

 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)**

V10.1.3

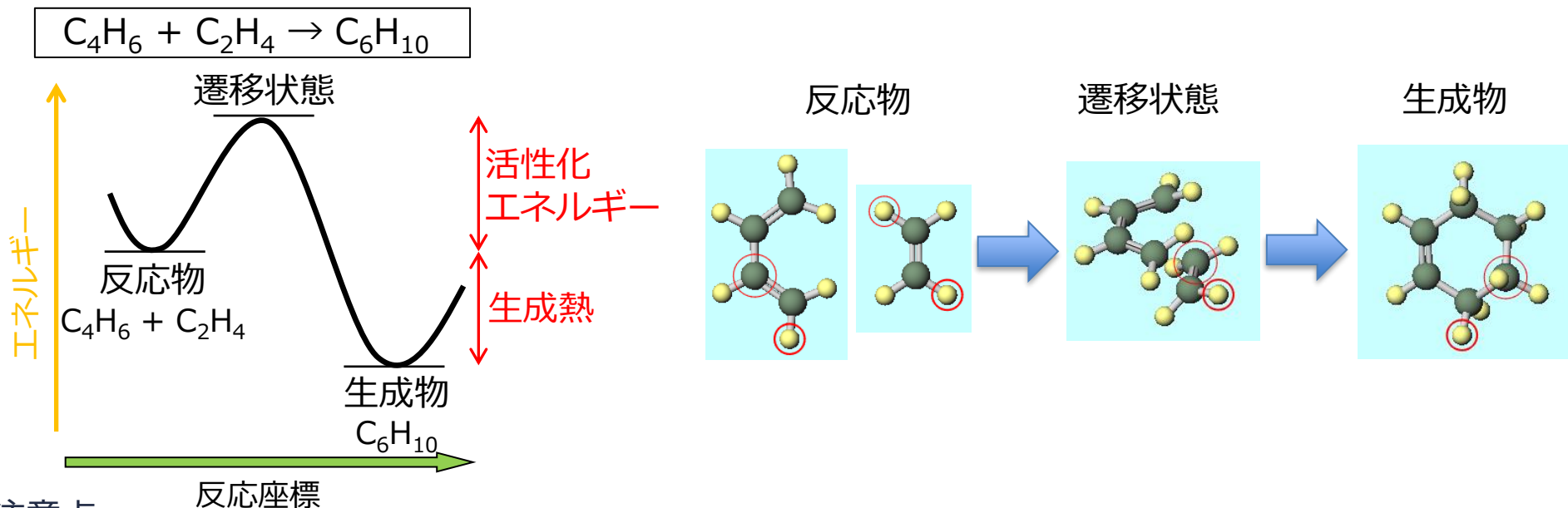
2020年5月12日 株式会社クロスアビリティ

# 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。

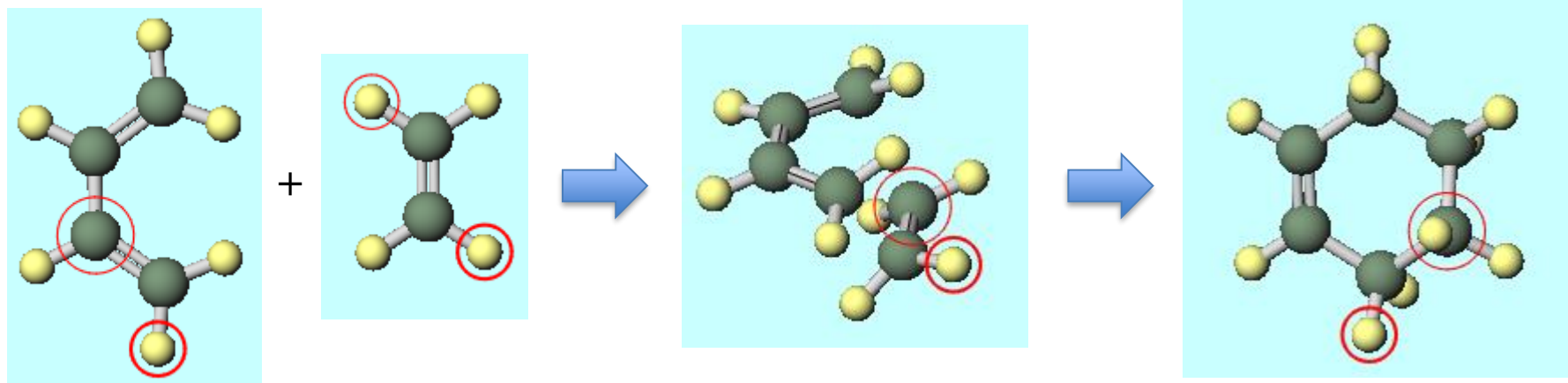


注意点：

- 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、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。

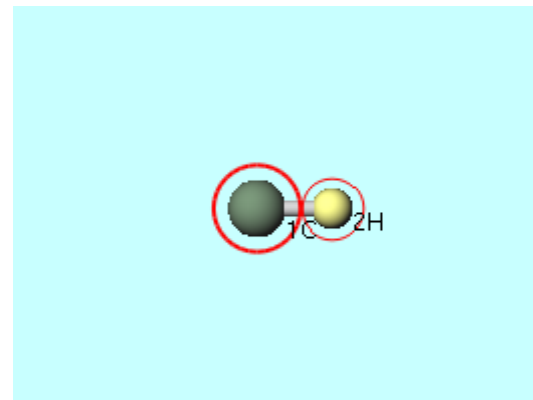
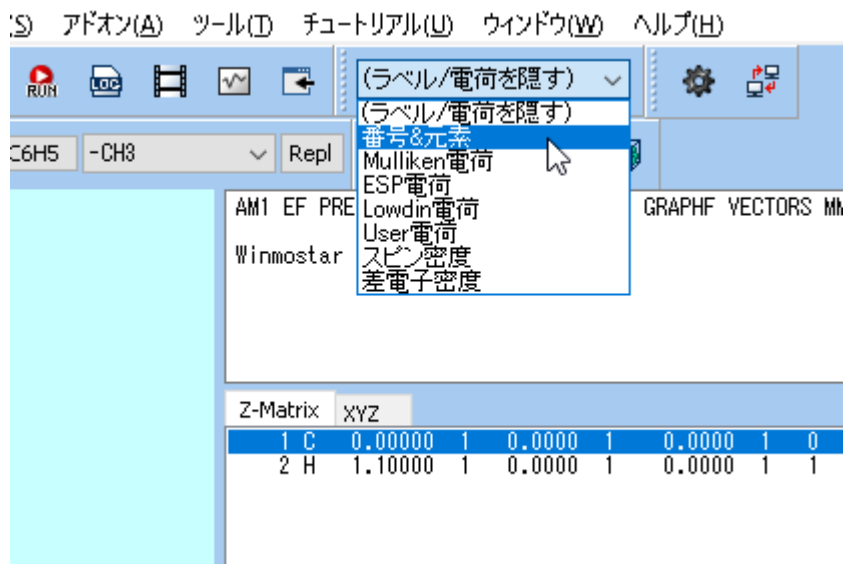
# I. 計算手順

