

 winmostar チュートリアル

Gaussian

化学反応解析（遷移状態・IRC計算）

V10.1.3

2020年5月14日 株式会社クロスアビリティ

本書について

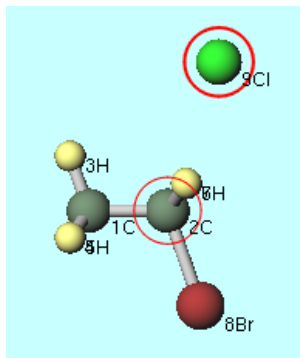
- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - [個別講習会](#)：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

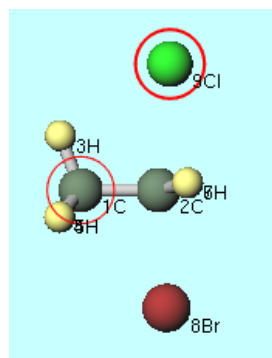
ブromoエタン($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$)と Cl^- イオンの真空中での化学反応について、TS(遷移状態、Transition State)構造とIRC(固有反応座標、Intrinsic Reaction Coordinate)計算を次の手順で実行します。

1. C-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。

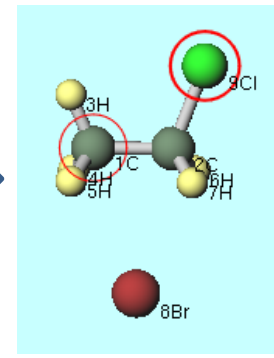
スキャン始状態



遷移状態



スキャン終状態

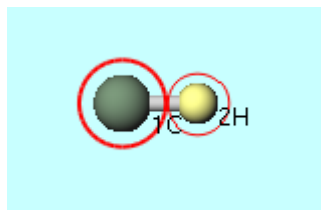
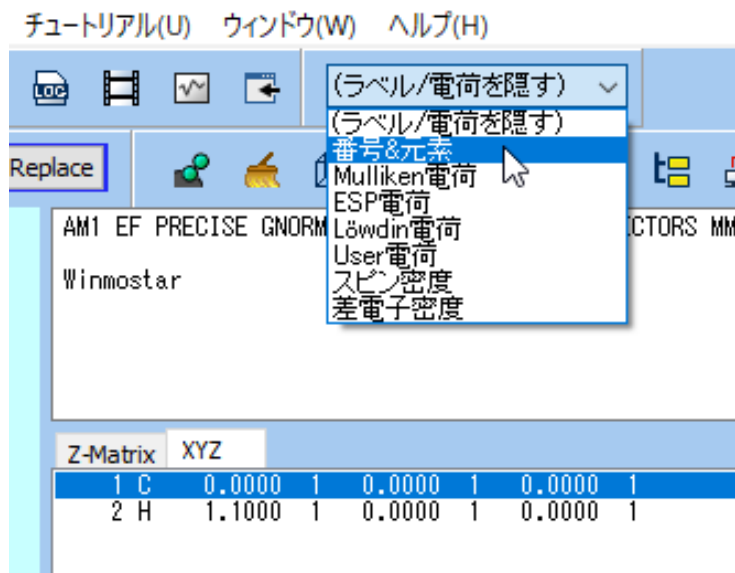


注意点：

- 本チュートリアルでの計算方法はB3LYP/6-31G*です。V10のデフォルトの計算方法は、V9までのHF/STO-3GからB3LYP/6-31G*に変わりました。
- 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。

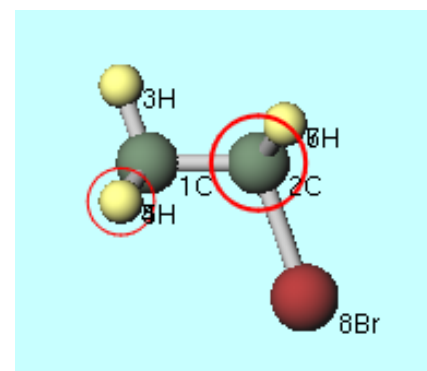
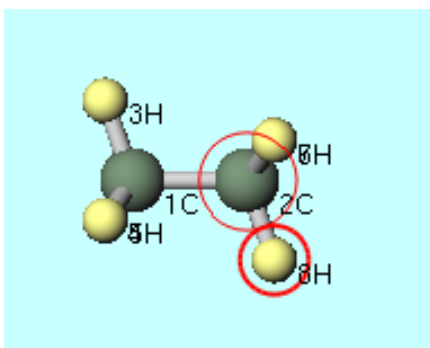
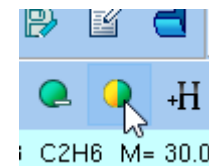
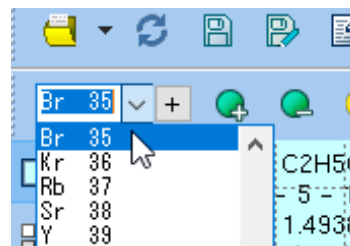
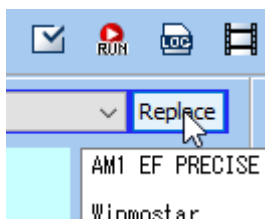
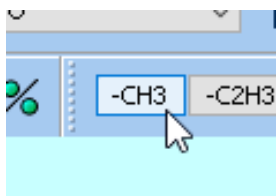
I. モデルの作成

