

 winmostar チュートリアル

**MOPAC**

**化学反応解析**

**(生成熱・活性化エネルギー)**

V11.3.0

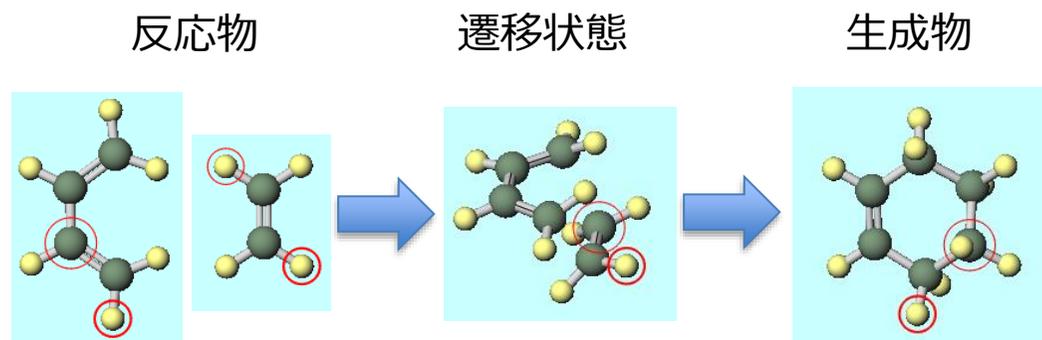
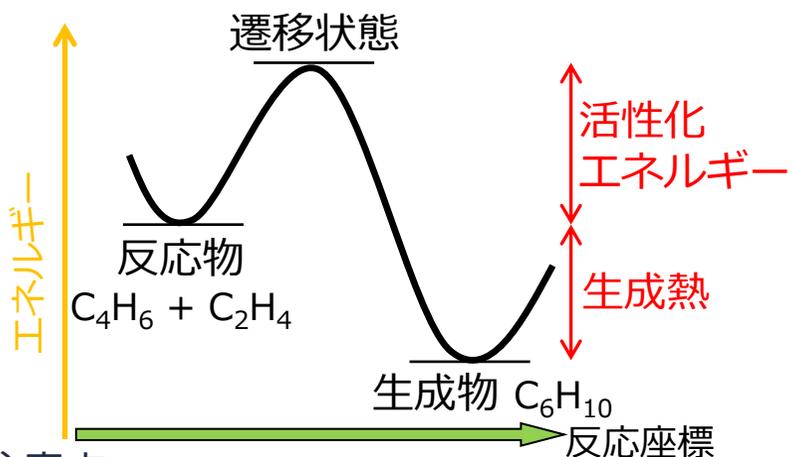
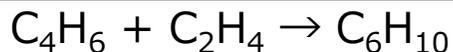
2022年10月1日 株式会社クロスアビリティ

# 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

ブタジエンとエチレンの真空中でのDiels-Alder反応( $C_4H_6 + C_2H_4 \rightarrow C_6H_{10}$ )における生成熱及び活性化エネルギーを、それぞれの構造のAM1法のエネルギー(この値はMOPAC定義の生成熱で、化学反応の生成熱とは異なる)から計算します。



注意点：

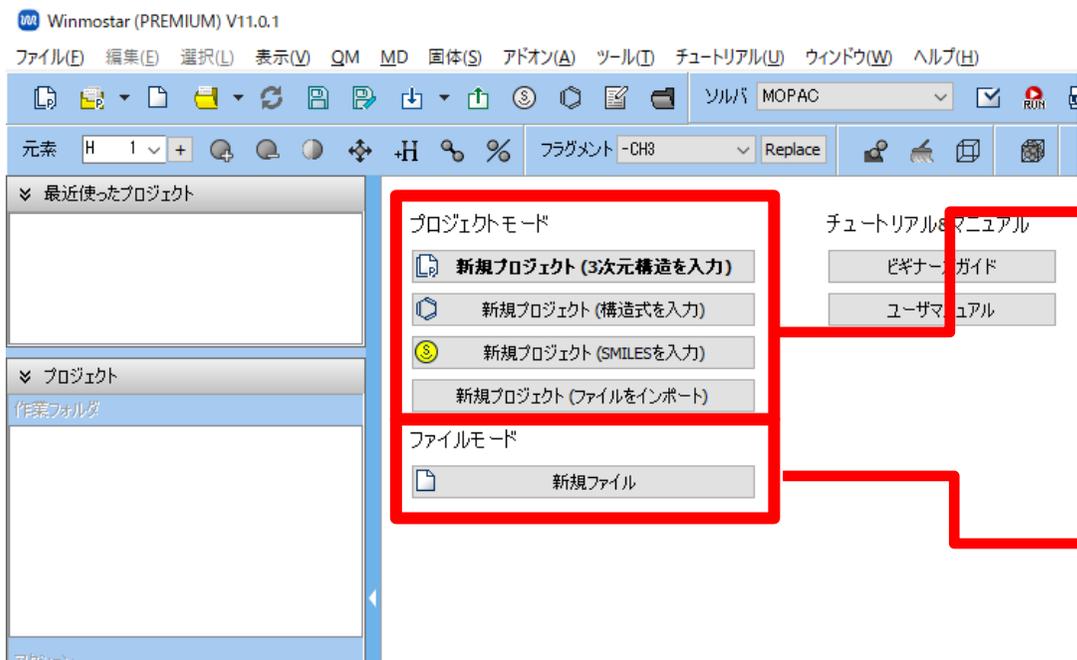
- 遷移状態の構造をある程度予測できる場合の計算例です。遷移状態構造が予測できない場合は、遷移状態・IRC計算チュートリアルを参考に計算してください。
- 本チュートリアルの計算は半経験的手法かつ真空中のため、精度の高い結果が欲しい場合は、GAMESS, NWChem, Gaussianを使用してください。
- 複数の遷移状態を経由する反応を調べる場合は、それぞれの素反応を個別に計算してください。

