

Winmostar™ チュートリアル

MOPAC

化学反応解析 (MEP・IRC計算)

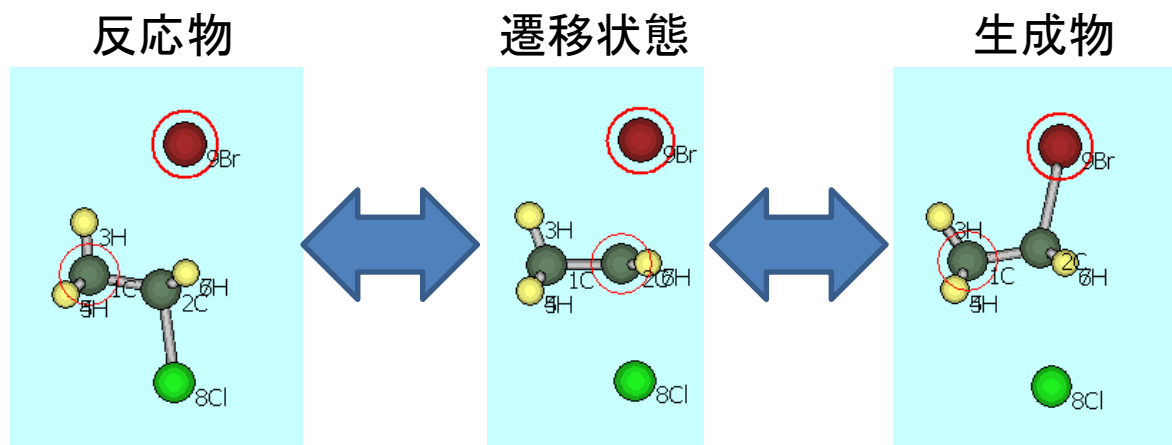
V8.024

株式会社クロスアビリティ

2018/07/23

概要

- クロロエタンとBr⁻イオンの化学反応を以下の手順で計算します。
 - C-Br原子間の距離を走査するスキャン計算を実行する。
 - 1.のエネルギー極大点から遷移状態を探索するTS計算を実行する。
 - 得られた遷移状態で振動計算を実施し鞍点であることを確認する。
 - 遷移状態から固有反応座標の2方向に沿ったIRC計算を実行する。

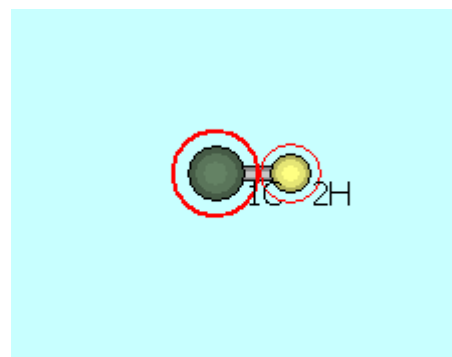
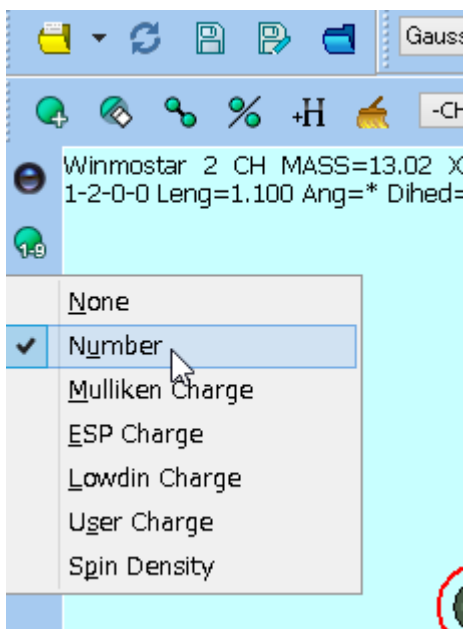


注意点:

- 本チュートリアルでの計算は、半経験的手法でかつ真空中のため、高精度な結果や溶媒中での結果が欲しい場合は、GAMESS, NWChem, Gaussianなどを使用する必要があります。