1. Winmostarを起動し、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する。



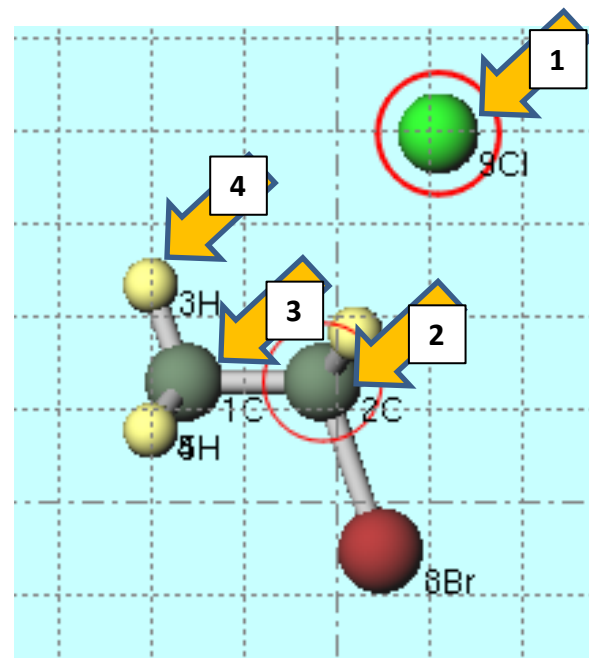
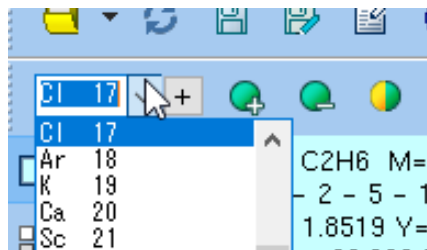
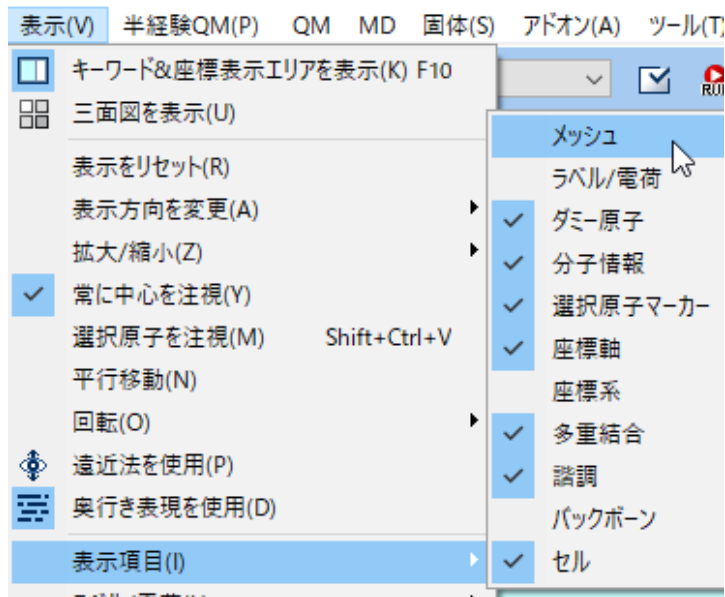
I. モデルの作成

1. メインウィンドウ上部の**-CH3**ボタンをクリックし、その右にある**Replace**ボタンを2回クリックし、エタンを作成する。
2. **8H**の原子が赤丸で選択された状態で、メインウィンドウ上部の**編集操作向けの元素を選択**メニューから **Br 35**を選択する。次に、**元素を変更**ボタンをクリックし、ブromoエタンを作成する。



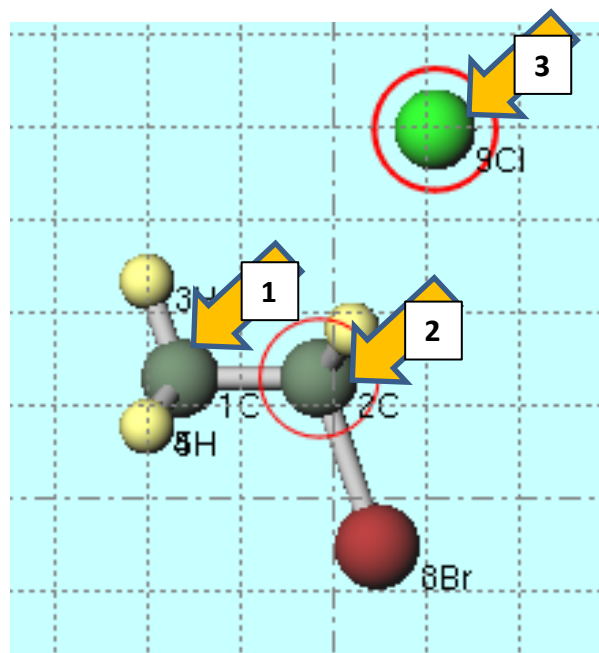
I. モデルの作成

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する。
2. メインウィンドウ上部の**編集操作向けの元素を選択**メニューから**Cl 17**を選択する。
3. **編集 | 原子を追加 | 座標と結合関係を指定**メニューをクリックし、下図の緑色の原子のあたりをクリックして**Cl**原子を置く。**2C**、**1C**、**3H**の原子をクリックし、**Cl**原子がZ-Matrix上で接続する原子を指定する。



I. モデルの作成

1. **1C→2C→9Cl**と順番に続けてクリックして選択する。
2. メインメニューから**編集 | 選択原子の距離/角度を変更 | 距離**を選択する。開いたダイアログで「2.7」と入力しOKボタンを押すと、**2C-9Cl**間の距離が2.7 Åに変更される。
3. メインメニューから**編集 | 選択原子の距離/角度を変更 | 角度**を選択する。開いたダイアログで「109」と入力し**OK**ボタンを押すと、**1C-2C-9Cl**間の角度が109°に変更される。



Change Distance ×

Enter Distance [Å]

OK

Cancel

Change Angle ×

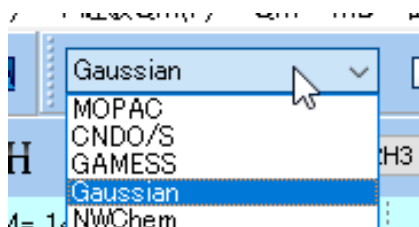
Enter Angle [deg]