# 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[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。

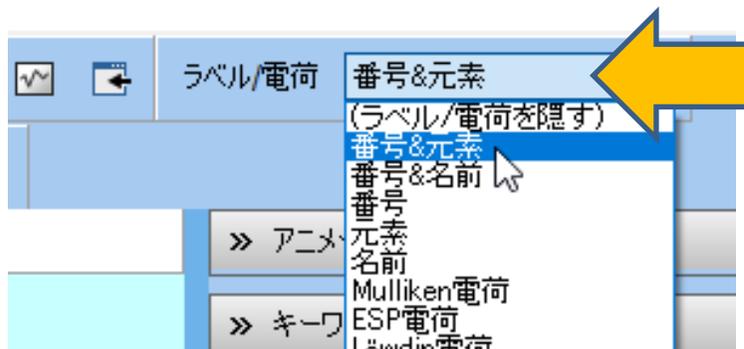
**ファイルモード**  
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

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

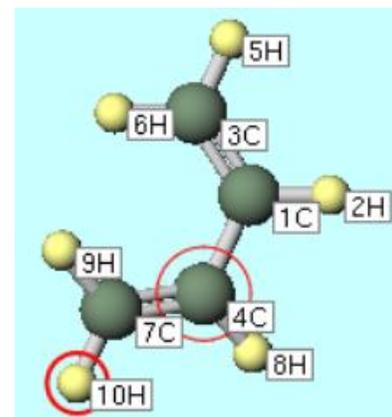
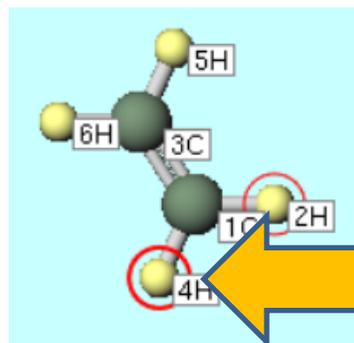
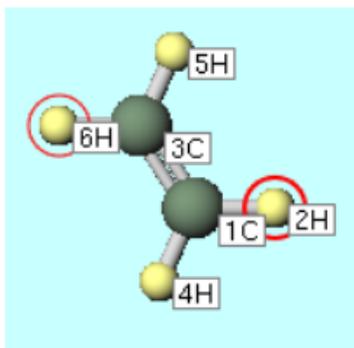
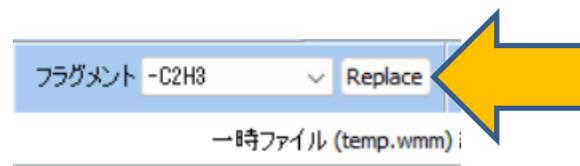
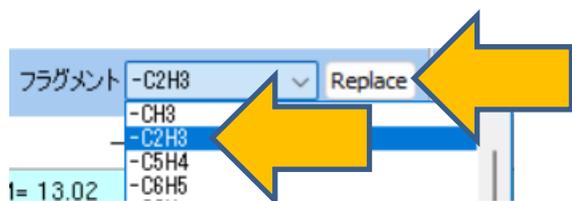
基本的な操作方法は[MOPAC基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

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「reaction\_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。



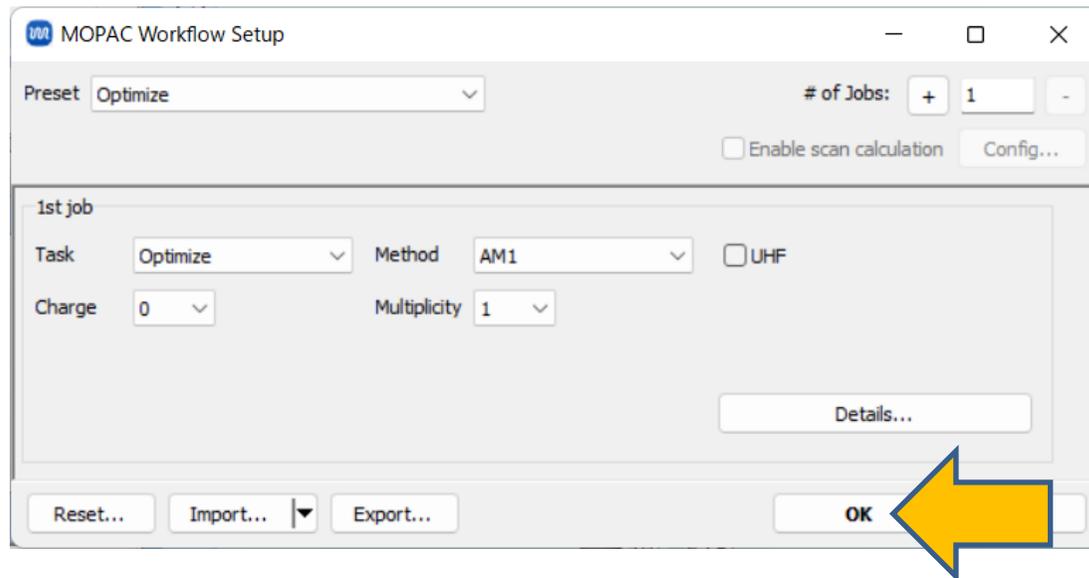
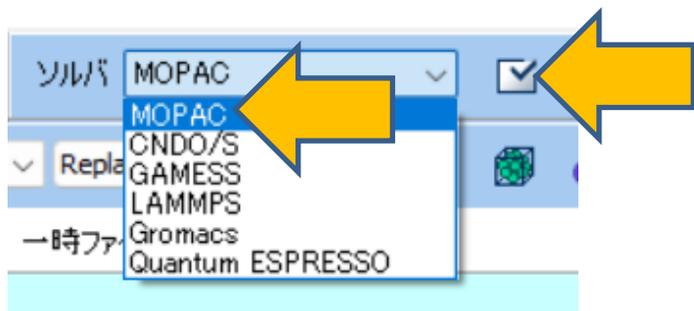
# I. 系のモデリング(ブタジエン)