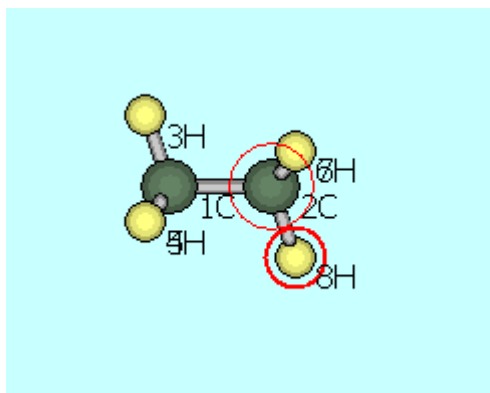
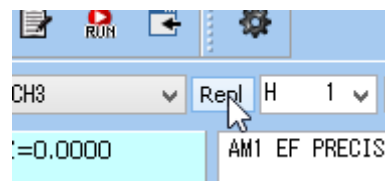
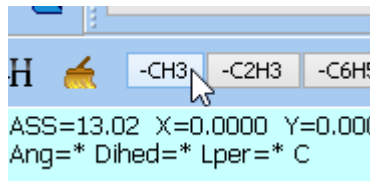
I. モデルの作成

Winmostarを起動し、まずメインウインドウ左の緑色の[アノテーション]ボタンをクリックし、「Number」を選択し、メインウインドウにおいて各原子の名前を表示する。



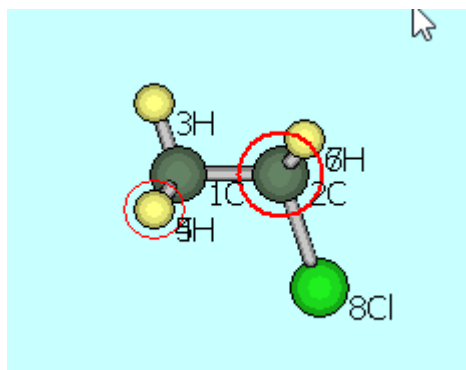
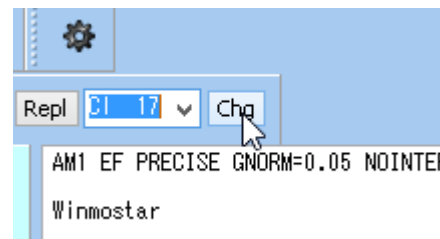
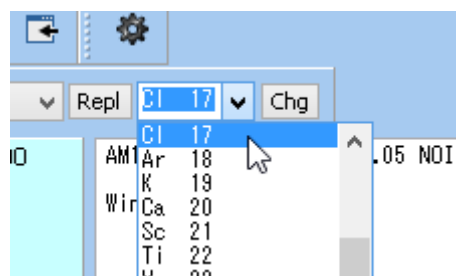
I. モデルの作成

