

 winmostar チュートリアル

MOPAC

二面角スキャン計算

V10.7.3

2022年2月21日 株式会社クロスアビリティ

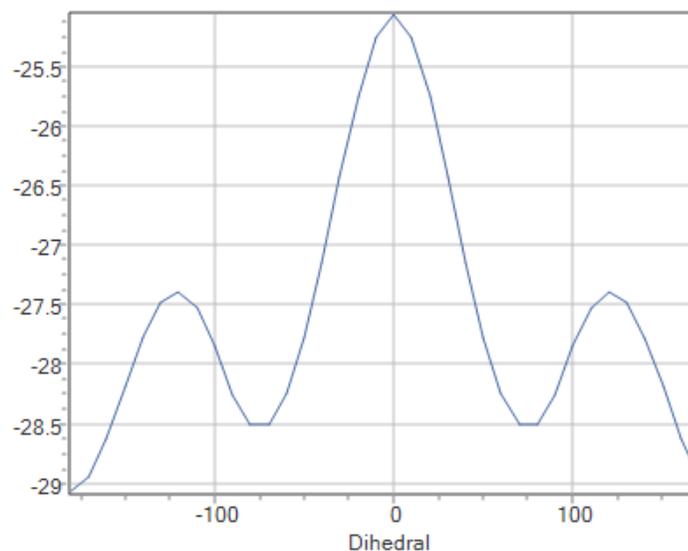
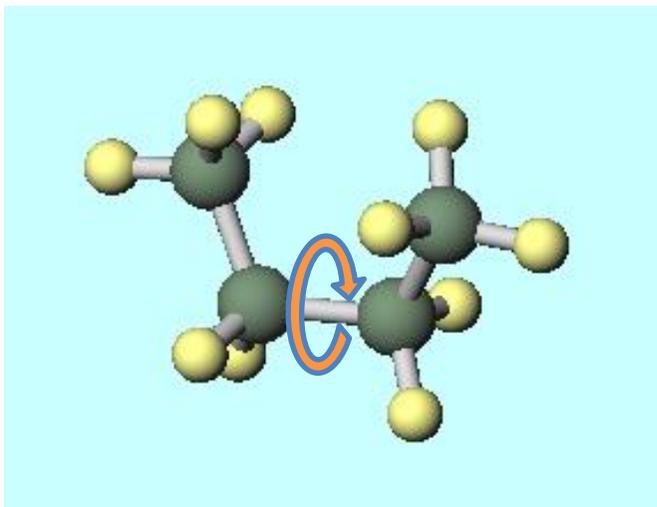
本書について

- 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

二面角を変数としたEnergy Surface(このチュートリアルでは生成熱)のスキャン計算の手順を、真空中のブタンを例に示します。

スキャン計算では、指定した内部座標(結合長、角度、二面角)を少しずつ変化させ、エネルギーがどのように変化するかを調べます。指定以外の全ての内部座標はそれぞれの構造で最適化されます。



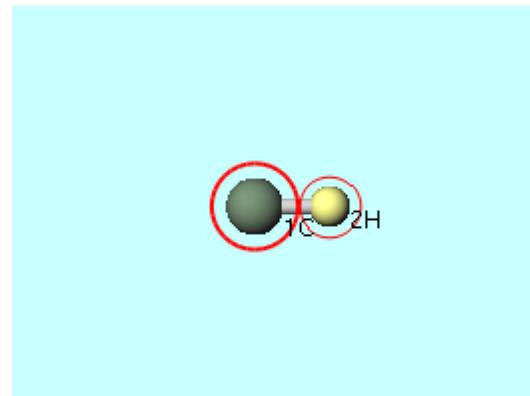
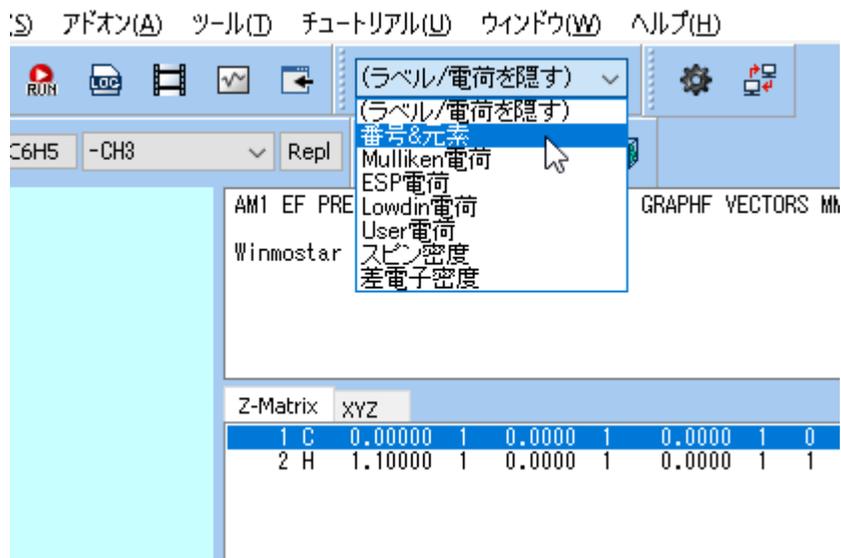
注意点：

