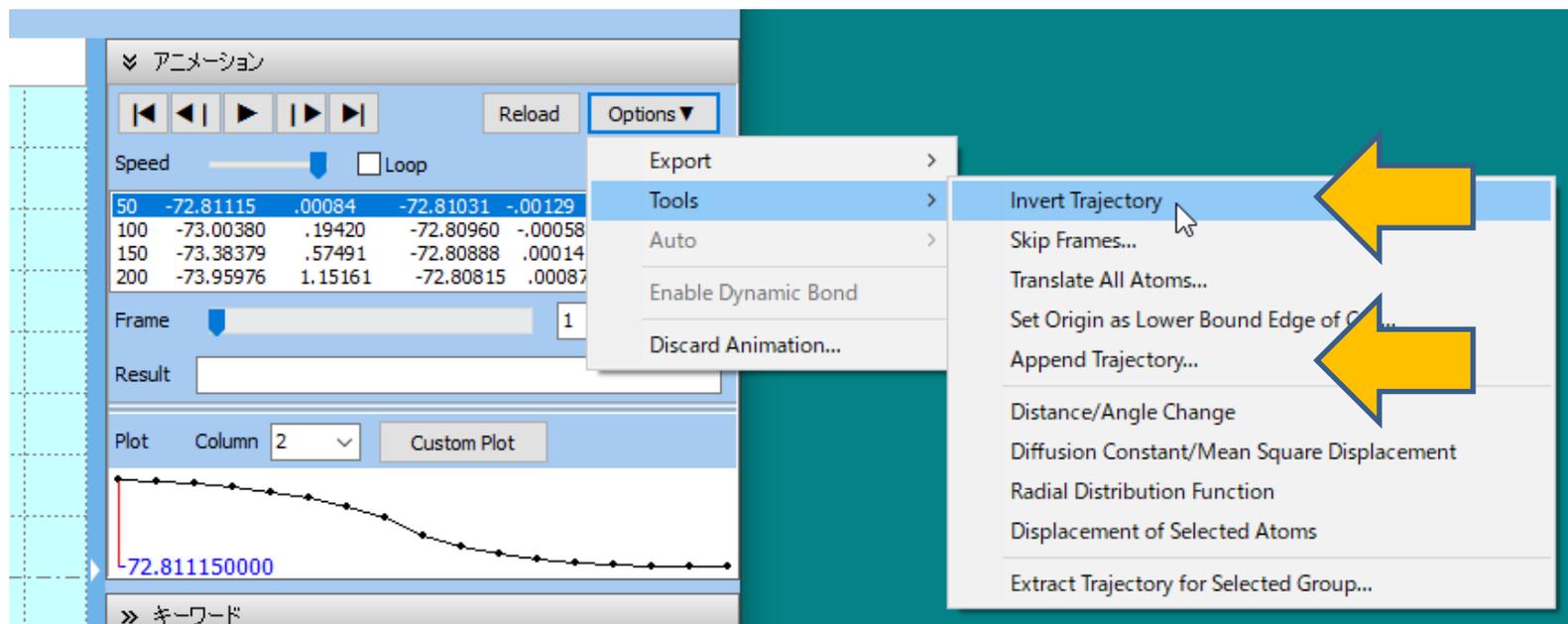
1. work3\_MOP\_IRの作業フォルダの状態が**END**に変化した後、作業フォルダのwork3\_MOP\_IRをクリックし、アクションのIRをクリックします。
2. IR Spectrumウィンドウの左上欄の振動数のリストで1つだけ負の値（表示上は負の値で、正確には虚の値）があれば、遷移状態構造が得られたことを意味します。
3. 1番目のピークをクリックした後、Animationボタンをクリックします。Cの1つがClとBrに近づいたり遠ざかったりする振動モードであることを確認します。
4. 確認後IR SpectrumウィンドウでCloseをクリックします。

The screenshot displays the software interface. On the left, the 'プロジェクト' (Project) window shows a list of folders under '作業フォルダ (sn2\_mopac)'. The folder 'work3\_MOP\_IR' is selected and its status is 'END'. Below it, the 'アクション (work3\_MOP\_IR)' window shows the 'IR' action selected. On the right, the 'IR Spectrum (sn2\_mopac.wmpjdata¥work3\_MOP\_IR¥mop\_tmp.out)' window is open. The 'Freq. Scaling' is set to 1,000. The 'Selected Peak' is -459.3 1/cm. The IR spectrum plot shows a peak at approximately 459.3 1/cm. The 'Animation' button is highlighted with a yellow arrow.