メインウインドウ上部の[-CH3]ボタンをクリックし、その右にある[Repl]ボタンを2回クリックし、エタンを作成する。



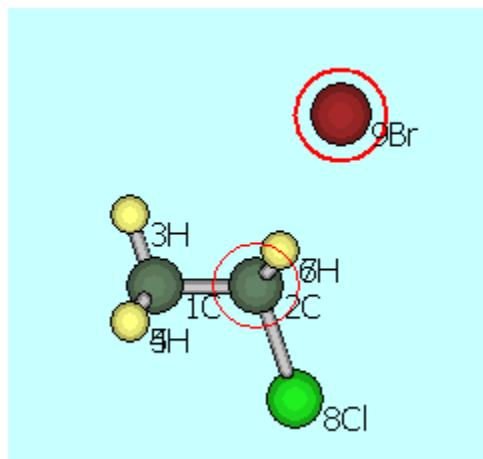
I. モデルの作成

8Hが赤丸で選択された状態で、メインウインドウ上部の元素選択メニューで[Cl 17]を選択し、その右にある[Chg]ボタンをクリックし、クロロエタンを作成する。



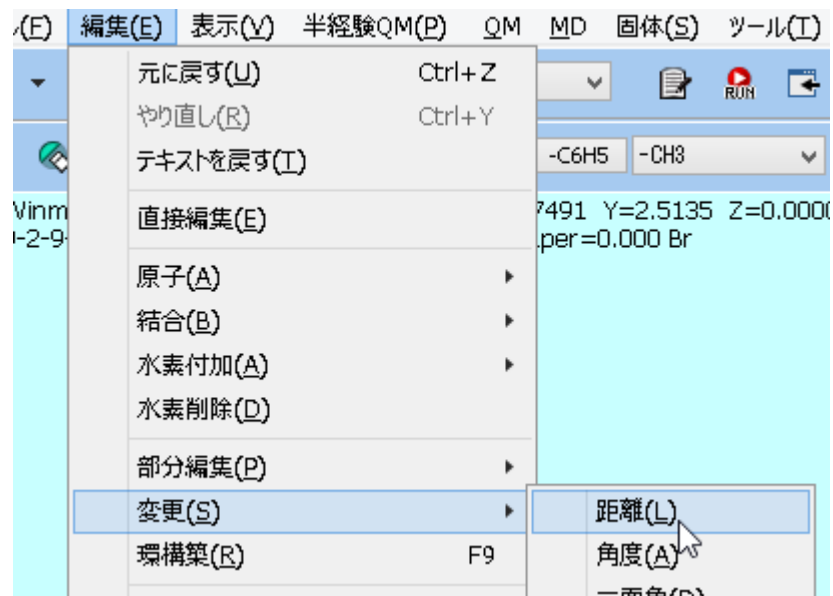
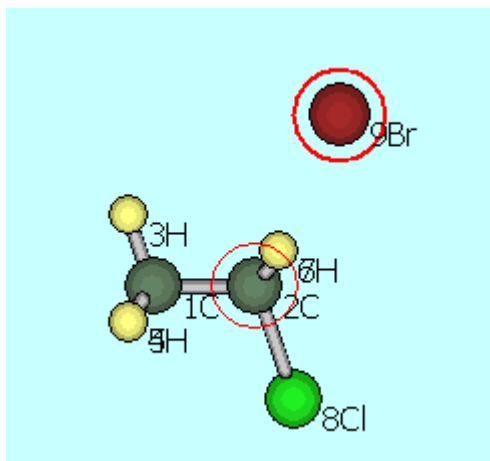
I. モデルの作成

メインウインドウ上部の元素選択メニューで[Br 35]を選択し、その左にある[原子追加]ボタンをクリックし、数の9Brのあたりの位置をクリックしBr原子を追加する。



I. モデルの作成

1C→2C→9Brと順番に続けてクリックして選択し、メインメニューから[編集]-[変更]-[距離]を選択し、[Charge Value]ウインドウで「3」と入力し[OK]ボタンを押すと、2C-9Br間の距離が3 Åに変更される。



Change Value

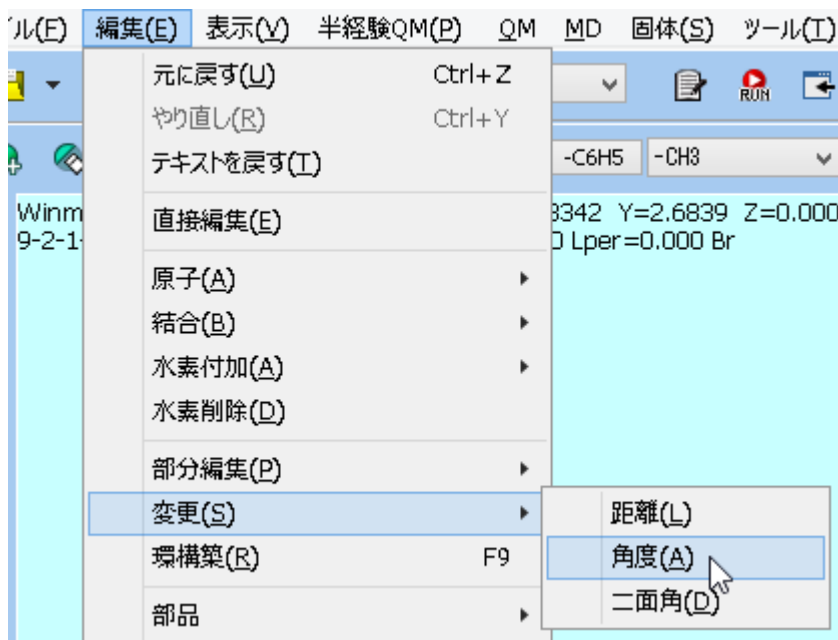
Length ?