- 本チュートリアルの計算は、半経験的手法でかつ真空中のため、高精度な結果が欲しい場合は、GAMESS, NWChem, Gaussianを使用してください。

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。

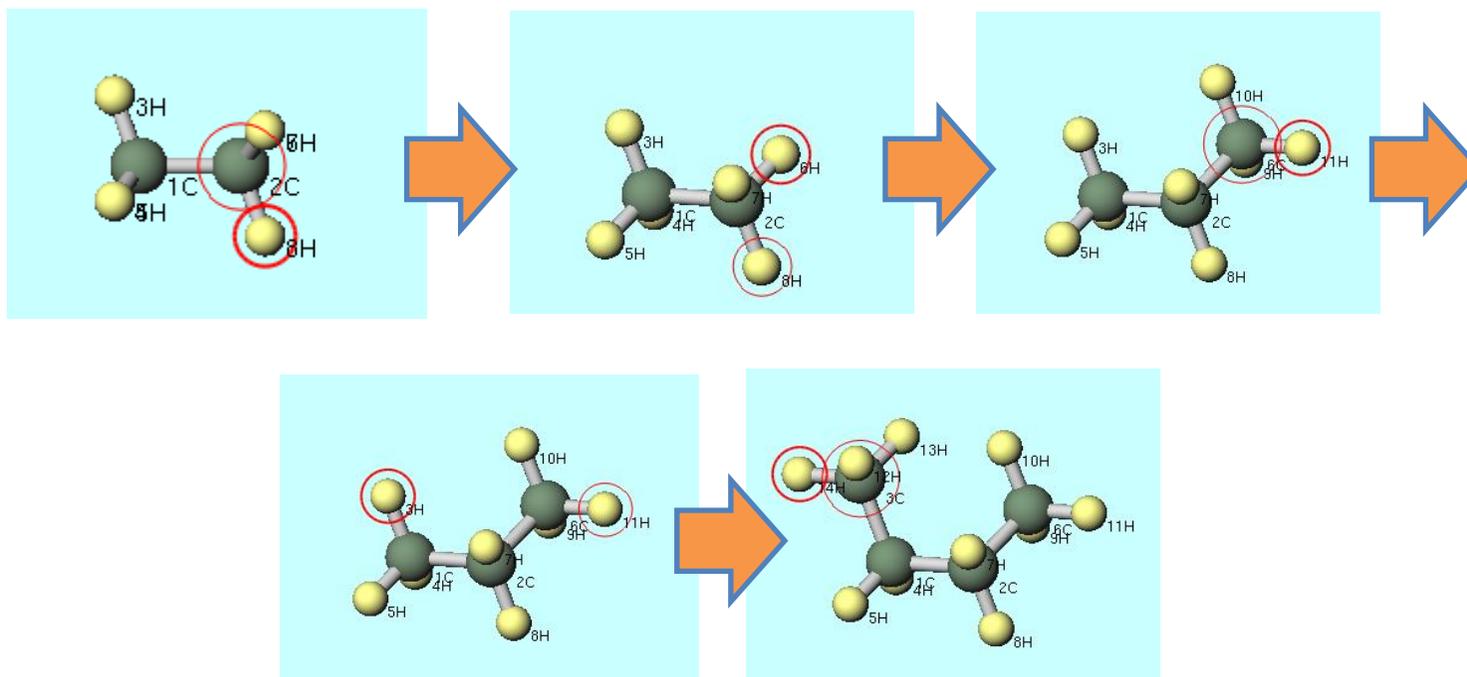
I. モデルの作成

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。



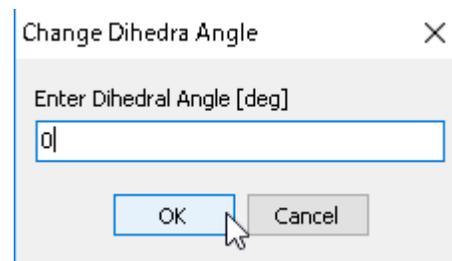
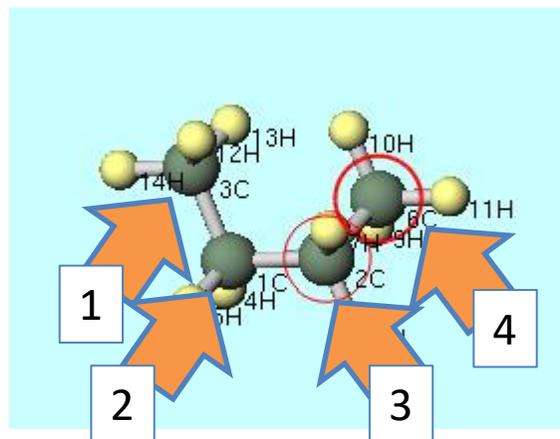
I. モデルの作成

- 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、まずエタンを作成する。