反応物( $C_4H_6$ 、 $C_2H_4$ )、生成物( $C_6H_{10}$ ) さらに遷移状態の構造最適化計算を行い、それぞれのエネルギー(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)を求める。それらのエネルギーの足し引きから、この反応の生成熱及び活性化エネルギーを計算する。



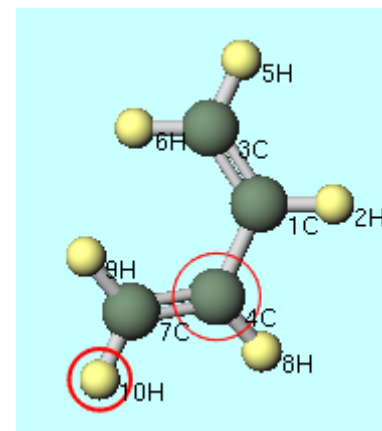
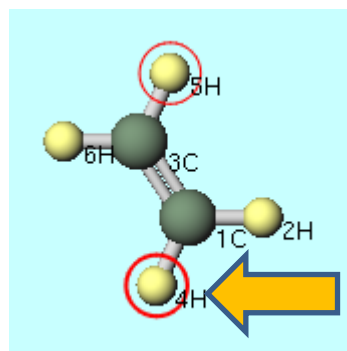
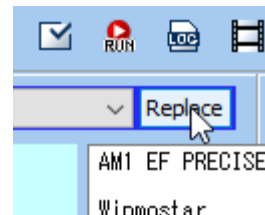
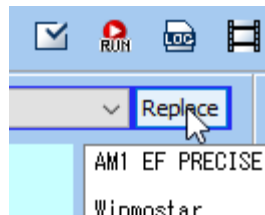
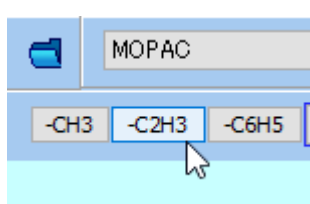
## II. 構造最適化計算(ブタジエン)

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。



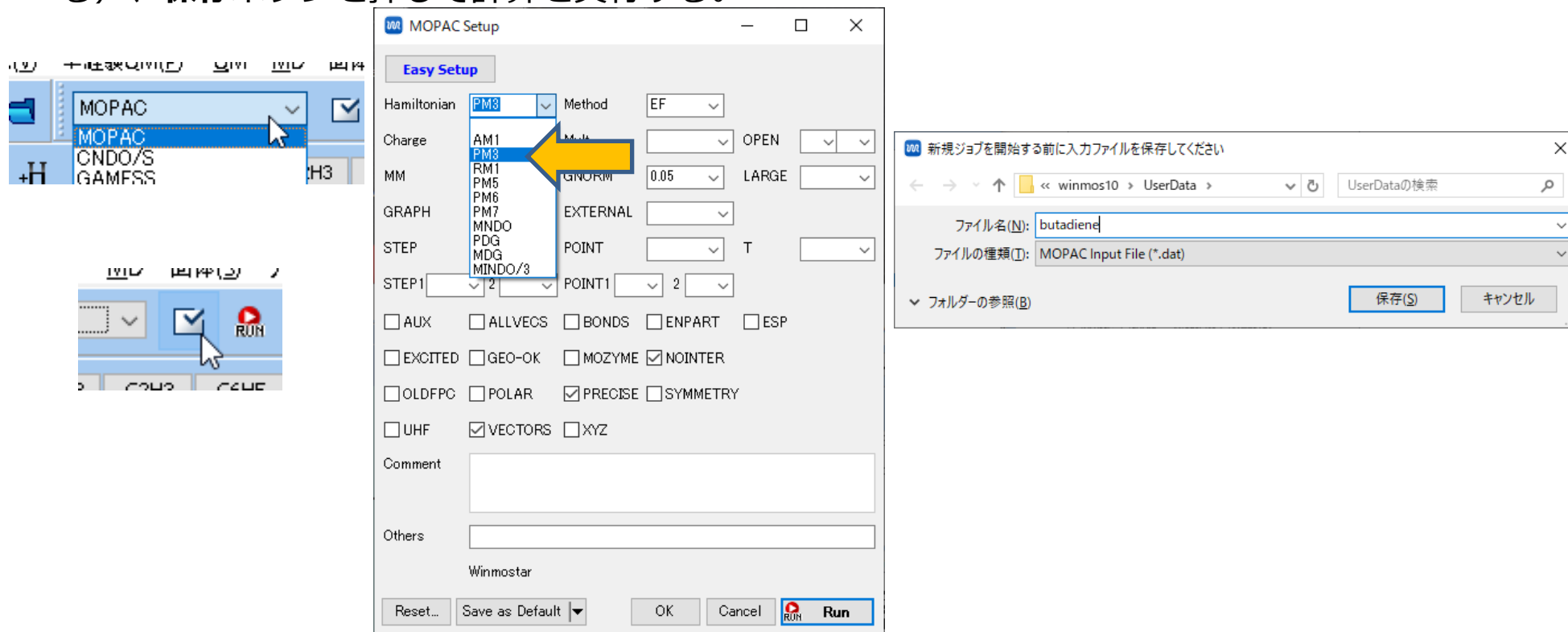
## II. 構造最適化計算(ブタジエン)

1. メインウィンドウ上部の**-C2H3**ボタンをクリックし、その3つ右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、エチレンを作成する。
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-ブタジエンを作成する。