3

OK Cancel

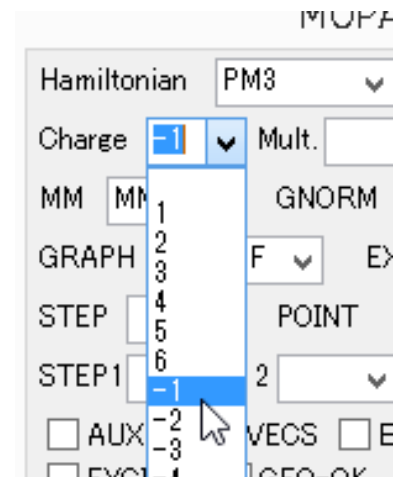
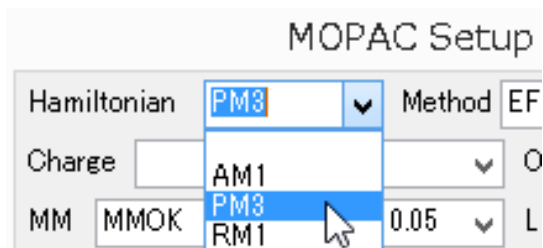
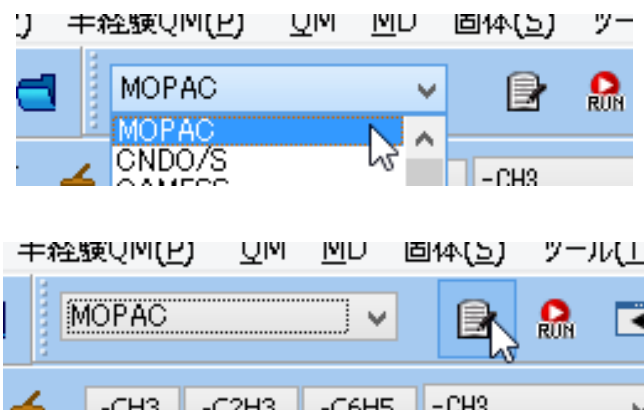
I. モデルの作成

メインメニューから[編集]-[変更]-[角度]を選択し、[Charge Value]ウインドウで「109」と入力し[OK]ボタンを押すと、1C-2C-9Br間の角度が109° に変更される。



II. スキャン計算

メインウィンドウの[ソルバープログラム]プルダウンで[MOPAC]を選択し、その右の[キーワード設定]ボタンを押す。開いたMOPAC Setupウィンドウで、[Hamiltonian]に[PM3]、[Charge]に[-1]を選択し、ウィンドウ左下の[Set]ボタンをクリックする。



II. スキャン計算

メインウインドウ右の座標表示部分で、下の[XYZ]にチェックを外し、Z-Matrix表示にする。次に、9Brの行を選択し、9BrのZ-Matrixが下図のようになっていることを確認する。このZ-Matrixは次のような状態を意味する。

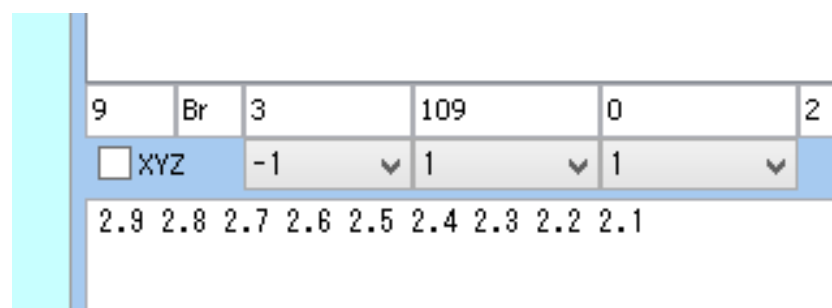
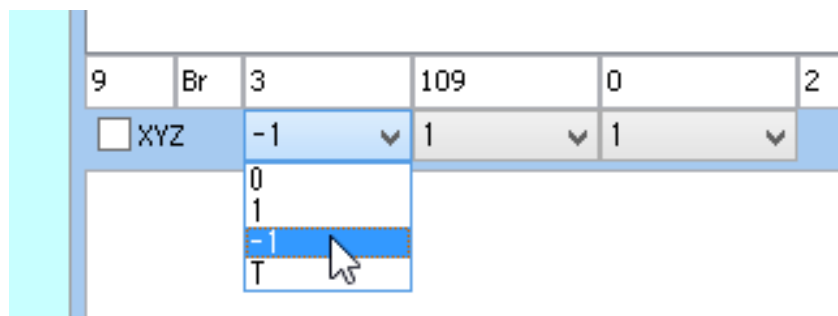
Bond(9Br-2C) : 3 Å
 Angle(9Br-2C-1C) : 109°
 Dihedral(9Br-2C-1C-3H) : 0°