- 続いて、6Hの原子をクリックして太い赤丸で囲まれた状態にし、**Replace** ボタンをクリックしてプロパンにする。
- さらに、3Hの原子をクリックして太い赤丸で囲まれた状態にし、**Replace** ボタンをクリックしてブタンにする。



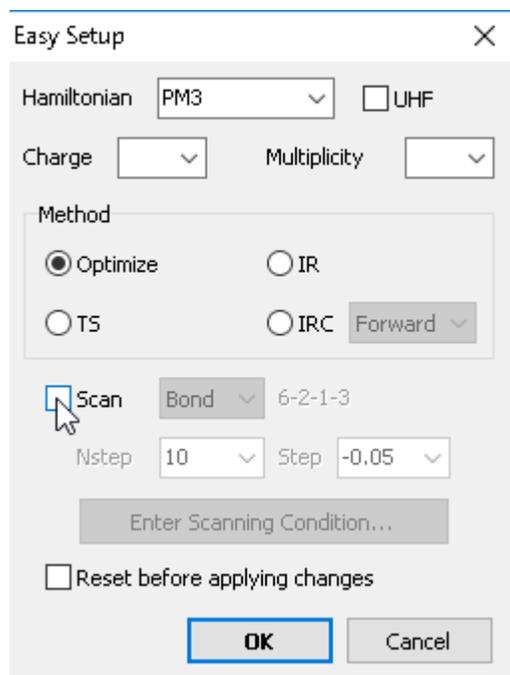
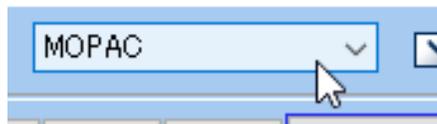
I. モデルの作成

- 主鎖の炭素原子を3C→1C→2C→6Cの順にクリックする。
- **編集 | 選択原子の距離/角度を変更 | 二面角**をクリックする。
- 出現したダイアログで「0」と入力して**OK**ボタンをクリックする。この位置からスキャンが開始される。
- 最後に、スキャン機能を使うために、**ファイル | 座標出力形式を切り替え | Z-Matrix形式**をクリックする。