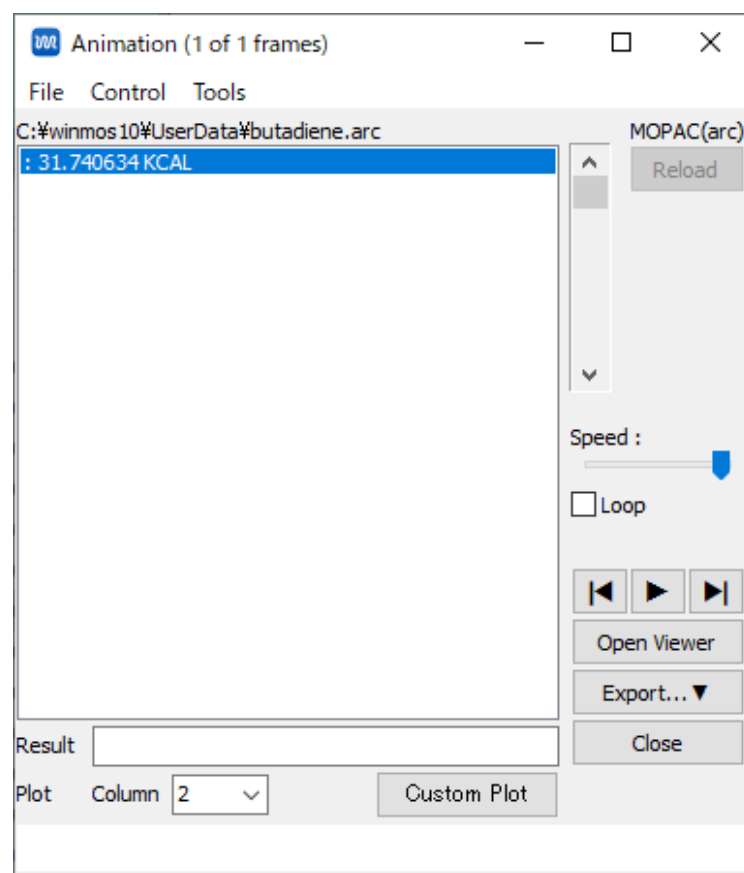
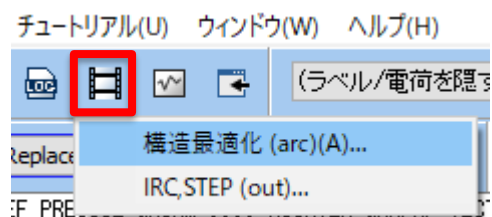
## II. 構造最適化計算(ブタジエン)

1. ソルバを選択メニューで**MOPAC**を選択して、**キーワード設定ボタン**を押す。
2. 開いた**MOPAC Setup**ウィンドウで、**Hamiltonian**には**PM3**を選択し、**Run**ボタンをクリックする。
3. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（仮にファイル名は「butadiene」とする）、**保存ボタン**を押して計算を実行する。



## II. 構造最適化計算(ブタジエン)

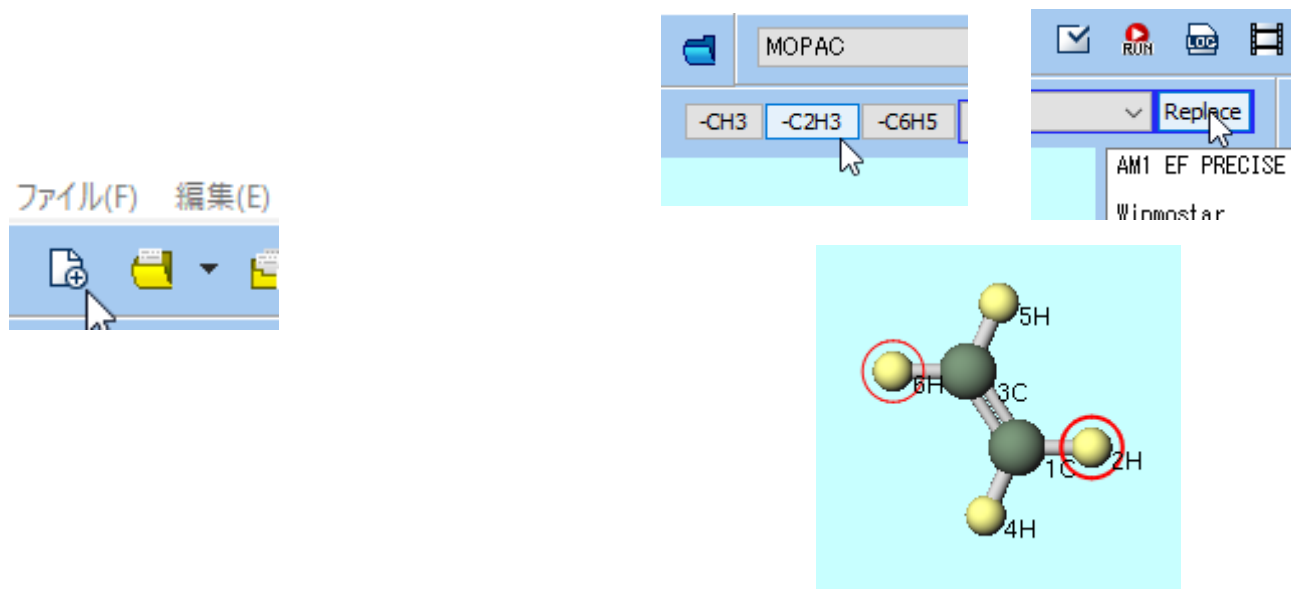
メインウィンドウ上部の**アニメーション**ボタンをクリックし、**構造最適化(arc)**を選択する。デフォルトで選択されるファイル (butadiene.arc) を開く。開いた**Animation**ウィンドウで、最適化構造でのエネルギー値(31.74 kcal/mol)を確認する。この値をメモに取り、その後**Animation**ウィンドウを閉じる。