1. フラグメントを-C2H3に変更してから**Replace**ボタンを1回クリックし、エチレンを作成します。
2. **4H**原子(黄色)をクリックして太い赤丸で選択された状態で、再度**Replace**ボタンを1回クリックし、cis-ブタジエンを作成します。



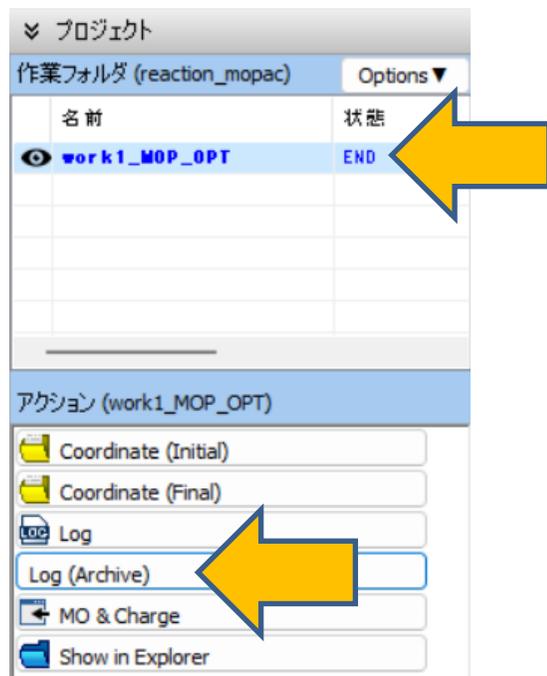
## II. 計算の実行(ブタジエン)

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. MOPAC Workflow Setupウィンドウで**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(ブタジエン)

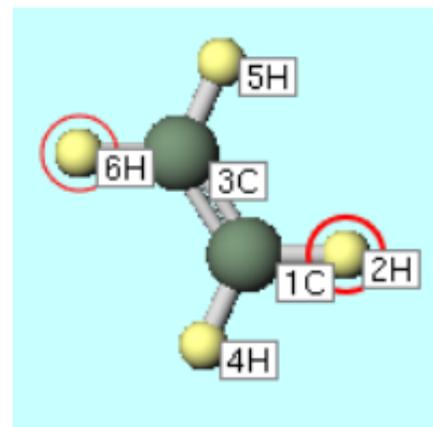
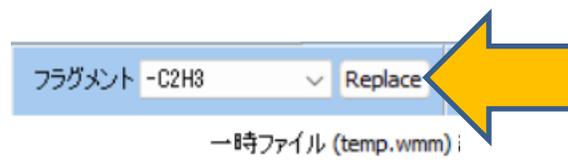
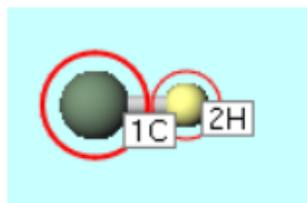
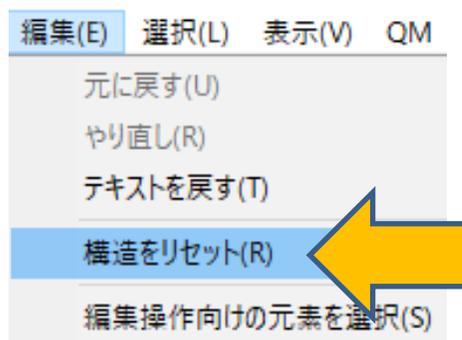
1. 計算が終了してwork1\_MOP\_OPTの作業フォルダの状態が**END**に変化した後、作業フォルダのwork1\_MOP\_OPTをクリックし、**アクション**の**Log (Archive)**をクリックします。
2. 開いたファイルの**HEAT OF FORMATION**の値(30.679782 kcal)をメモに取ります。



```
SUMMARY OF AM1 CALCULATION  
  
VERSION 6.03  
  
C4 H6  
26-Sep-22  
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK  
Winmostar  
  
GEOMETRY OPTIMISED USING EIGENVECTOR FOLLOWING (EF).  
SCF FIELD WAS ACHIEVED  
  
HEAT OF FORMATION = 30.679782 KCAL  
ELECTRONIC ENERGY = -1903.614291 EV  
CORE-CORE REPULSION = 1310.105669 EV
```

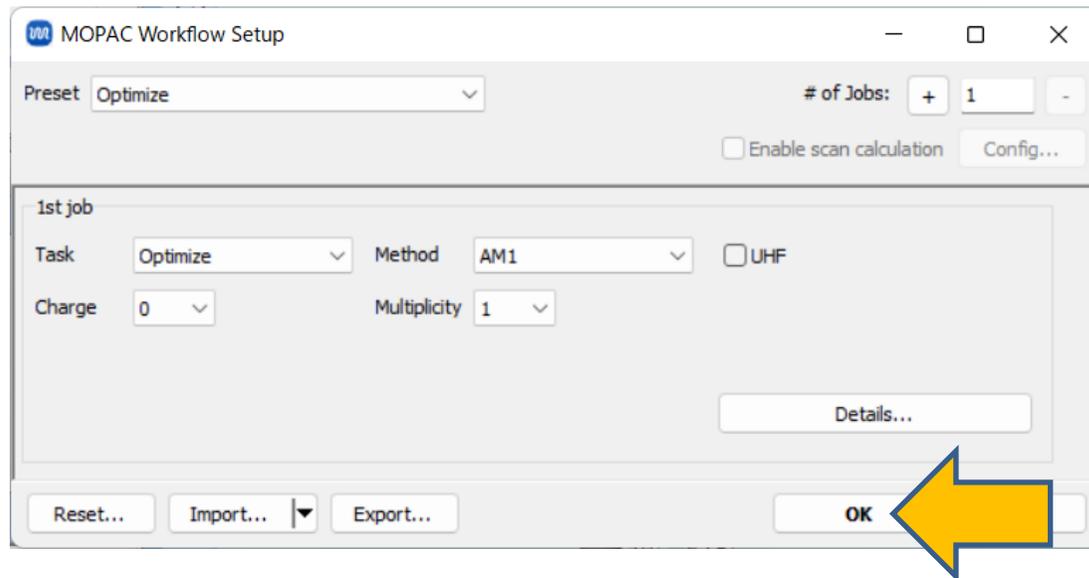
## IV. 系のモデリング(エチレン)