OK

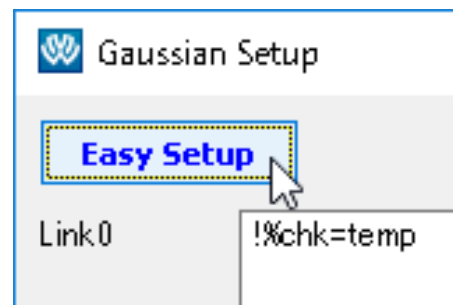
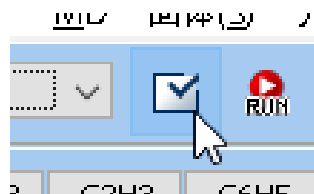
Cancel

II. スキャン計算

1. ソルバを選択メニューで**Gaussian**を選択する。
2. 分子表示エリア左上の**Marked Order**が「**9-2-*-***」となり、スキャンしたい自由度（**9CI**と**2C**）が選ばれていることを確認する。違う場合は**2C**→**9CI** と左クリックする。
3. **キーワード設定**ボタンを押す。開いた**Gaussian Setup**ウィンドウで、**Easy Setup**ボタンをクリックする。

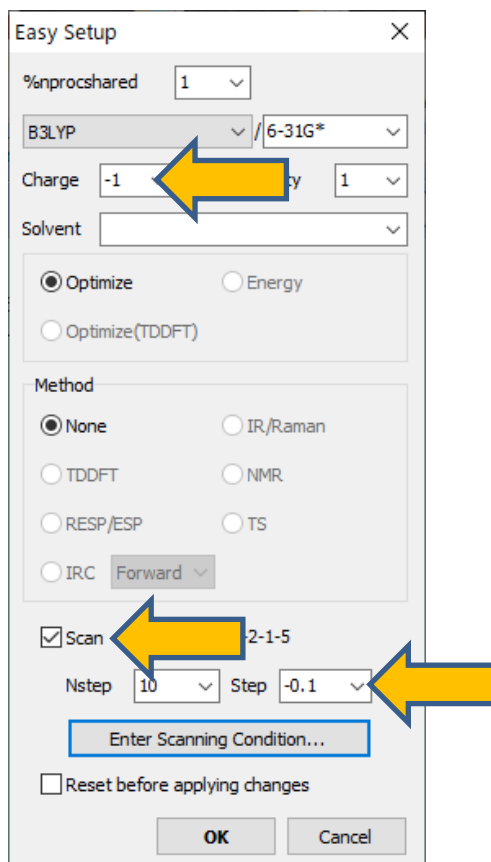


```
Winmostar N= 9 C2H5BrCl M= 144.42  
Marked Order: 9 - 2 - 1 - 3  
Marked Atom: X= 2.4705 Y= 2.8366 Z= 0 Br  
Length= 3 Angle= 109 Dihedral= 0 Lper= 0
```



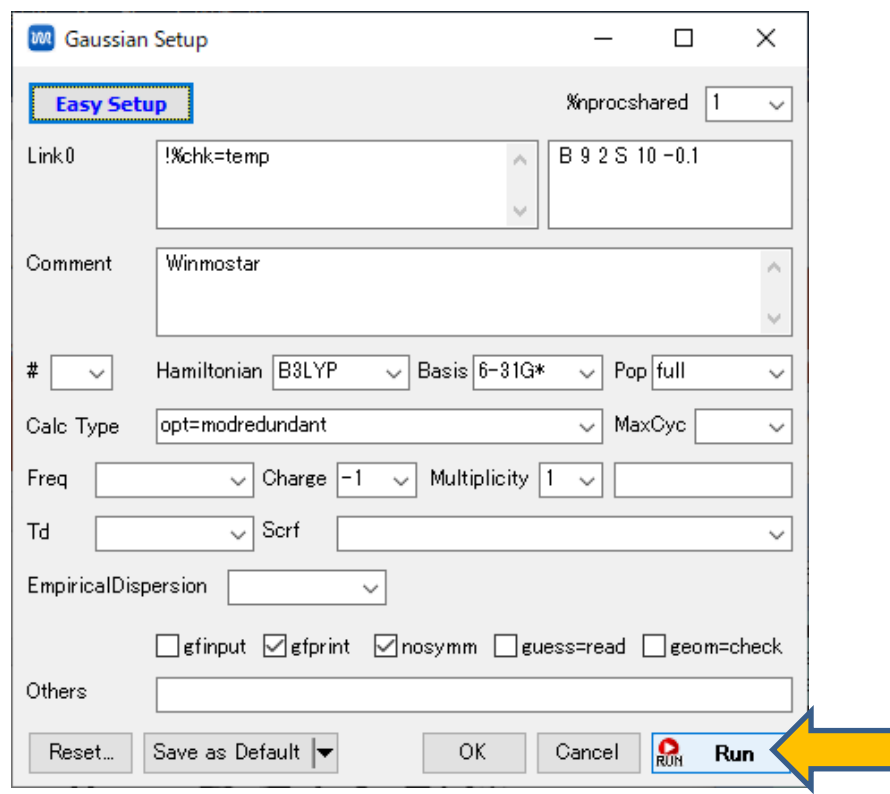
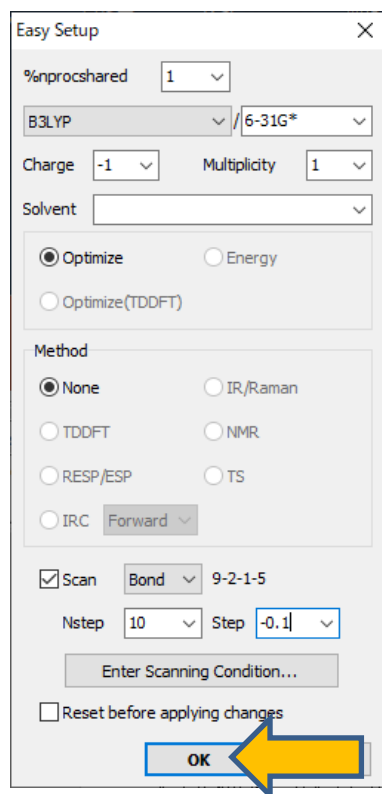
II. スキャン計算