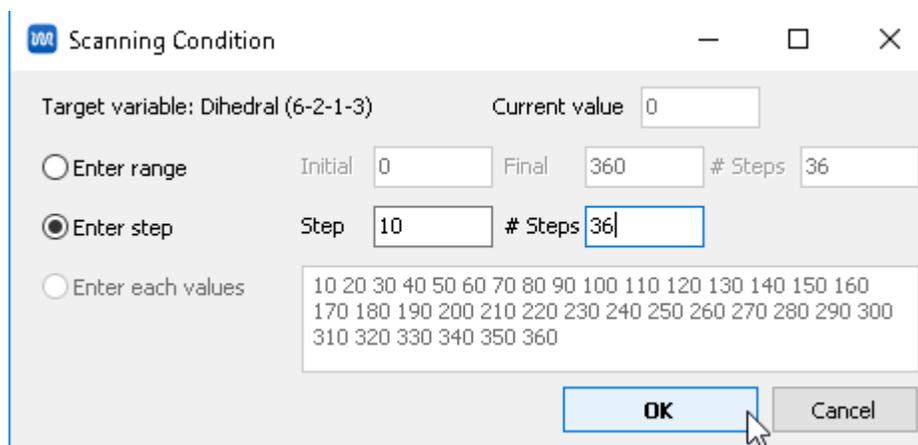
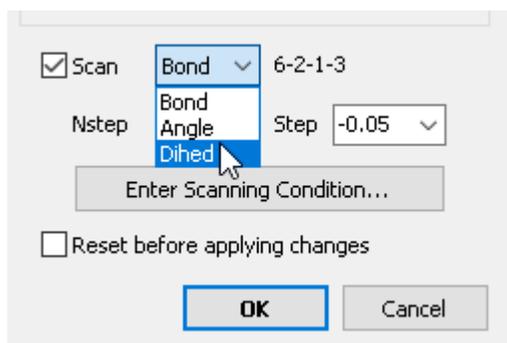
II. スキャン計算

- ソルバを選択メニューでMOPACを選択する。
- (キーワード設定ボタン) をクリックする。
- **Easy Setup** (Easy Setupボタン) をクリックする。
- **Hamiltonian**を「PM3」に変更し**Scan**にチェックを入れる。
- **警告**ダイアログが出現したら**はい**ボタンをクリックする。



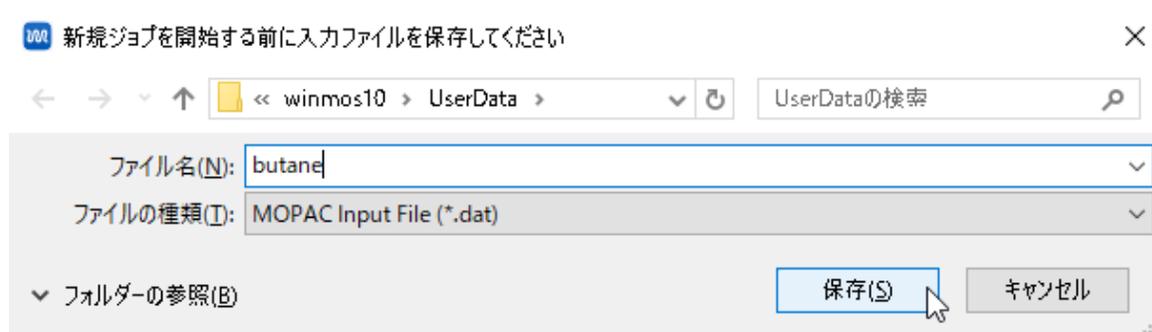
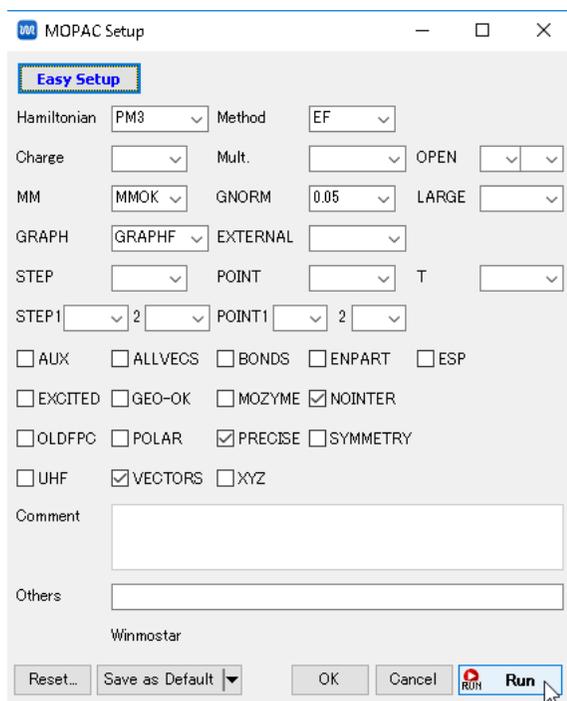
II. スキャン計算

- **Scan**の横の「Bond」を「Dihed」に変更する。
- **Enter Scanning Condition...**ボタンをクリックする。
- **Enter step**の**Step**を「10」、**# Steps**を「36」に変更し**OK**ボタンをクリックする。