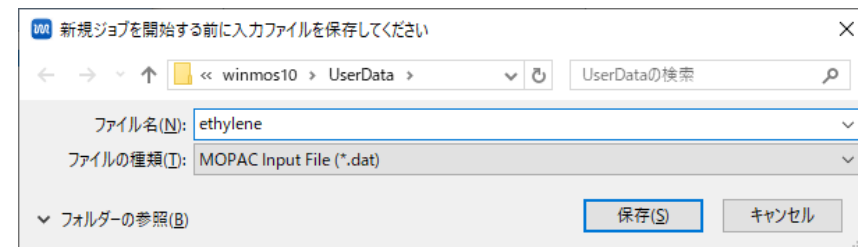
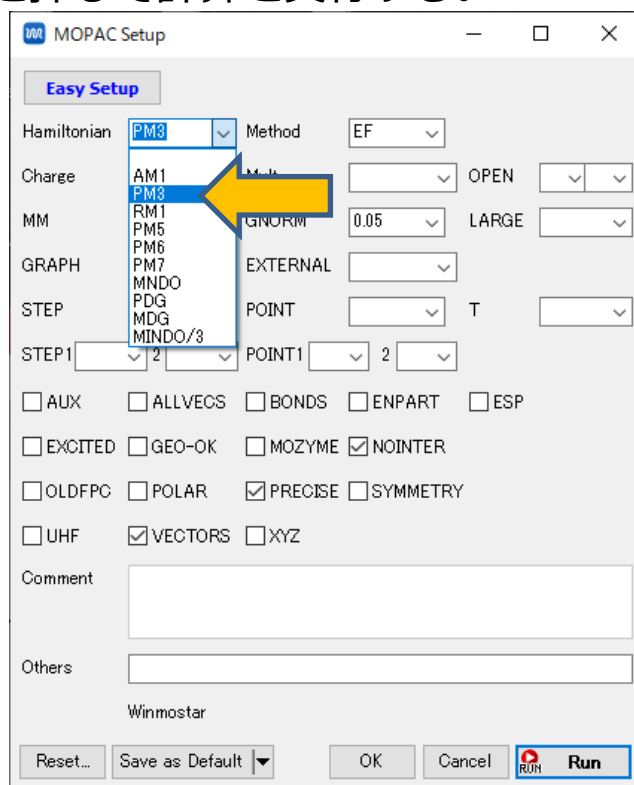
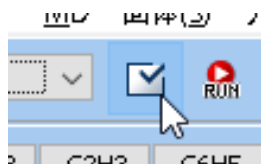
# III. 構造最適化計算(エチレン)

1. **新規**ボタンをクリックすると「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、初期化する。
2. メインウィンドウ上部の**-C2H3**ボタンをクリックし、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、エチレンを作成する。



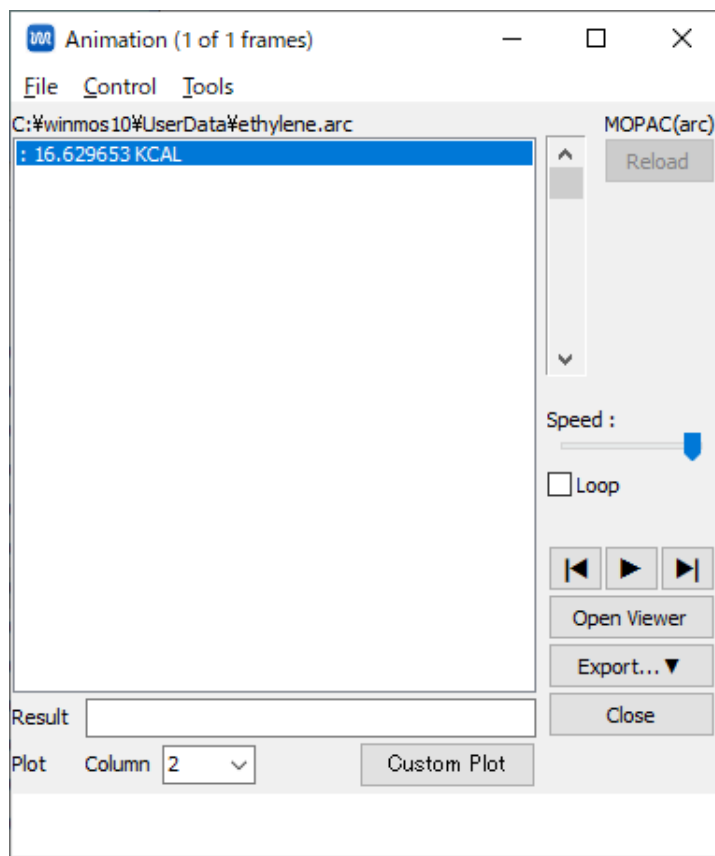
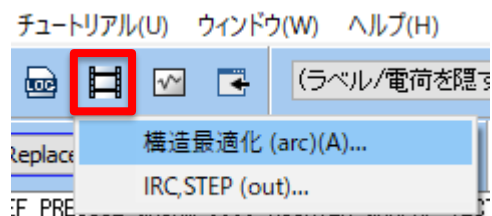
# III. 構造最適化計算(エチレン)

1. キーワード設定ボタンを押す。
2. 開いたMOPAC Setupウィンドウで、HamiltonianにはPM3を選択し、Runボタンをクリックする。
3. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（仮にファイル名は「ethylene」とする）、保存ボタンを押して計算を実行する。



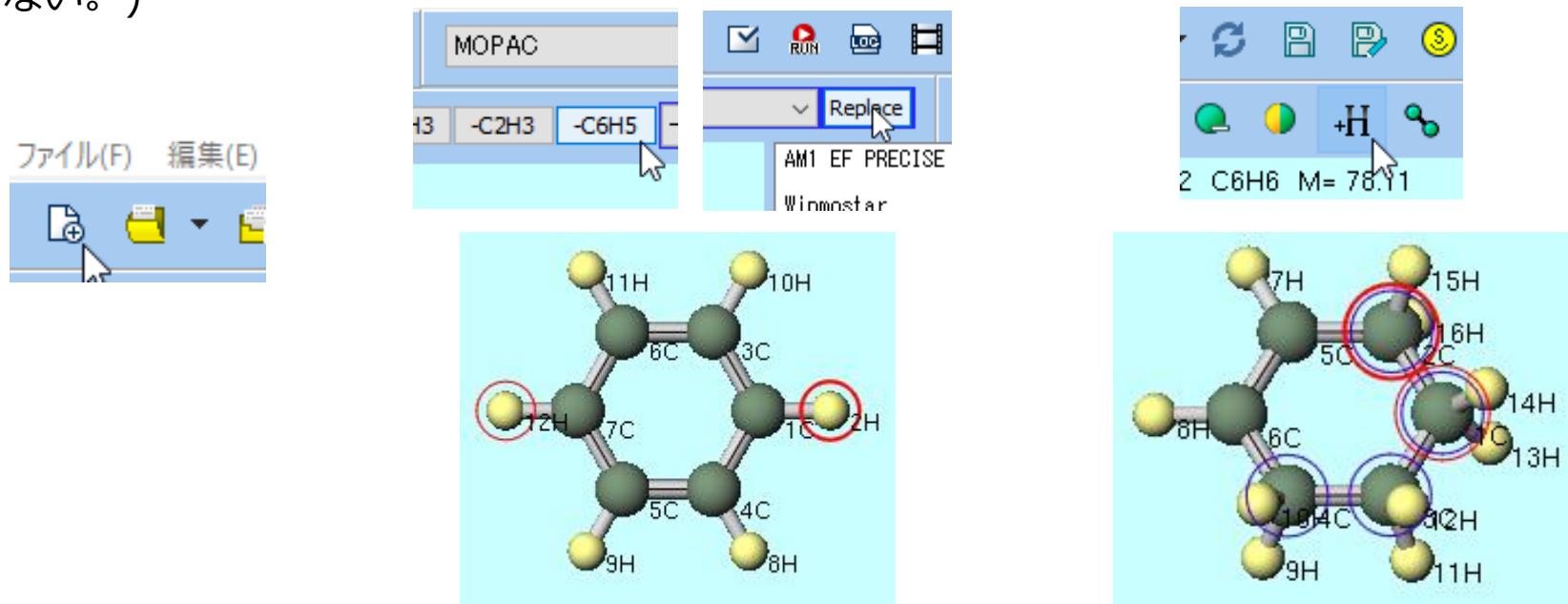
# III. 構造最適化計算(エチレン)