1. **Easy Setup**ウィンドウで、**Charge**では**-1**を選択する。
2. **Scan**にチェックを入れ、**Step**では**-0.1**を選択する。これで、**9Cl**と**2C**の距離を0.1 Åずつ短くした構造最適化計算を10回繰り返す入力となる。これらの構造最適化では、**9Cl**と**2C**の距離のみ固定して行われる。



II. スキャン計算

1. **Easy Setup**ウィンドウを**OK**ボタンで閉じる。
2. **Gaussian Setup**ウィンドウでは**Run**ボタンを押す。
3. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（ここではファイル名は「scan」とする）、**保存**ボタンを押すとファイルが保存され、黒いウィンドウが開きGaussianの処理が開始される。



II. スキャン計算

1. メインウィンドウ上部の**アニメーション**ボタンから**IRC/modred**をクリックし、デフォルトで選択されるファイル (scan.log) を開く。
2. 開いた**Animation**ウィンドウで、エネルギー極大値となる4番目のフレームを選択する (下図参照)。カメラ位置が回転することがあるので、見やすくしたい場合は適当に構造を回転させる。その後**Animation**ウィンドウを閉じる。

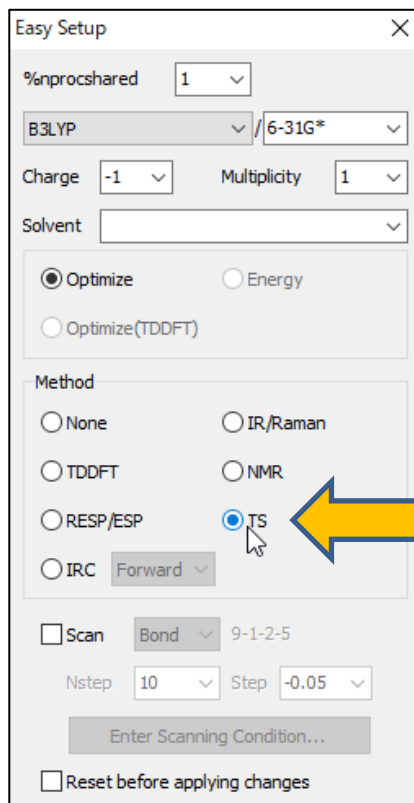
The image displays two screenshots from the winmostar software. The top-left screenshot shows the main window's toolbar with the 'Animation' button (represented by a film strip icon) highlighted. Below it, the 'Animation' menu is open, showing options like '構造最適化(Z)...' and 'IRC/modred...'. The bottom-right screenshot shows the 'Animation (4 of 11 frames)' window. The main window displays a ball-and-stick model of a molecule with atoms labeled 3H, 1C, 6H, 2C, 7H, 9Cl, and 8Br. The 'Animation' window shows a list of energy values for 11 frames, with the 4th frame selected. The energy values are:

Frame	Energy (E(RB3LYP))
1	-3111.20161746 8
2	-3111.19846480 8
3	-3111.19552461 8
4	-3111.19421569 7
5	-3111.19502699 9
6	-3111.19710668 7
7	-3111.19983798 7
8	-3111.20252985 6
9	-3111.20404371 7
10	-3111.21029251 8
11	-3111.20302098 7


The 'Animation' window also shows a plot of energy versus frame number, with the 4th frame highlighted. The plot shows a peak at frame 4 with an energy value of 0.460400129. The 'Result' field indicates 'Optimization completed.' and the 'Plot' column is set to 5.

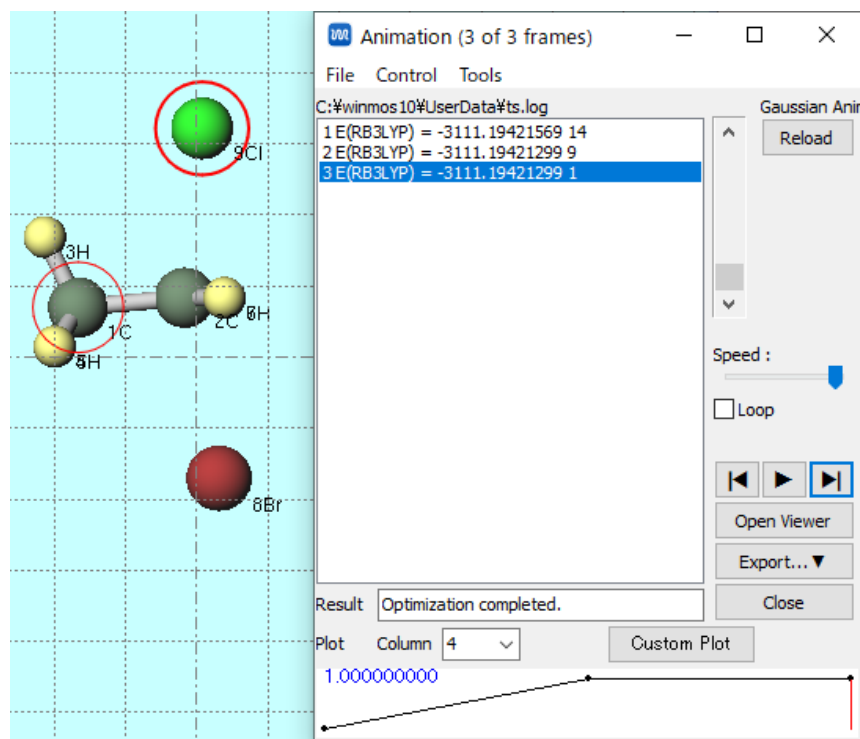
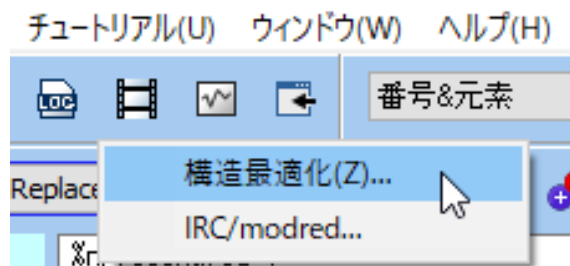
III. 遷移状態(TS)構造最適化+振動計算