9	Br	3
<input type="checkbox"/>	XYZ	-1
2.9	2.8	2.7 2.6

1	C	0.00000	1	0.0000	1	0.0000	1	0	0	0
2	C	1.49380	1	0.0000	1	0.0000	1	1	0	0
3	H	1.10000	1	109.0000	1	0.0000	1	1	2	0
4	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	1	2	3
5	H	1.10000	1	109.0000	1	-120.0000	1	1	2	3
6	H	1.10000	1	109.0000	1	-60.0000	1	2	1	3
7	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	2	1	6
8	Cl	1.76000	1	109.0000	1	-120.0000	1	2	1	6
9	Br	3.00000	1	109.0000	1	0.0000	1	2	1	3

II. スキャン計算

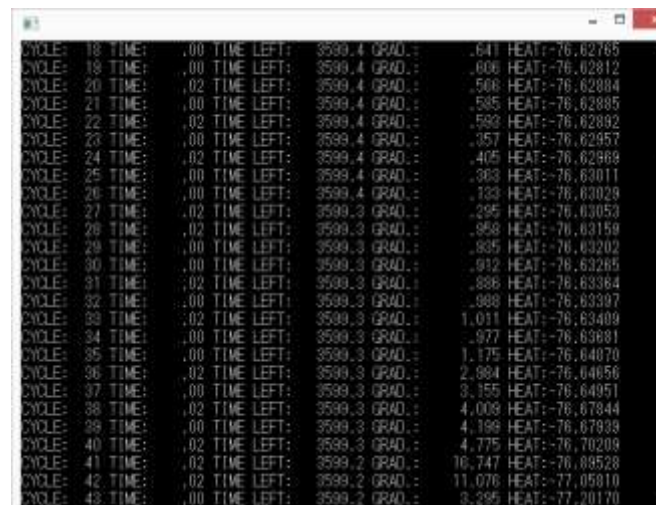
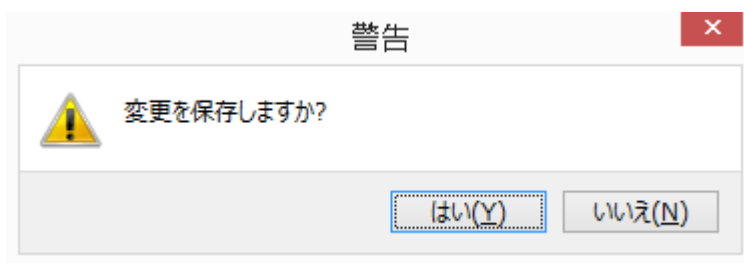
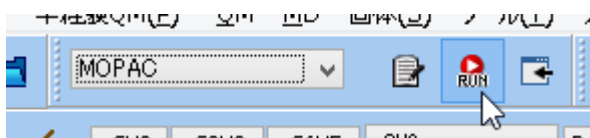
Z-Matrixが表示されているリストの下部の、「3」と表示されたBondの欄の下の最適化フラグのプルダウンを「1」(可変)から「-1」(スキャン)に変更する。
(その横のAngle, Dihedralの最適化フラグは「1」から変更しない。)
そして、その下の大きな欄に、9Br-2C間の結合距離をスキャンする値を「2.9 2.8 2.7 2.6 2.5 2.4 2.3 2.2 2.1」(スペース区切り)と記入する。