メインウィンドウ上部の**アニメーション**ボタンをクリックし、**構造最適化(arc)**を選択する。デフォルトで選択されるファイル (ethylene.arc) を開く。開いた**Animation**ウィンドウで、最適化構造でのエネルギー値(16.63 kcal/mol)を確認する。この値をメモに取り、その後**Animation**ウィンドウを閉じる。



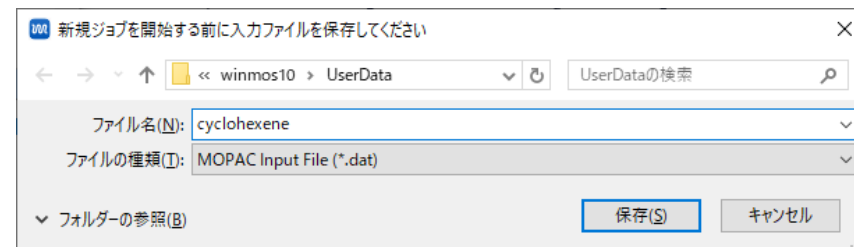
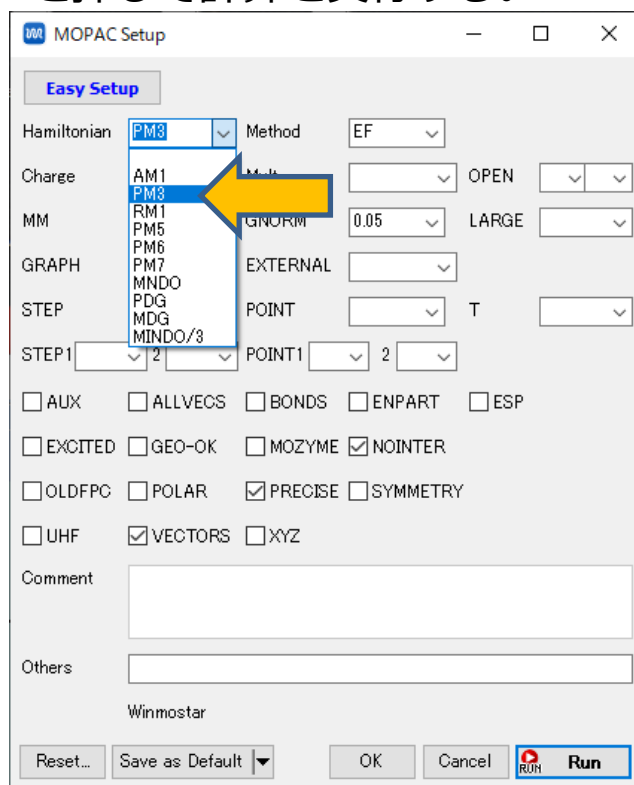
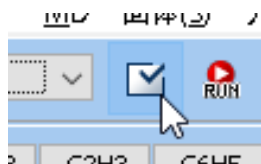
# IV. 構造最適化計算(シクロヘキセン)

1. **新規**ボタンをクリックすると「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、初期化する。
2. メインウィンドウ上部の**-C6H5**ボタンをクリックし、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、ベンゼンを作成する。
3. **Ctrl**を押しながら**1C, 3C, 4C, 5C**原子(緑色)をクリックして青丸のグループ選択した状態で、**選択原子に水素を付加**を1回クリックして、シクロヘキセンを作成する。(PM3の構造最適化計算では原子座標のみ使い、結合の情報は使わないため、1.5重結合のままで問題ない。)



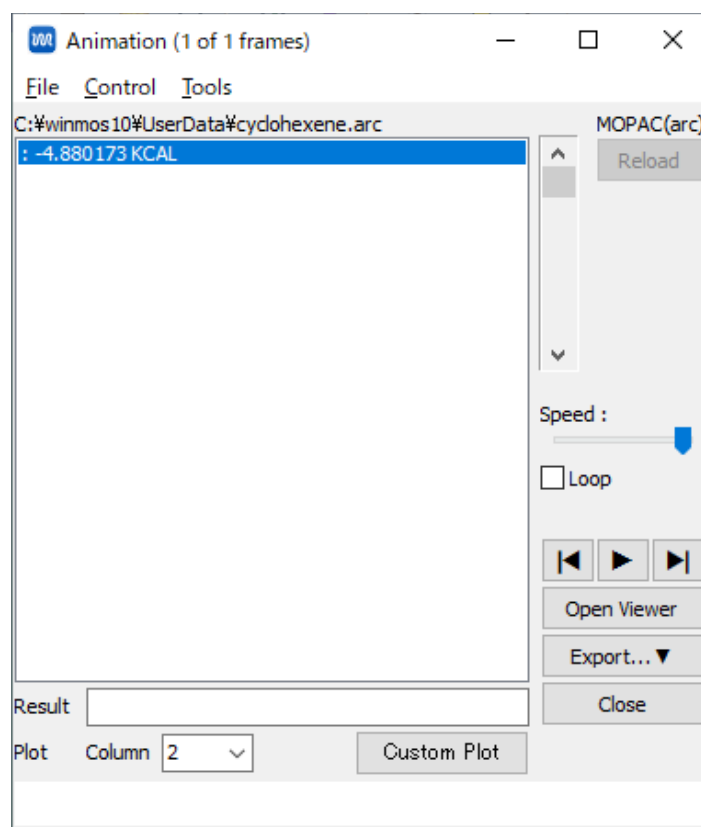
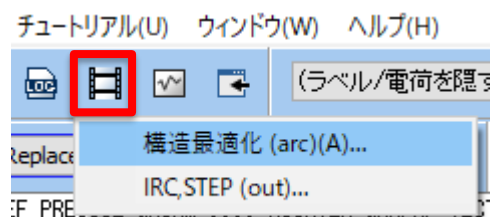
# IV. 構造最適化計算(シクロヘキセン)