1. 再び**キーワード設定**ボタン→**Easy Setup**ボタンをクリックする。
2. **Method**に**TS**を選択し、**Easy Setup**ウィンドウを**OK**ボタンで閉じる。TS計算を選択すると、TS構造最適化計算後に振動計算も同時に行うよう設定されている。
3. **Gaussian Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックし、ファイル名「ts」として計算を開始する。



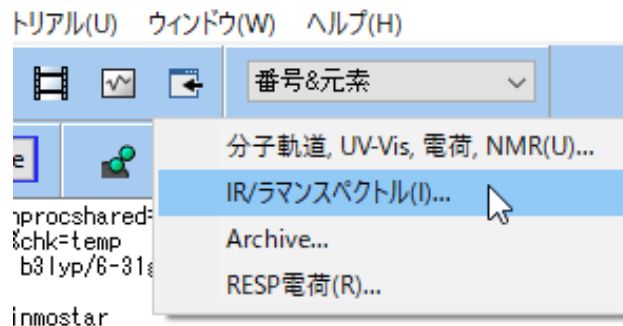
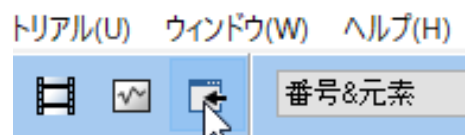
III. 遷移状態(TS)構造最適化+振動計算

1. メインウィンドウ上部の**アニメーション|構造最適化**ボタンをクリックし、デフォルトで選択されるファイル (ts.log) を開く。
2. 開いた**Animation**ウィンドウで、**Go to Last Frame**  ボタンを押し最終構造を表示する。最終構造のエネルギーが遷移状態の分子のエネルギーである。
3. **Close**ボタンを押し**Animation**ウィンドウを閉じる。



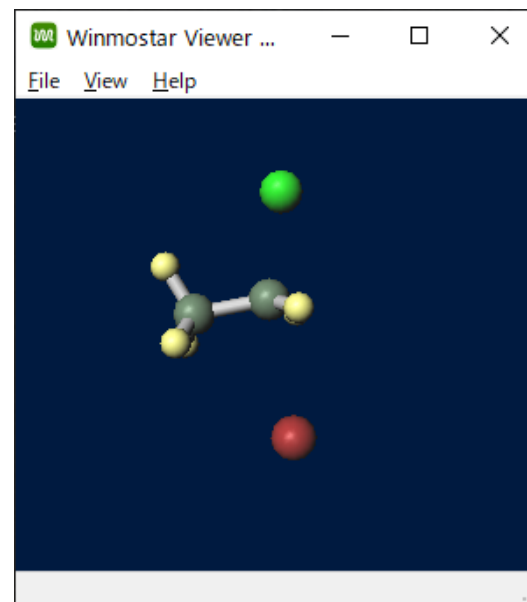
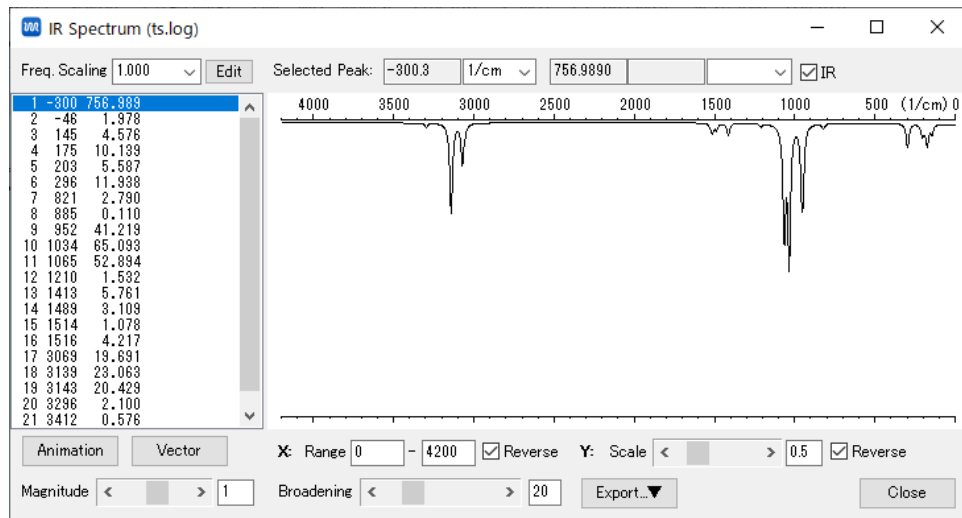
III. 遷移状態(TS)構造最適化+振動計算

1. メインウィンドウの**結果解析**ボタンから**IR/ラマンスペクトル**をクリックする。
2. 「変更を保存しますか？」と警告ウィンドウが出るので、**いいえ**をクリックして、デフォルトで選択されるファイル (ts.log) を開く。