II. スキャン計算

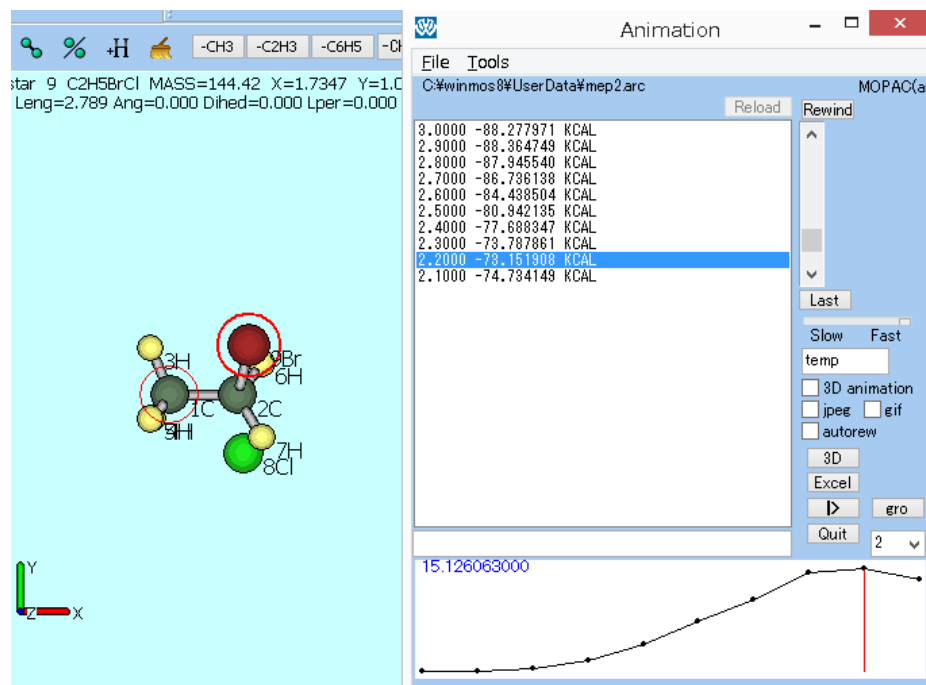
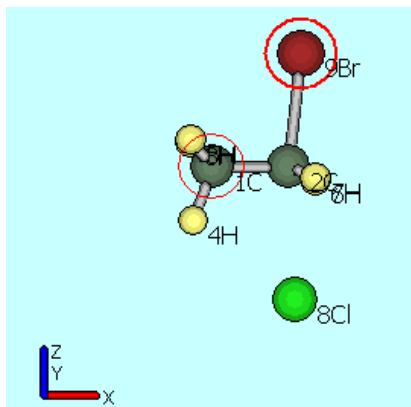
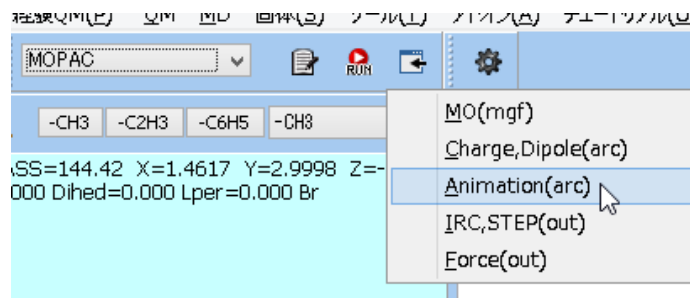
メインウィンドウ上部の[計算実行]ボタンをクリックする。「変更を保存しますか？」と聞かれたら[はい]をクリックする。続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し(仮にファイル名は「scan.dat」とする)、[保存]ボタンを押すと、ファイルが保存され、黒いウィンドウが開きMOPACの処理が開始される。

MOPACの処理は数秒で終了し、メイン画面に計算結果のscan.arcが自動で読み込まれる。



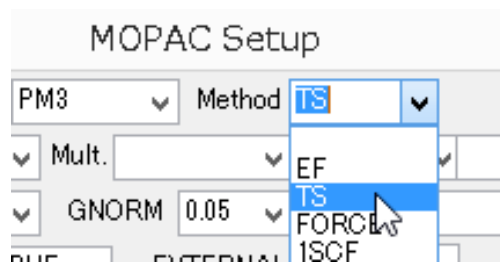
II. スキャン計算

メインウィンドウ上部の[インポート]ボタンで[Animation(arc)]をクリックし、デフォルトで選択されるファイル(scan.arc)を開く。開いたAnimationウィンドウで、エネルギー極大値を示す、Bond長2.2の9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。