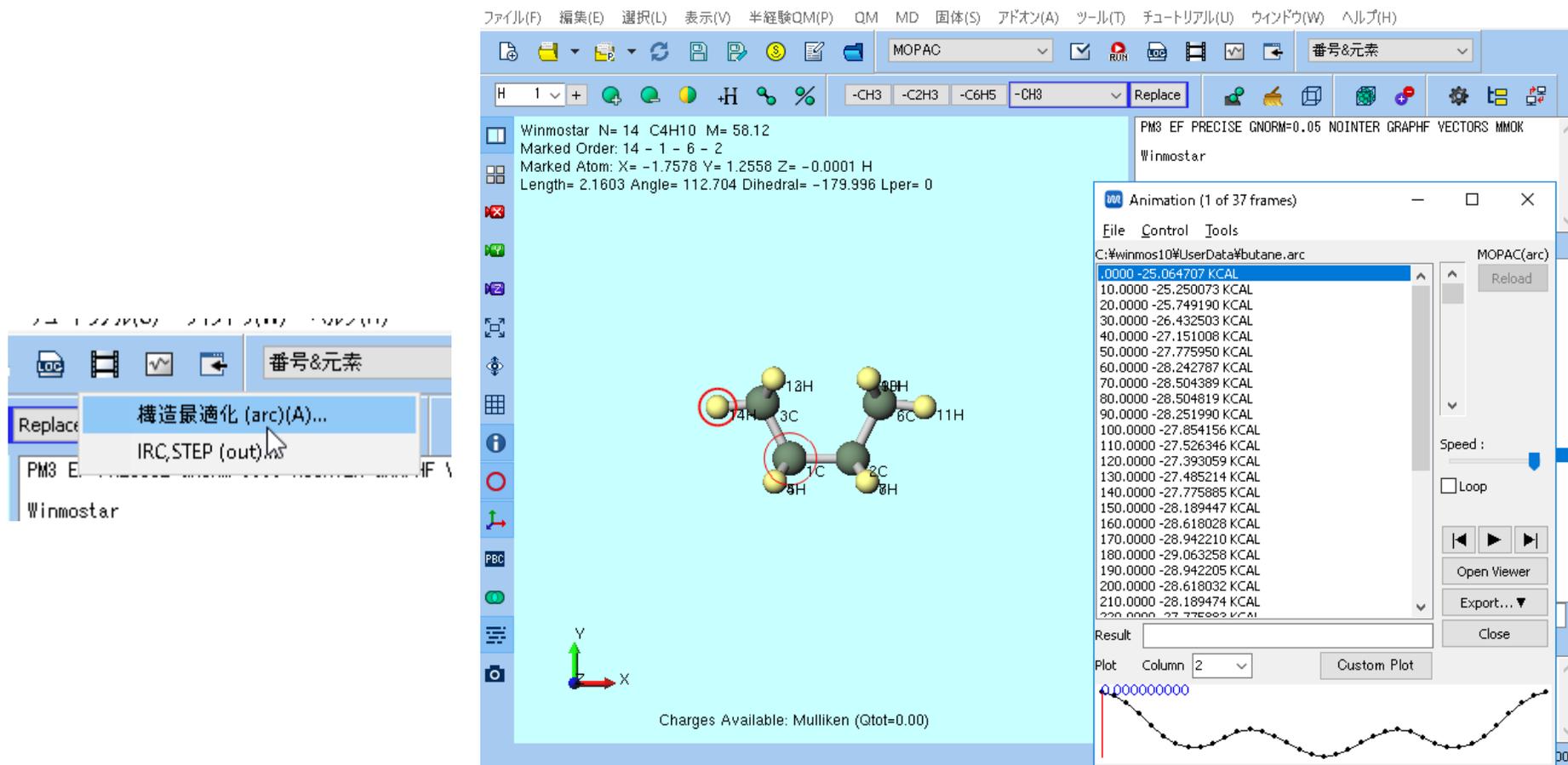
II. スキャン計算

- **MOPAC Setup**ウィンドウ右下の**Run**ボタンをクリックする。
- 「新規ジョブを開始する前に入力ファイルを保存してください」というウィンドウが出たら、ファイル名に「butane」と入力し**保存**ボタンをクリックする。
- その後、コンソールウィンドウが出現し計算が流れる。
- 計算終了後、テキストエディタで開かれたログファイル（butane.out）を閉じる。