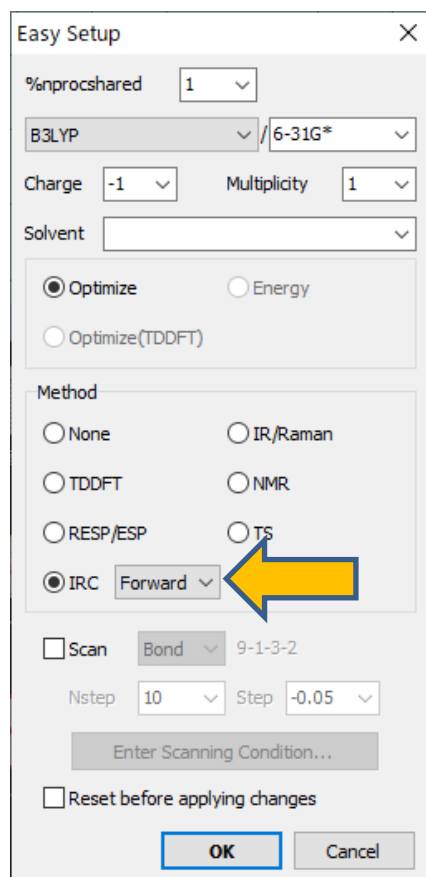
III. 遷移状態(TS)構造最適化+振動計算

1. 開いたIR/Raman Spectrumウィンドウ左のリストで、虚の振動数 (-300、表示上はマイナス) が1つしかなく、最適化された構造が遷移状態であることを確認する。
2. 虚の振動数の行を選択し、**Animation**ボタンをクリックする。Winmostar Viewerが起動して、振動方向に原子を変異させたアニメーションが表示される。確認後、Winmostar ViewerとIR Spectrumウィンドウを閉じる。



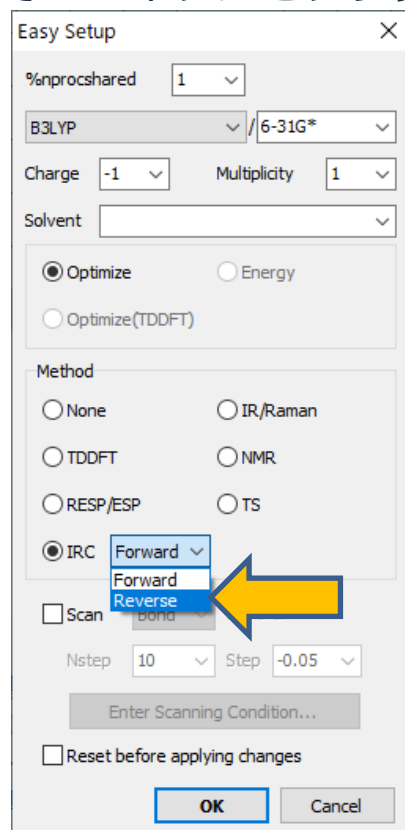
IV.IRC計算

1. 再び**キーワード設定**ボタン→**Easy Setup**ボタンをクリックする。
2. **Method**では**IRC**を選択し、**Easy Setup**ウィンドウを**OK**ボタンで閉じる。
3. **Gaussian Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックし、ファイル名「irc_f」として計算を開始する。



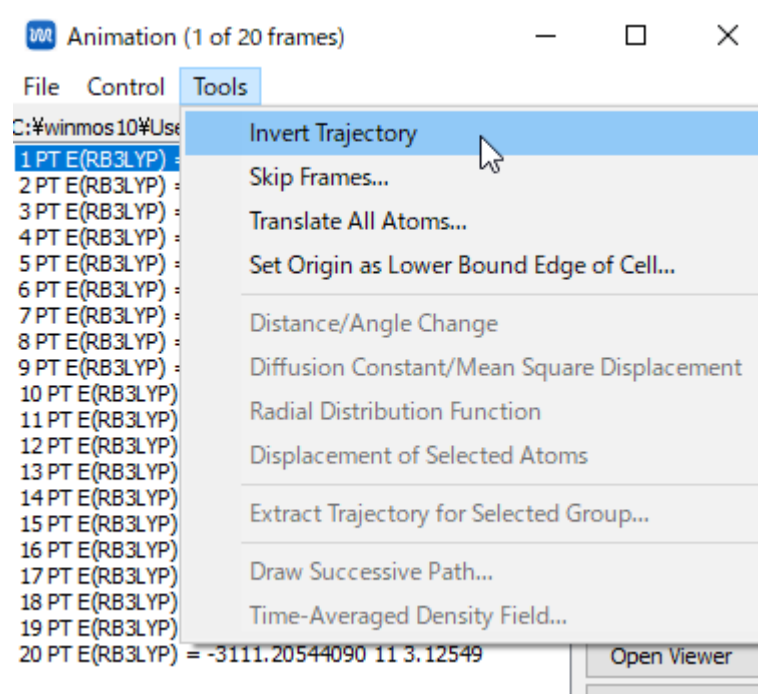
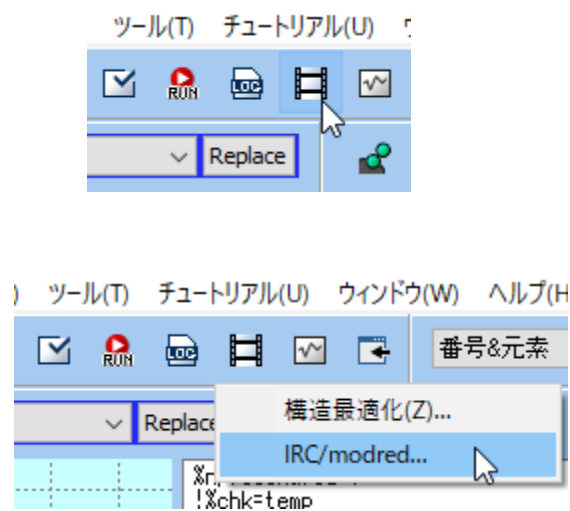
IV. IRC計算