Peak No.	Freq. (1/cm)	Intensity
1	-459.3	9.200
2	74	0.114
3	161	0.659
4	219	0.369
5	225	0.923
6	331	0.261
7	841	0.036
8	945	0.074
9	1006	0.706
10	1073	0.953
11	1155	0.281
12	1244	0.352
13	1358	0.144
14	1378	0.039
15	1387	0.052
16	1432	0.120
17	3041	0.070
18	3052	0.007
19	3139	0.076
20	3157	0.104
21	3158	0.330

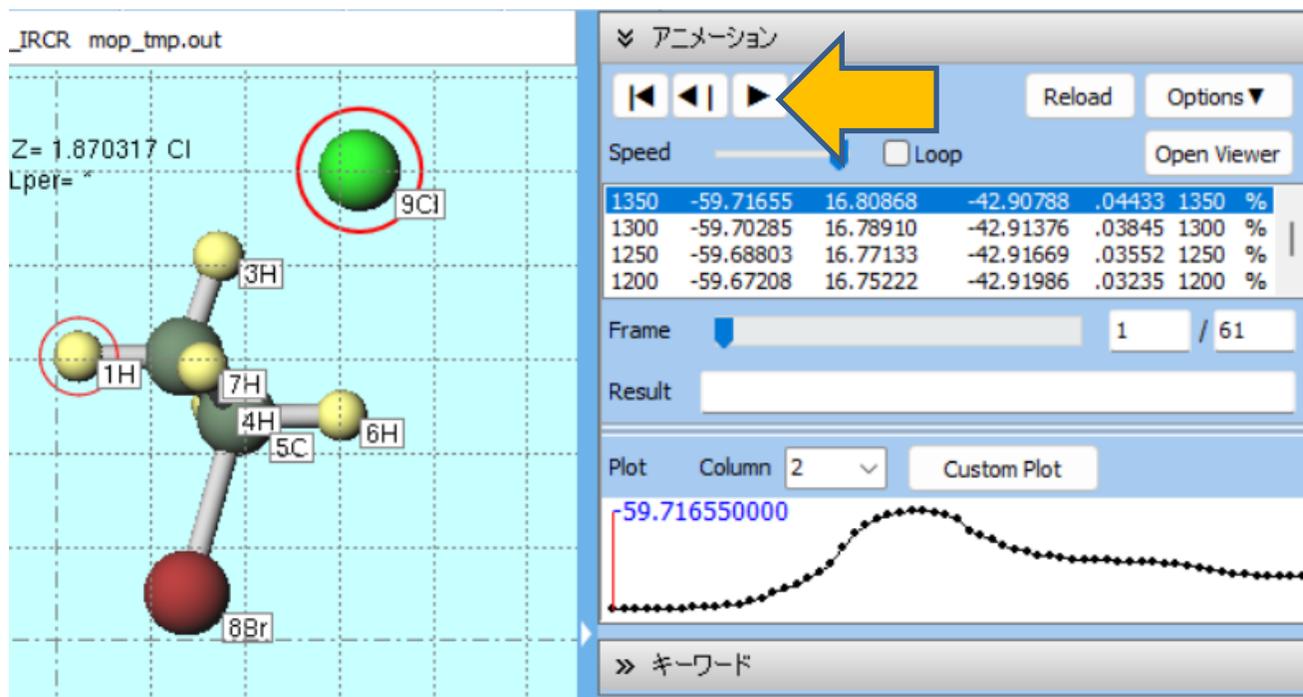
## VI.結果解析（IRC計算）

1. work4\_MOP\_IRCR, work5\_MOP\_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work4\_MOP\_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。
3. アニメーション操作エリアで**Options | Tools | Append Trajectory...**をクリックし、work5\_MOP\_IRCFフォルダのmop\_tmp.outを選択し**開く**をクリックします。次に、デフォルトで選ばれるファイルを開きます。