III. 結果の表示

-  (アニメーションボタン) をクリックし、**構造最適化(arc)**をクリックする。
- デフォルトで選択されたファイルを開く。



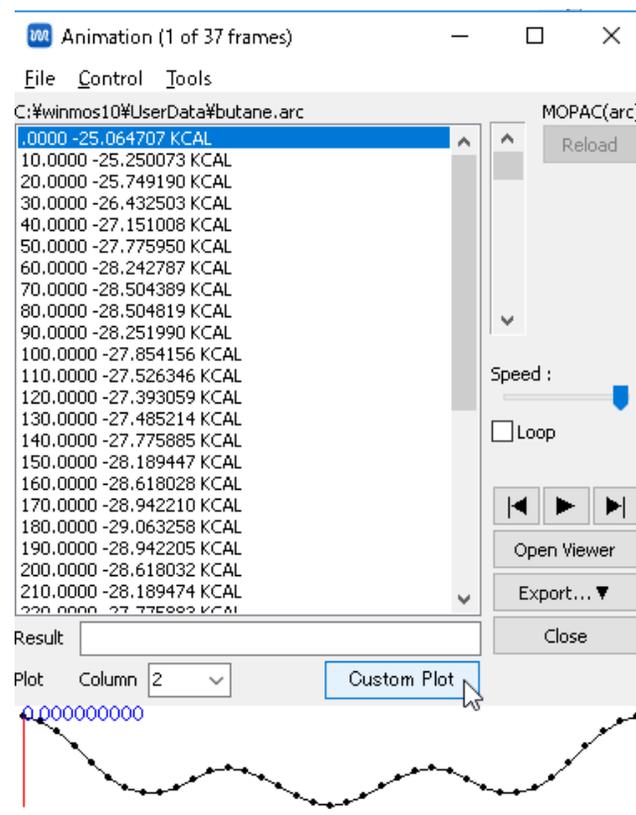
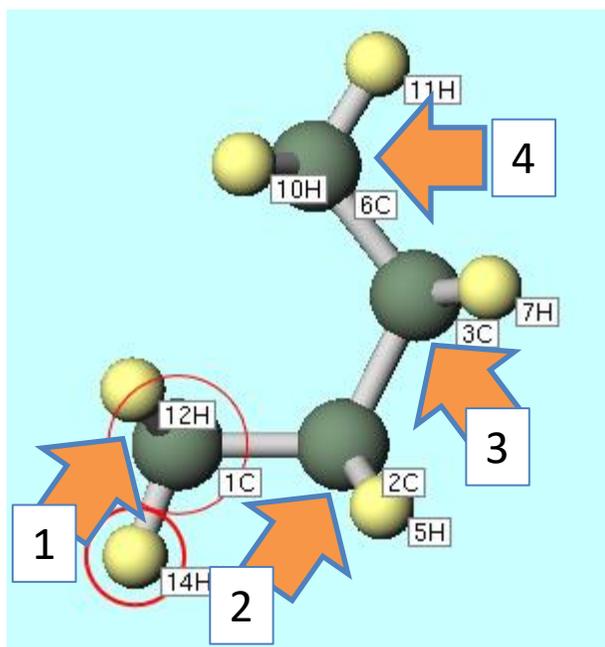
The screenshot displays the Winmostar software interface. The main window shows a ball-and-stick model of a molecule with atoms labeled 1C, 2C, 3C, 4H, 5H, 6C, 7H, 8H, 9H, 10H, 11H, and 12H. A coordinate system (X, Y, Z) is visible at the bottom left. The status bar indicates "Charges Available: Mulliken (Qtot=0.00)".

An inset window titled "Animation (1 of 37 frames)" is open, showing a list of energy values (KCAL) for each frame. The values range from 10.0000 to 220.0000. A plot at the bottom of the animation window shows the energy profile over time, with a red vertical line at the start and a black line representing the energy curve.

The animation window also includes a "Speed" slider, a "Loop" checkbox, and buttons for "Open Viewer", "Export...", and "Close".