1. キーワード設定ボタンを押す。
2. 開いたMOPAC Setupウィンドウで、HamiltonianにはPM3を選択し、Runボタンをクリックする。
3. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（仮にファイル名は「cyclohexene」とする）、保存ボタンを押して計算を実行する。



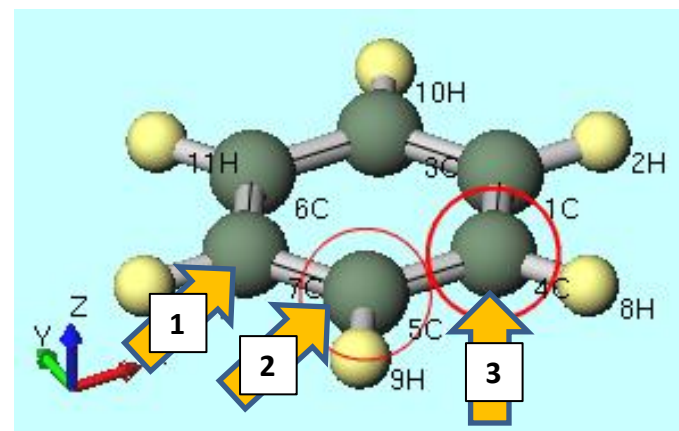
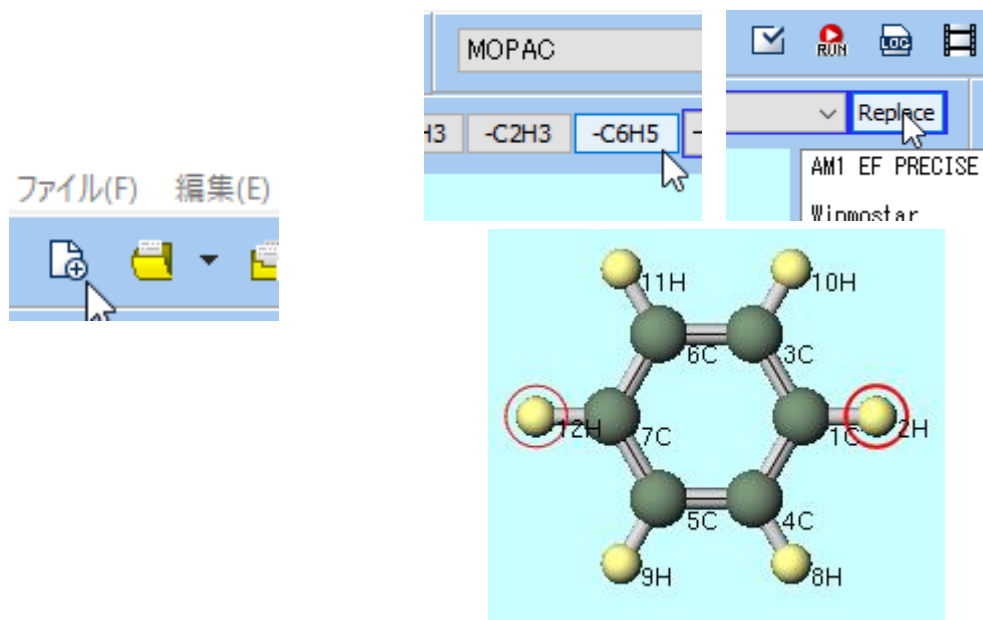
## IV. 構造最適化計算(シクロヘキセン)

メインウィンドウ上部の**アニメーション**ボタンをクリックし、**構造最適化(arc)**を選択する。デフォルトで選択されるファイル (cyclohexene.arc) を開く。開いた**Animation**ウィンドウで、最適化構造でのエネルギー値(-4.88 kcal/mol)を確認する。この値をメモに取り、その後**Animation**ウィンドウを閉じる。



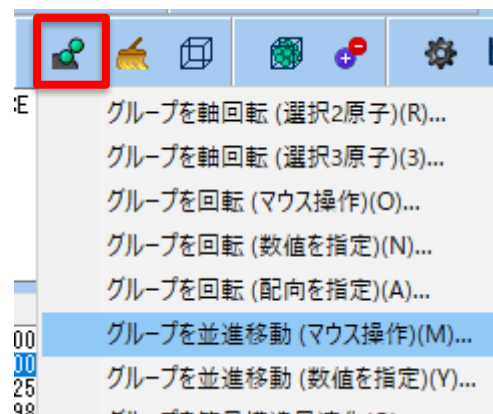
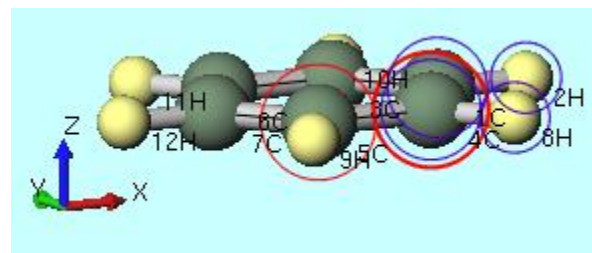
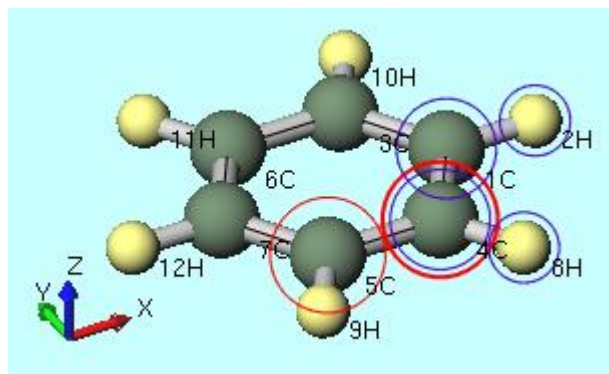
## V. 遷移状態計算

1. **新規**ボタンをクリックすると「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、初期化する。
2. メインウィンドウ上部の**-C6H5**ボタンをクリックし、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、ベンゼンを作成する。
3. 分子の近くをクリックしたままマウスを動かして、右下の図のようにカメラの位置を調整する。
4. **7C**, **5C**, **4C**の順にクリックする。