1. 続けて、TSの構造がメインウィンドウに出現した状態のまま、再び**キーワード設定ボタン** → **Easy Setup**ボタンをクリックする。
2. **Method**では**IRC**を選択し、今度は横のプルダウンで**Reverse**を選択して、**OK**ボタンで閉じる。
3. **Gaussian Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックし、ファイル名「irc_r」として計算を開始する。



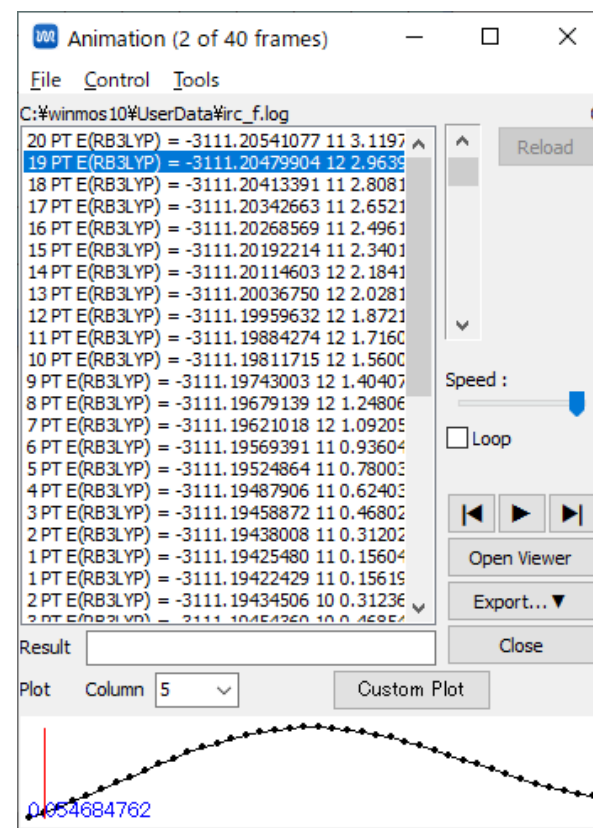
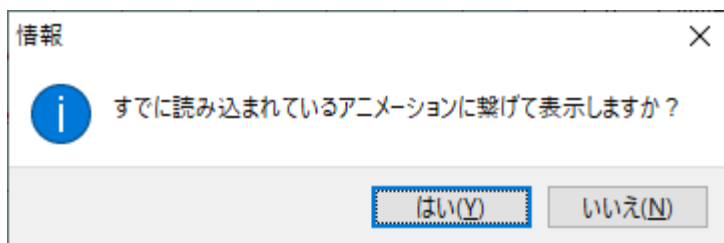
IV. IRC計算

1. 計算終了後、**アニメーション**ボタンから**IRC/modred**をクリックする。ここでは、IRC (Forward) 計算のlogファイル (irc_f.log) を選択する。IRCのForwardとReverseの向きは Gaussian内で自動的に決まるので、考えている反応に適した順番でIRCのファイルを読む。
2. そして、AnimationウィンドウのTools | Invert Trajectoryメニューをクリックし、アニメーションを反転させる。



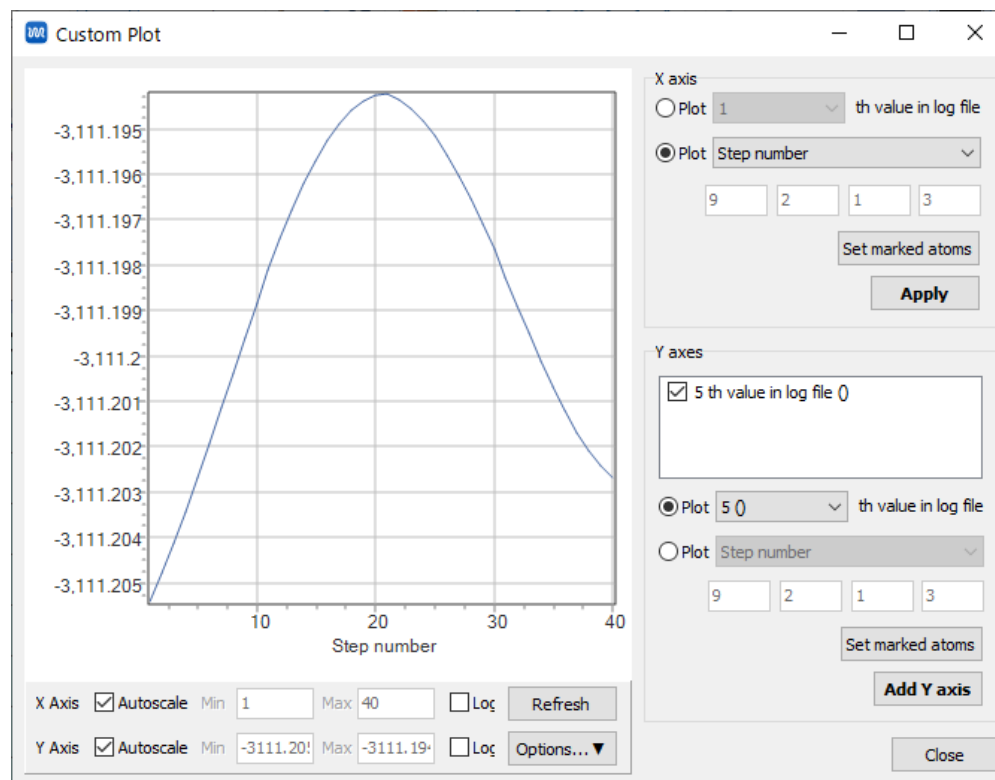
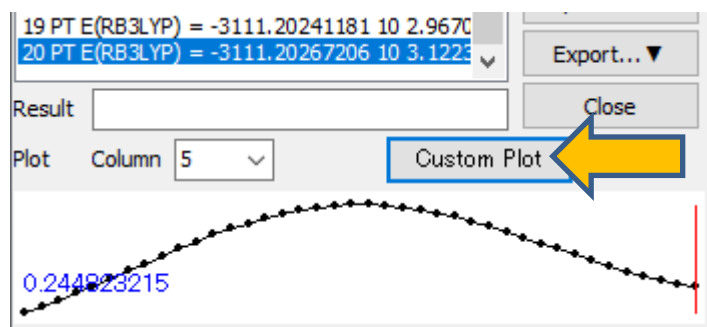
IV.IRC計算