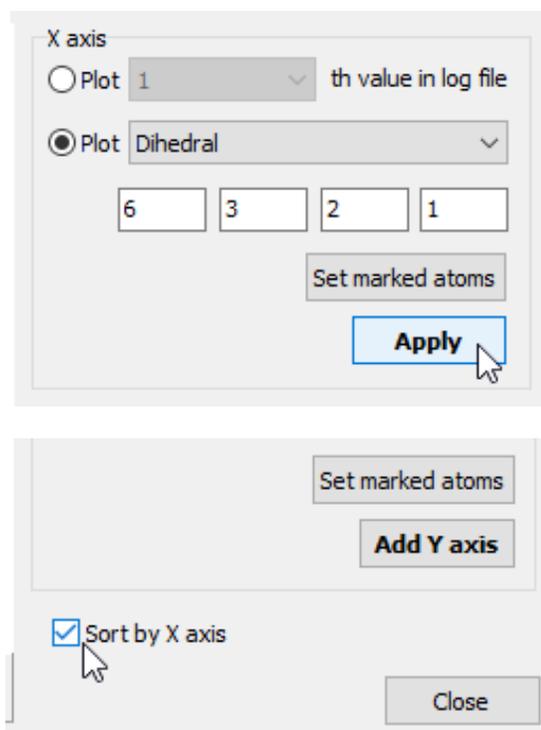
III. 結果の表示

- 主鎖の炭素原子を1C→2C→3C→6Cの順にクリックする。
- **Animation**ウィンドウの**Custom Plot**ボタンをクリックする。**Animation**ウィンドウが他のウィンドウに隠れてしまった場合は、メインウィンドウの**ウィンドウ | Animation**をクリックする。

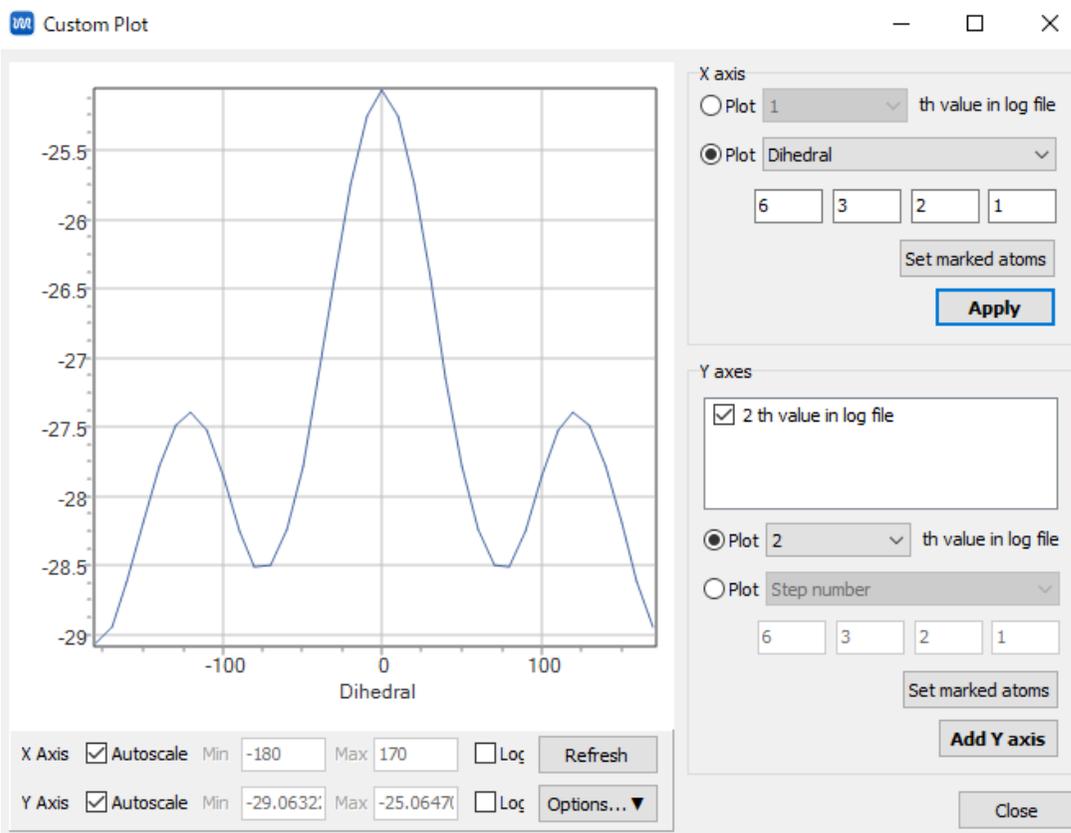


III.結果の表示

Custom Plotウィンドウ右のX axisのPlot Step numberをDihedralに変更し、Applyボタンをクリックする。Sort by X axisがある場合はチェックする。スキャンした二面角を変数としたときの生成熱のグラフが出現する。



(V10.7.4、V10.8.1以降のみ)



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