1. 編集 | 構造をリセットをクリックして、分子表示エリアを初期状態のCHの状態に戻します。
2. フラグメントが-C2H3の状態でReplaceボタンを1回クリックし、エチレンを作成します。



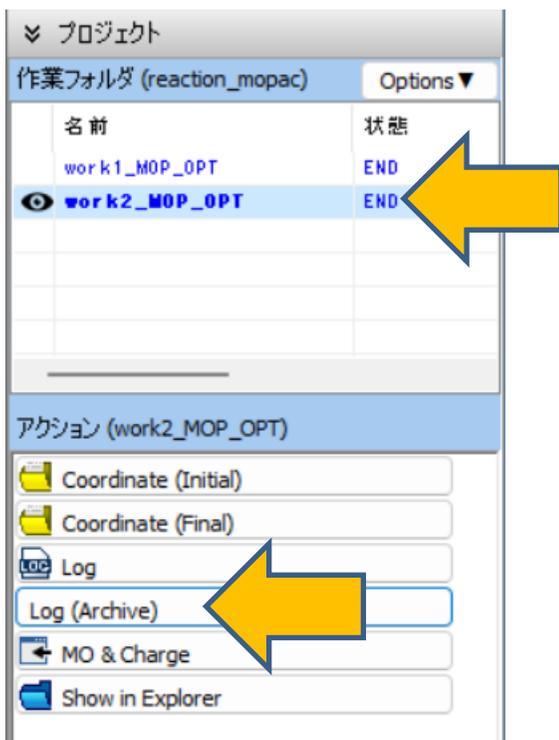
## V. 計算の実行(エチレン)

1. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。「**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. **MOPAC Workflow Setup**ウィンドウで**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。



# VI.結果解析(エチレン)

1. 計算が終了してwork2\_MOP\_OPT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\_MOP\_OPTをクリックし、**アクションのLog (Archive)**をクリックします。
2. 開いたファイルの**HEAT OF FORMATION**の値(16.471117 kcal)をメモに取りります。



```
SUMMARY OF AM1 CALCULATION  
  
VERSION 6.03  
  
C2 H4  
26-Sep-22  
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK  
Winmostar  
  
GEOMETRY OPTIMISED USING EIGENVECTOR FOLLOWING (EF).  
SCF FIELD WAS ACHIEVED  
  
HEAT OF FORMATION = 16.471117 KCAL  
ELECTRONIC ENERGY = -737.524822 EV  
CORE-CORE REPULSION = 427.163825 EV
```

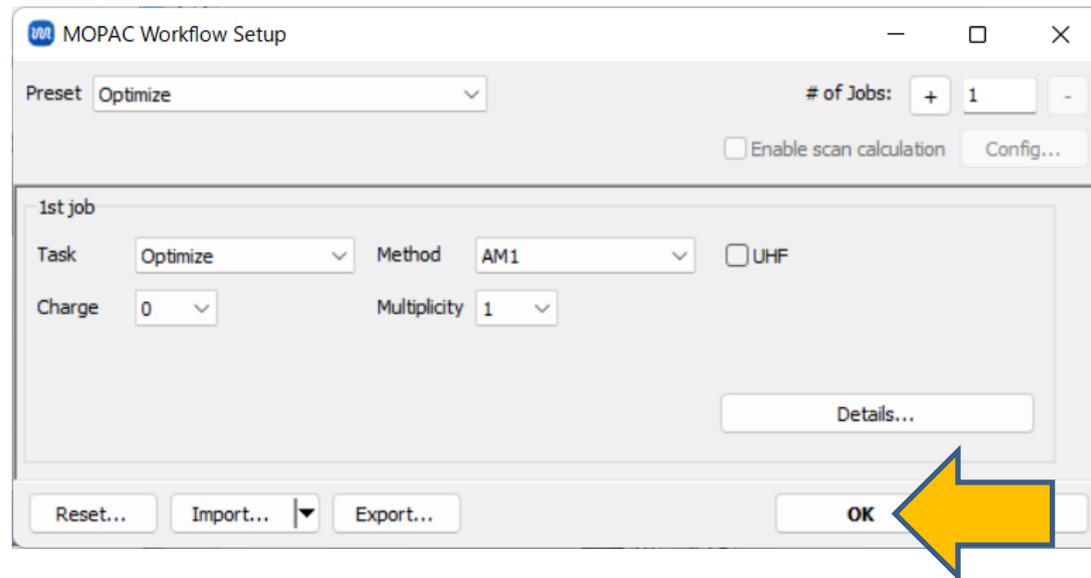
# VII.系のモデリング(シクロヘキセン)

1. 編集 | 構造をリセットをクリックします。
2. メインウィンドウ上部のフラグメントを選択から-CYCLOHEXYL(EQ)を選択し、Replaceボタンを1回クリックして、シクロヘキセンを作成します。
3. 13H, 15H原子(黄色)を続けてクリックして、原子を削除ボタンを2回クリックします。
4. 簡易構造最適化ボタンをクリックして、シクロヘキセンの初期構造を完成させます。

The image illustrates the software workflow for creating cyclohexene. It features a 'Edit' menu with 'Structure Reset' highlighted, a fragment list where '-CYCLOHEXYL(EQ)' is selected, and three molecular models. The first model shows a cyclohexane ring with atoms 13H and 15H highlighted in yellow. The second model shows the same ring with atoms 11H, 12H, 13H, 14H, 15H, and 16H highlighted in red. The third model shows the final cyclohexene structure with atoms 11H, 12H, 13H, 14H, 15H, and 16H highlighted in red.