## V. 遷移状態計算

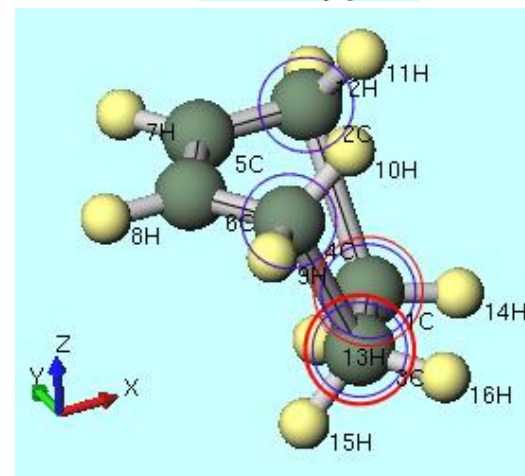
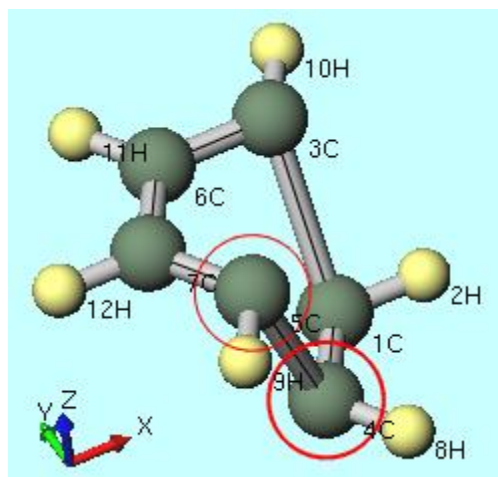
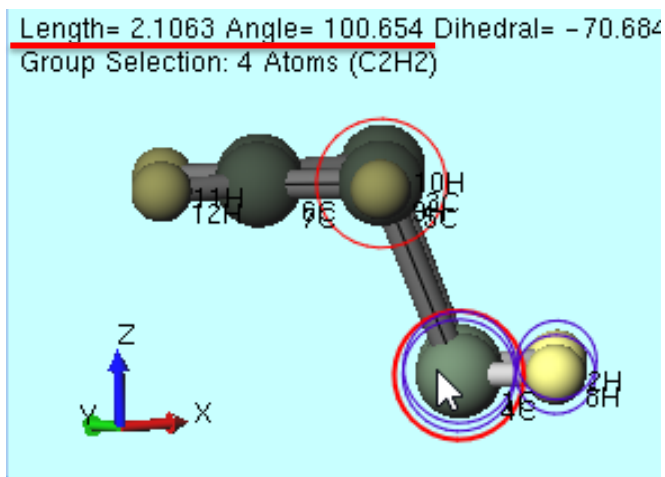
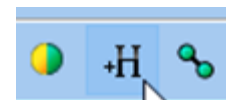
1. **Ctrl**を押しながら**1C, 2H, 4C, 8H**原子をクリックして青丸のグループ選択状態にする。
2. 分子の近くをクリックしたままマウスを動かして、右の図のようにカメラの位置を再調整する。
3. **グループ編集**をクリックし、**グループを並進移動(マウス操作)**を選択する。





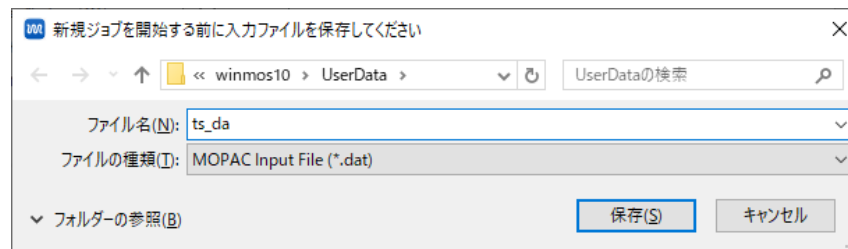
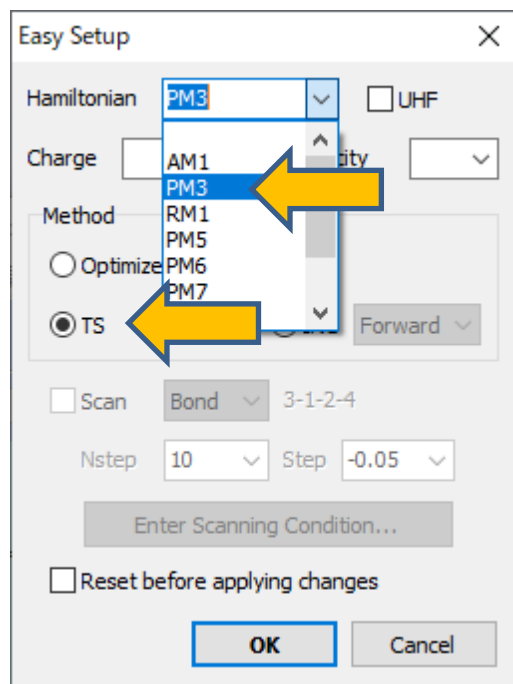
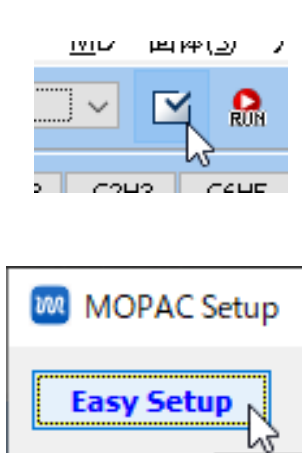
# V. 遷移状態計算

1. 画面をドラッグして左下の図のように、Lengthが2.1、Angleが100程度になるようにC<sub>2</sub>H<sub>2</sub>部分を移動させる。初期構造を作成するのが目的のため、値を厳密に合わせる必要はない。
2. 分子の近くを一度クリックして青丸のグループ選択を解除する。
3. 分子の近くをクリックしたままマウスを動かして、中央下図のようにカメラの位置を再調整する。
4. **Ctrl**を押しながら**1C, 3C, 4C, 5C**原子をクリックして青い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回クリックする。これで遷移状態計算の初期構造が完成する。