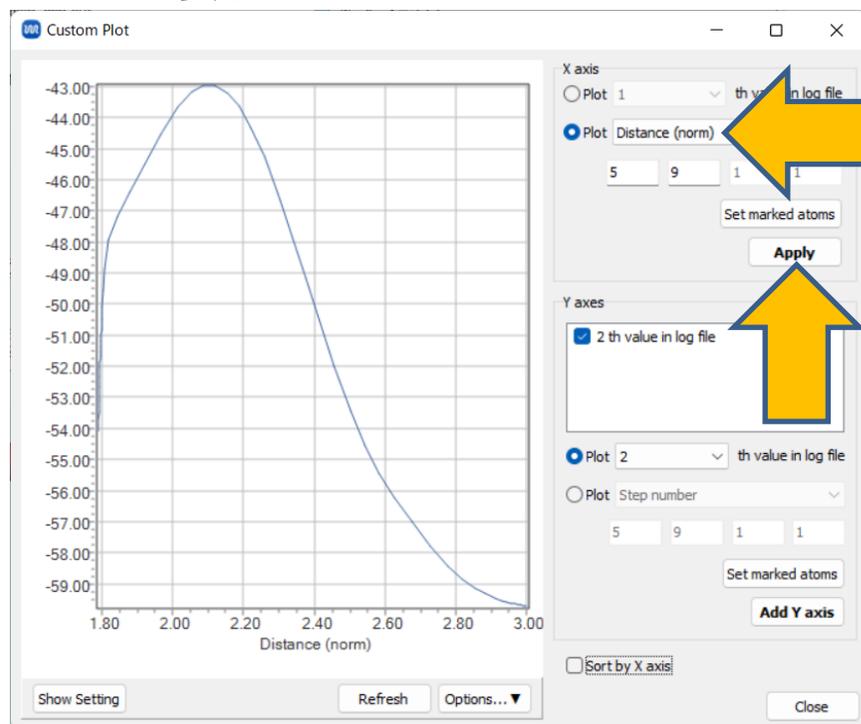
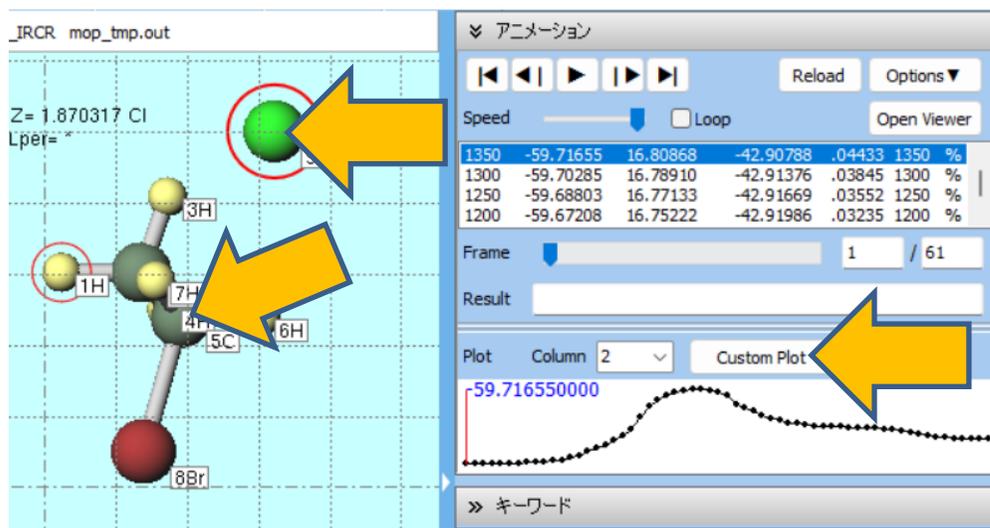
## VI. 結果解析 (IRC計算)

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. 9Cl-5C間(スキャン計算設定のため、原子の番号が初期構造作成時と異なっています)距離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9Clと5C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. 9Cl-5C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。



# 最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



## [ユーザマニュアル](#)



## [Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar 導入講習会](#)、[Winmostar 基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)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