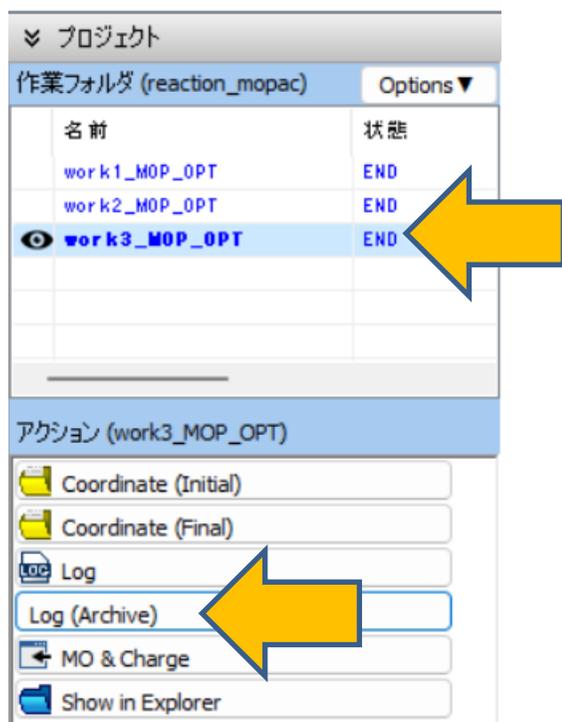
## VIII.計算の実行(シクロヘキセン)

1. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。「**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. **MOPAC Workflow Setup**ウィンドウで**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。



# IX. 結果解析(シクロヘキセン)

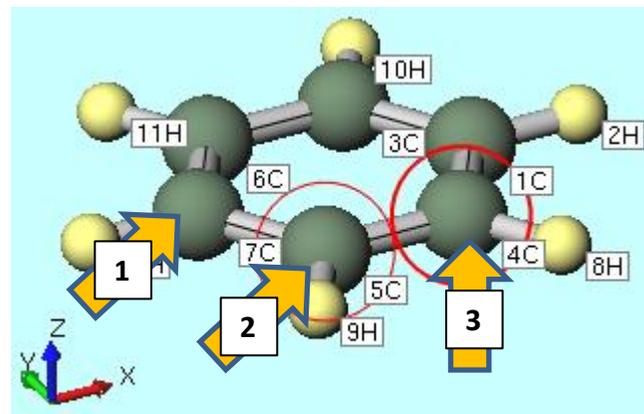
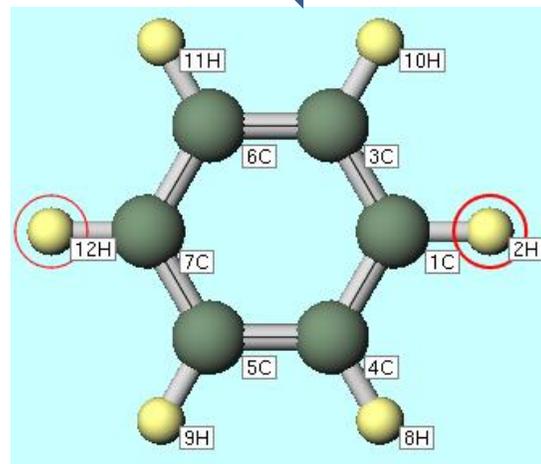
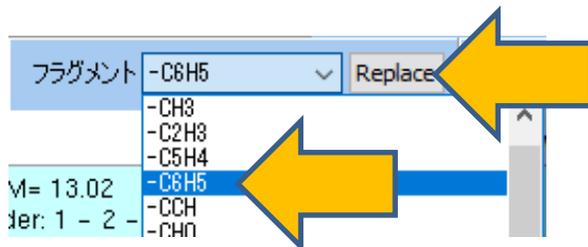
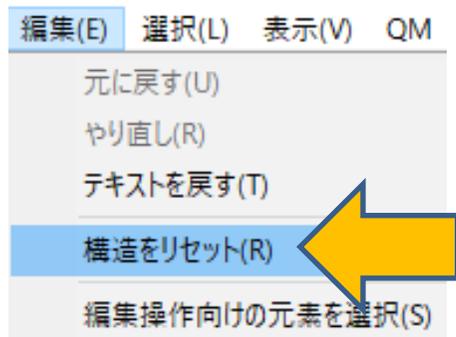
1. 計算が終了してwork3\_MOP\_OPTの作業フォルダの状態が**END**に変化した後、作業フォルダのwork3\_MOP\_OPTをクリックし、**アクション**の**Log (Archive)**をクリックします。
2. 開いたファイルの**HEAT OF FORMATION**の値(-10.058213 kcal)をメモに取ります。



```
SUMMARY OF AM1 CALCULATION  
  
VERSION 6.03  
  
C6 H10  
26-Sep-22  
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK  
Winmostar  
  
GEOMETRY OPTIMISED USING EIGENVECTOR FOLLOWING (EF).  
SCF FIELD WAS ACHIEVED  
  
HEAT OF FORMATION = -10.058213 KCAL  
ELECTRONIC ENERGY = -3952.986699 EV  
CORE-CORE REPULSION = 3046.636307 EV
```