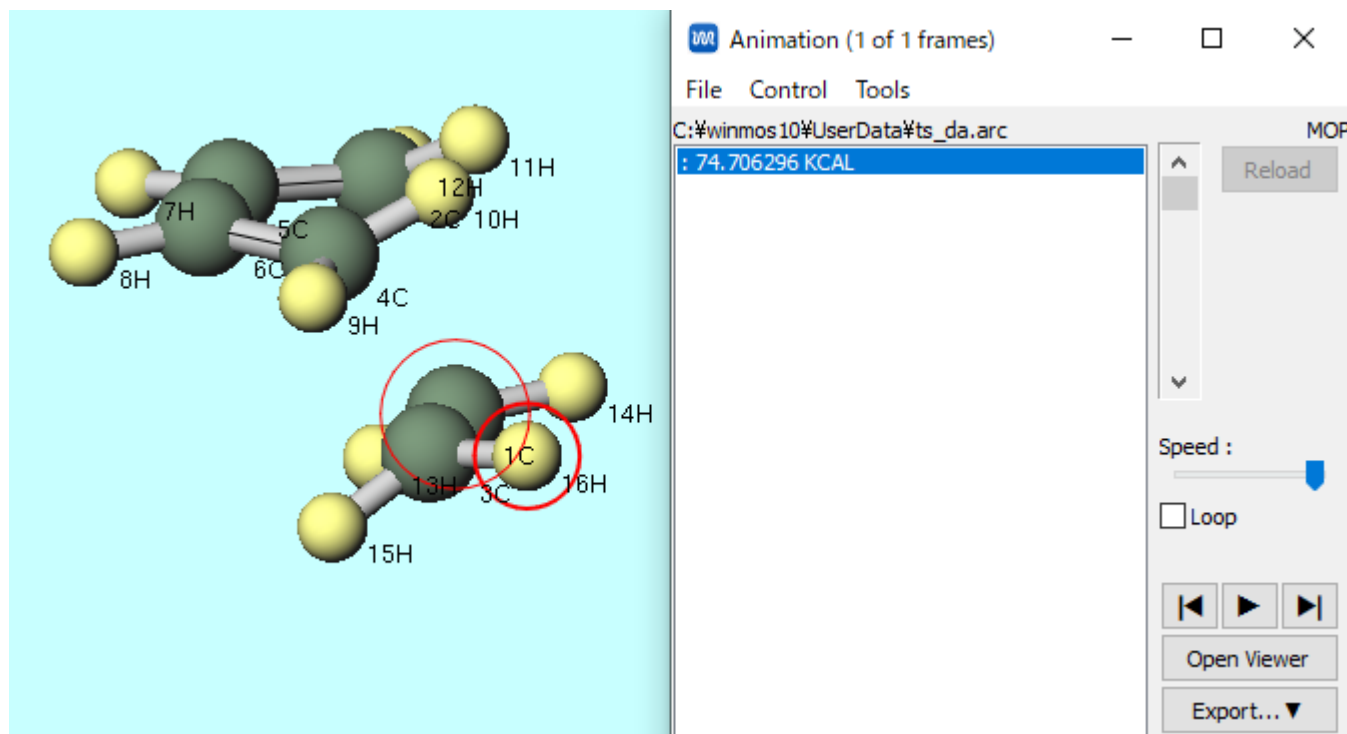
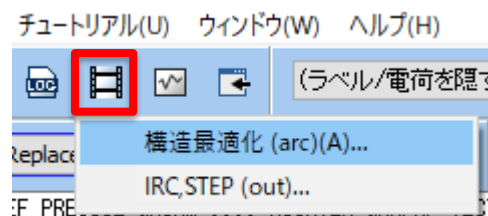
# V. 遷移状態計算

1. キーワード設定ボタンをクリックし、開いたMOPAC Setupウィンドウで、**キーワード設定 Easy Setup**ボタンをクリックする。
2. **Easy Setup**ウィンドウで、**Hamiltonian**には**PM3**、**Method**には**TS**を選択し、**Easy Setup**ウィンドウを**OK**ボタンで閉じる。
3. **MOPAC Setup**ウィンドウで、**Run**ボタンをクリックする。
4. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（仮にファイル名は「ts\_da」とする）、**保存**ボタンを押して計算を実行する。



# V. 遷移状態計算

メインウィンドウ上部の**アニメーション**ボタンをクリックし、**構造最適化(arc)**を選択する。デフォルトで選択されるファイル (ts\_da.arc) を開く。開いた**Animation**ウィンドウで、遷移状態構造でのエネルギー値(74.71 kcal/mol)を確認する。この値をメモに取り、その後**Animation**ウィンドウを閉じる。



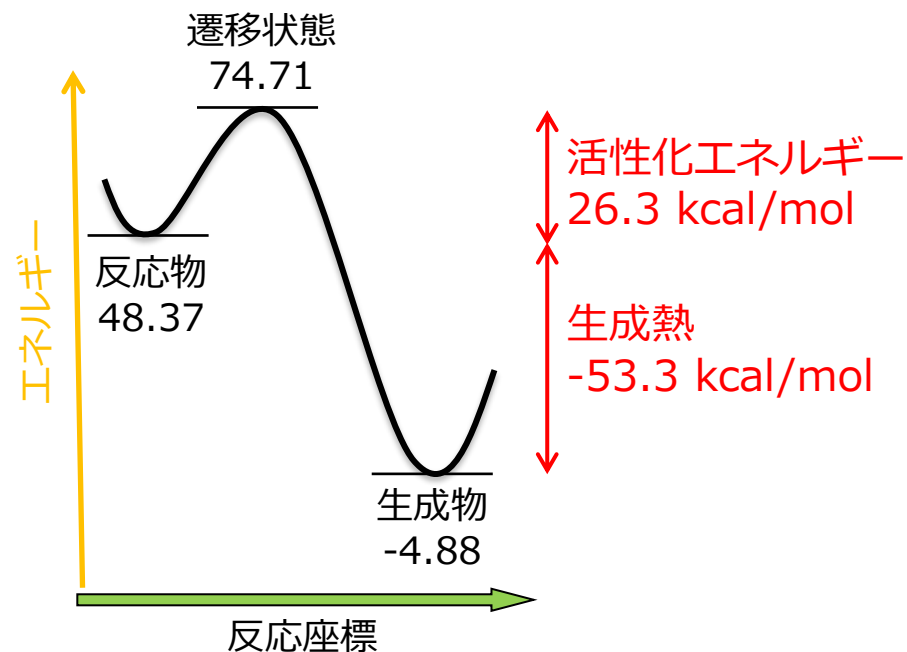
# VI. 反応エネルギー計算

(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)

で計算する。この反応は53.3 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26.3 kcal/molとなる。

	エネルギー(kcal/mol)
反応物	$31.74 + 16.63 = 48.37$
遷移状態	74.71
生成物	-4.88
生成熱	$-4.88 - 48.37 = -53.3$
活性化エネルギー	$74.71 - 48.37 = 26.3$



# 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