III. TS計算

メインウィンドウの[キーワード設定]ボタンをクリックし、MOPAC Setupウィンドウで[Method]に[TS]を選択する。[Set]ボタンを押してMOPAC Setupウィンドウを閉じる。メインウィンドウ右の座標表示部分で9Brを選択し、Bondの最適化フラグを「-1」から「1」に戻す。

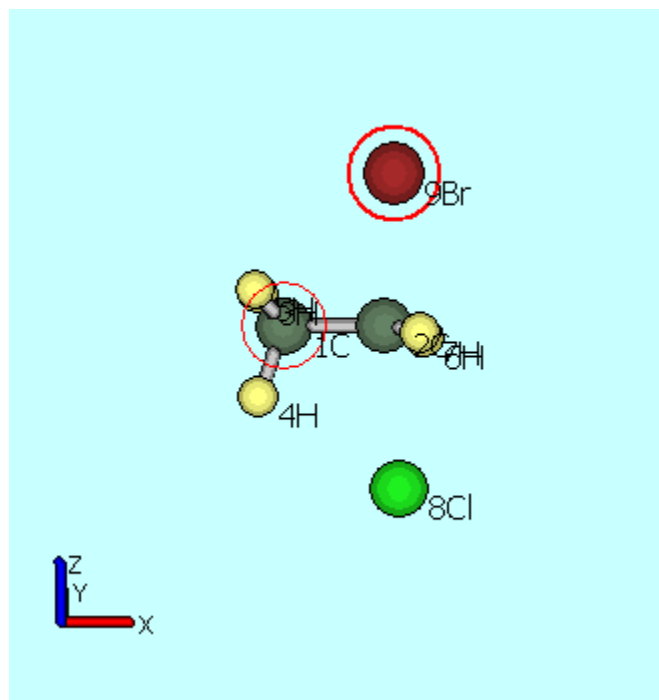


7	H	1.09173	1	119.3492	1	-150.7994	1	2	1	6
8	Cl	2.57244	1	93.0024	1	-75.4054	1	2	1	6
9	Br	2.20000	1	96.8170	1	60.4696	1	2	1	3

9	Br	2.2	96.817	60.4696	2	1	3
<input type="checkbox"/>	XYZ	1	1	1			
		0					
		1					
		-1					
		T					

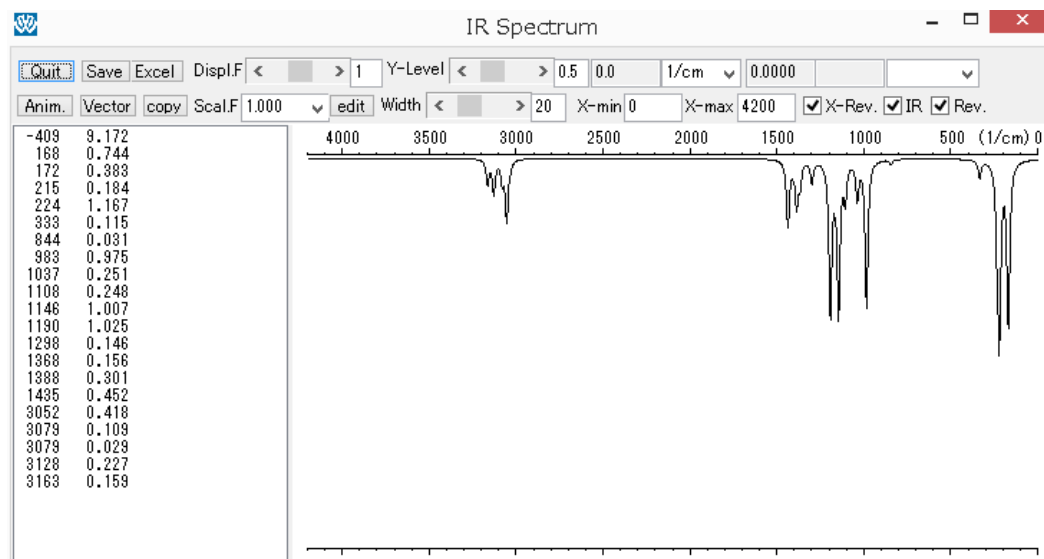
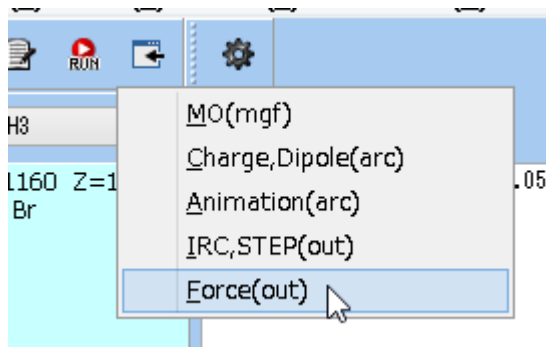
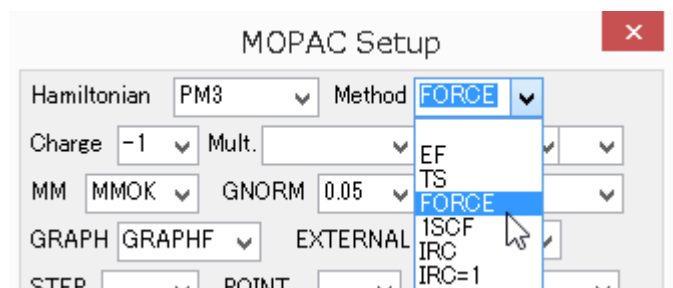
III. TS計算