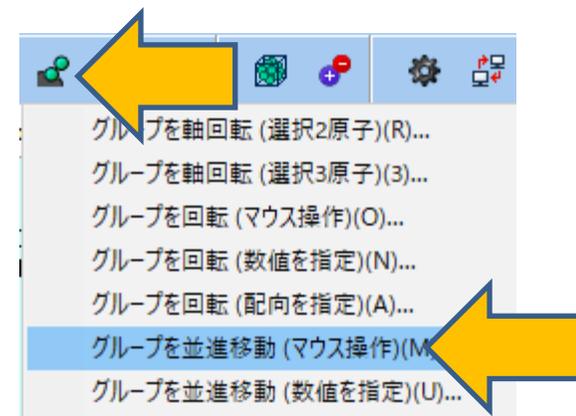
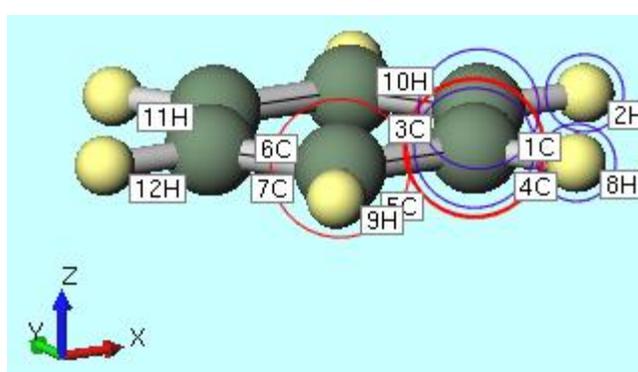
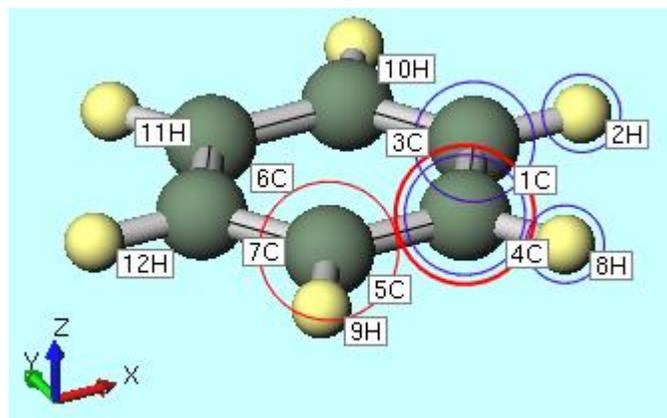
# X. 系のモデリング(遷移状態(TS))

1. 編集 | 構造をリセットをクリックします。
2. メインウィンドウ上部のフラグメントを選択から-C6H5を選択し、Replaceボタンを1回クリックし、ベンゼンを作成します。
3. 分子の近く(水色)をクリックしたままマウスを動かして、右下の図の向きになるように分子を回転させます。
4. この後の操作で結合長と角度を確認するため、7C, 5C, 4Cの順にクリックします。



# X. 系のモデリング(遷移状態(TS))

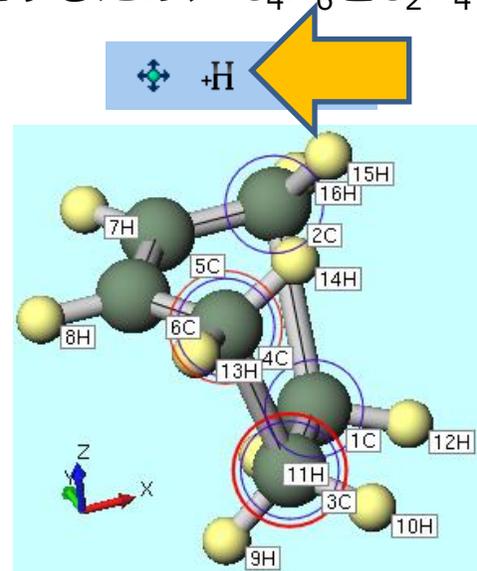
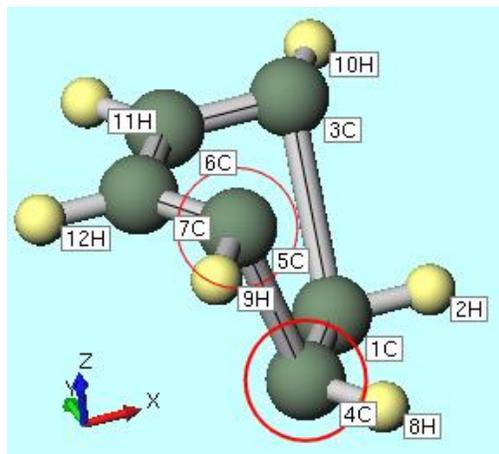
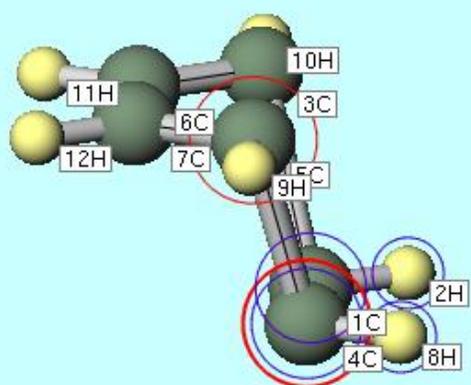
1. **Ctrl**を押しながら**1C, 2H, 4C, 8H**原子をクリックして青丸のグループ選択状態にします。
2. 分子の近くをクリックしたままマウスを動かして、中央の図の向きになるように再度分子を回転させます。
3. **グループ編集**をクリックし、**グループを並進移動(マウス操作)**を選択します。