1. **Animation**ウィンドウが開いた状態で、再び**アニメーション**ボタンから**IRC/modred**をクリックする。「変更を保存しますか？」と聞かれたら**いいえ**をクリックして、IRC計算 (Reverse) のlogファイル (irc_f.log) を開く。
2. 「**すでに読み込まれているアニメーションに繋げて表示しますか？**」と聞かれたら**はい**をクリックする。すると、両方向のIRC計算の結果が接続されたアニメーションを表示できるようになる。
3. 一連のアニメーションを見て、反応経路を確認する。



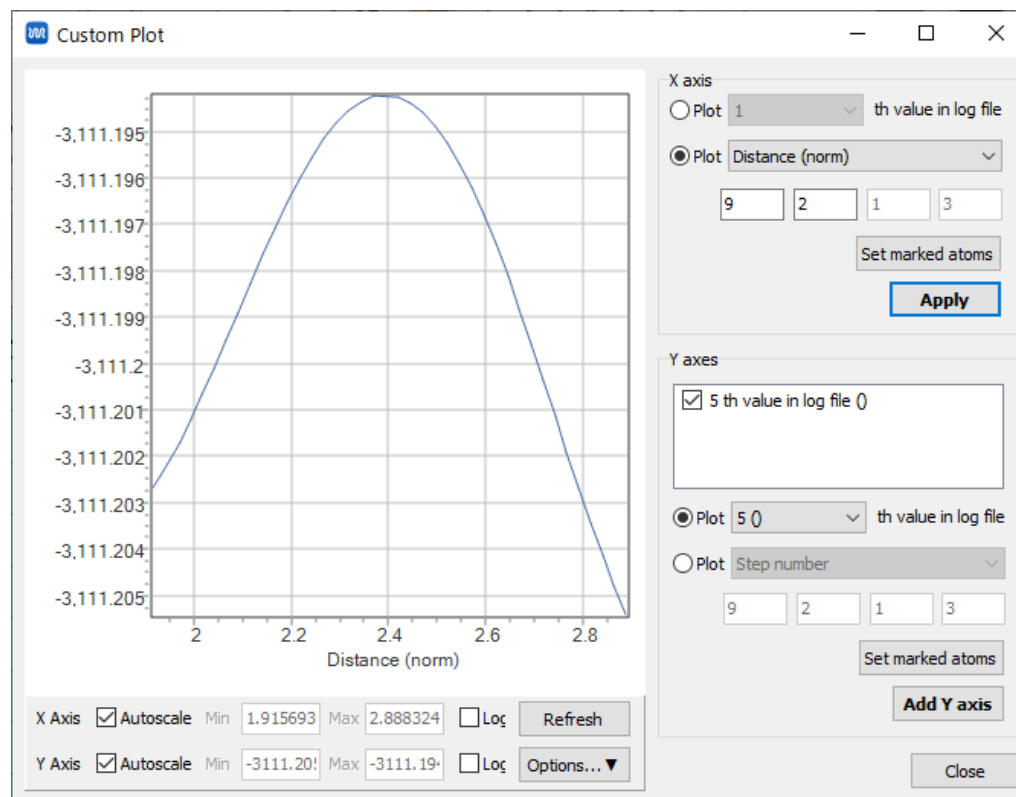
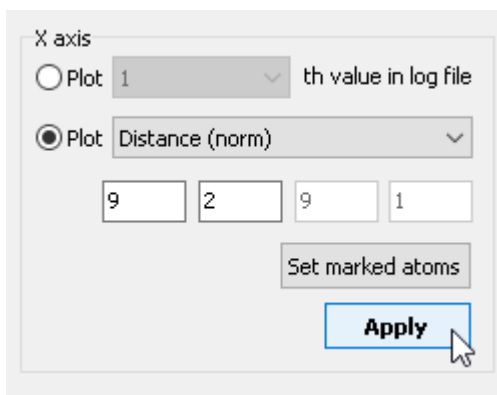
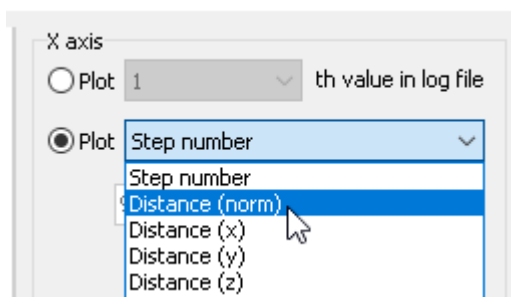
IV. IRC計算

1. 9CI-2C間の距離を反応座標としたときのエネルギー変化をプロットする。メインウィンドウで9CI→2Cを続けて左クリックする。
2. AnimationウィンドウでCustom Plotボタンをクリックすると、Custom Plotウィンドウが開く。Animationウィンドウが隠れたり、閉じてしまった場合は、メインウィンドウのウィンドウメニューからAnimationをクリックする。



IV. IRC計算

1. Custom Plotウィンドウ右のX axisのPlot Step numberをDistance (norm)に変更して、Applyボタンをクリックする。すると、9CI-2C間の距離を反応座標としたときのエネルギー変化が出現する。



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