# X. 系のモデリング(遷移状態(TS))

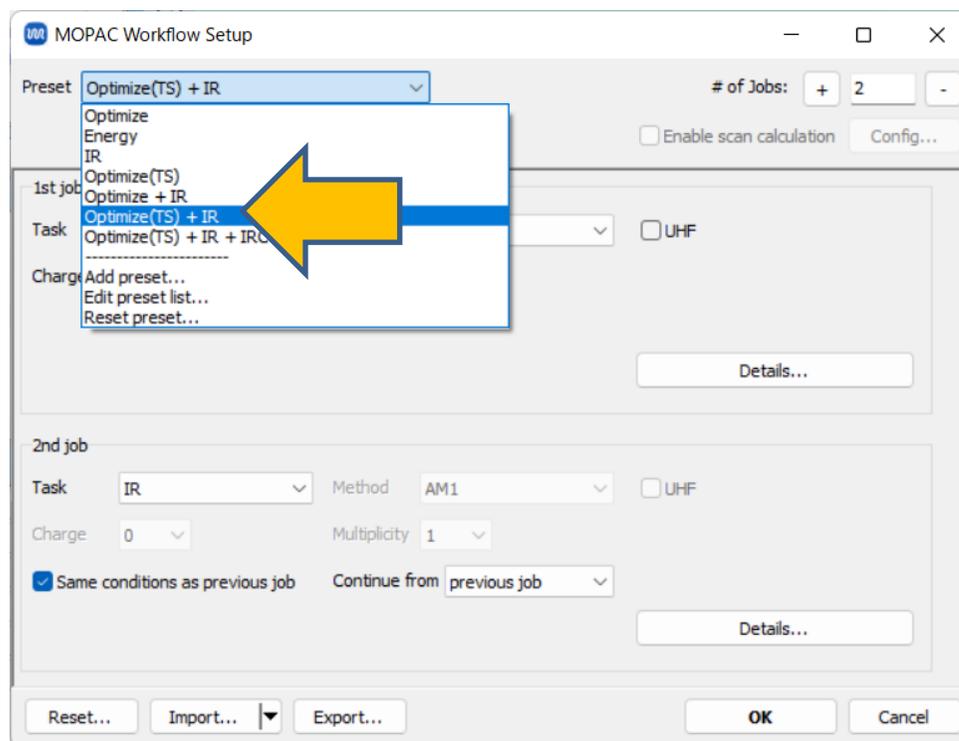
1. Diels-Alder反応での2分子間の $\pi$ 軌道の重なりを考慮に入れながら、ブタジエンとエチレンの炭素骨格を配置します。画面をドラッグして左下の図のように、Lengthが2.0 Å、Angleが100°程度になるようにC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>部分を移動させます。遷移状態の初期構造作成が目的のため、値を厳密に合わせる必要はありません。
2. 分子の近くを一度クリックしてグループ選択の青丸を解除した後、分子の近くをクリックしたままマウスを動かして、中央下図の向きになるように再度分子を回転させます。
3. **Ctrl**を押しながら**1C, 3C, 4C, 5C**原子をクリックして青丸でグループ選択した状態で、**選択原子に水素を付加**を1回クリックします。これで遷移状態計算の初期構造が完成します。MOPACでは内部でxyz座標に変換してエネルギー等の計算をするため、C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>とC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>の間に結合が残っていても問題はありません。

Length= 2.01789 Angle= 100.13708 Dihedral= -  
Group Selection: 4 Atoms (C2H2)



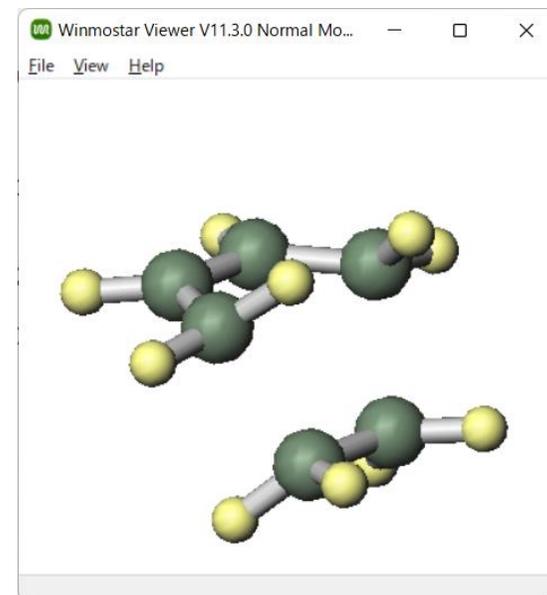
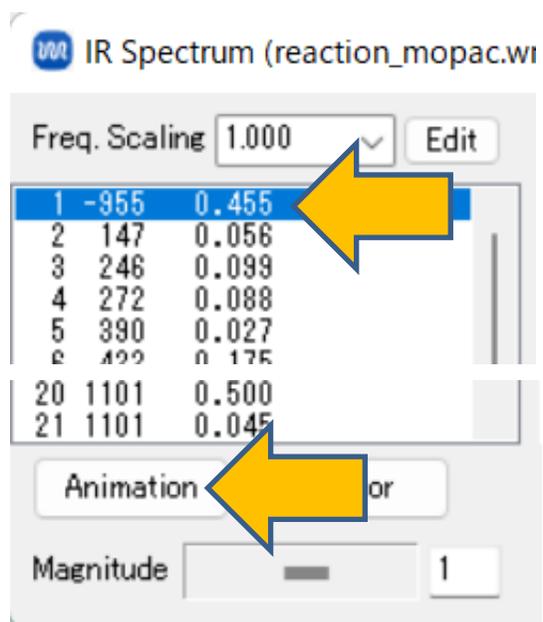
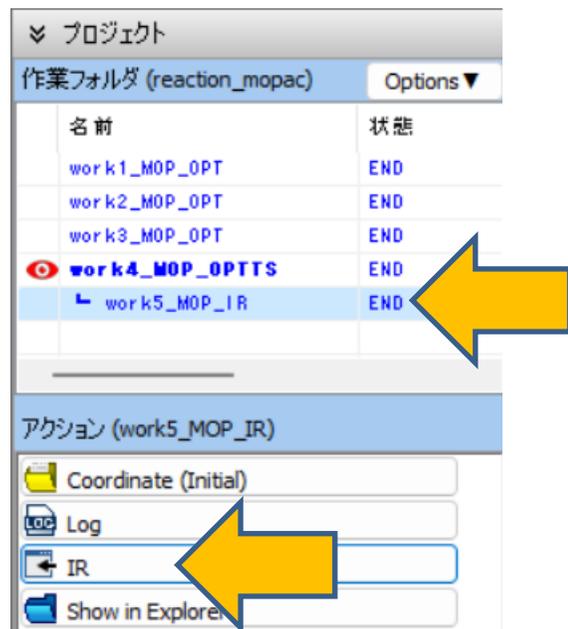
# XI. 計算の実行(遷移状態(TS))

1. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。「**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. **MOPAC Workflow Setup**ウィンドウの**Preset**で**Optimize(TS) + IR**を選択して、**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。



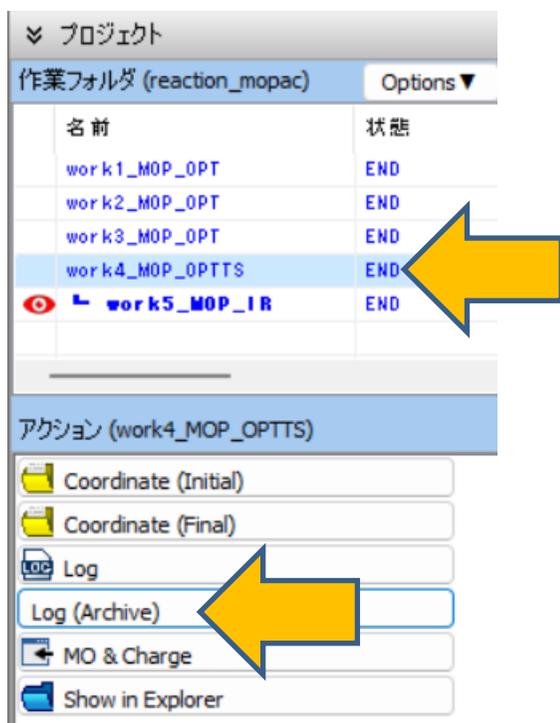
## XII. 結果解析(遷移状態(TS))

1. 計算が終了してwork5\_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work5\_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。ブタジエンとエチレンの炭素間の振動が表示されれば、求めたい遷移状態が得られたことを意味します。
4. 確認後**IR Spectrum**ウィンドウで**Close**をクリックします。



## XII.結果解析(遷移状態(TS))

1. **work4\_MOP\_OPTTS**をクリックし、**アクション**の**Log (Archive)**をクリックします。
2. 開いたファイルの**HEAT OF FORMATION**の値(70.150030 kcal)をメモに取ります。



```
SUMMARY OF AM1 CALCULATION
                                VERSION 6.03

C6 H10
                                26-Sep-22
AM1 TS PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK
Winmostar

GEOMETRY OPTIMISED USING EIGENVECTOR FOLLOWING (EF).
SCF FIELD WAS ACHIEVED

HEAT OF FORMATION = 70.150030 KCAL
ELECTRONIC ENERGY = -3866.215019 EV
CORE-CORE REPULSION = 2963.342717 EV
```

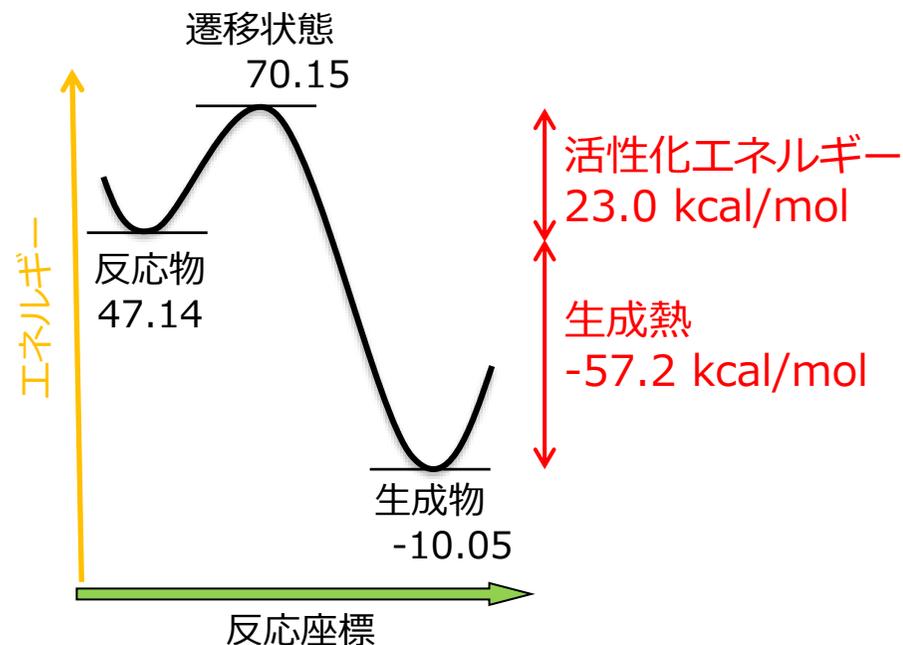
# XIII.反応エネルギー計算

(生成熱) = (生成物エネルギー) - (反応物エネルギー)

(活性化エネルギー) = (遷移状態エネルギー) - (反応物エネルギー)

で計算します。この反応AM1法では57.2 kcal/molの発熱反応であり、遷移状態を超えるための活性化エネルギーは23.0 kcal/molとなります。

	エネルギー(kcal/mol)
反応物	$30.67 + 16.47 = 47.14$
遷移状態	70.15
生成物	-10.05
生成熱	$-10.05 - 47.14 = -57.2$
活性化エネルギー	$70.15 - 47.14 = 23.0$



# 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