スキャン計算と同様にMOPACを実行する。ファイル名は「ts.dat」とする。
計算は一瞬で終了し、計算結果のts.arcが自動的に開かれ、TS計算から求められた遷移状態の構造がメインウィンドウに出現する。



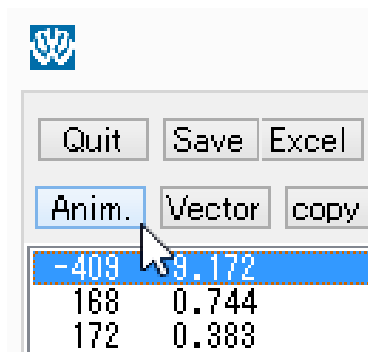
IV. 振動計算

再びMOPACキーワード設定を開き、[Method]に[FORCE]を選択し[Set]ボタンを押す。その後MOPACを実行し(ファイル名はfreq.datとする)、計算終了後、メインウインドウの[インポート]から[Force(out)]をクリックする。デフォルトで選択されるファイル(freq.out)を開くと、振動スペクトルが表示されたIR Spectrumウインドウが開く。

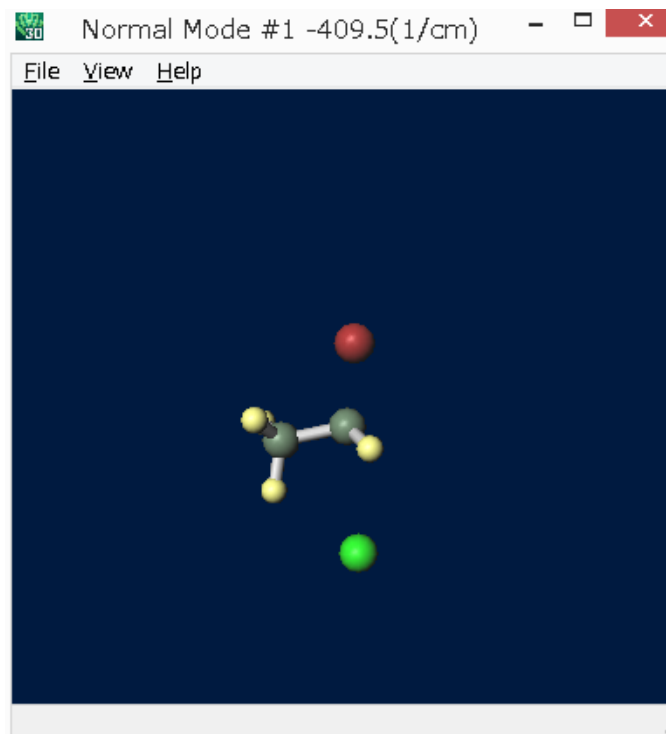


IV. 振動計算

IR Spectrumウインドウ左のリストで、虚振動(-409)が一つしかないことを確認する。そして、その振動の行を選択し、その上の[Anim.]ボタンをクリックすると、Winmostar 3D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 3DとIR Spectrumウインドウは閉じる。

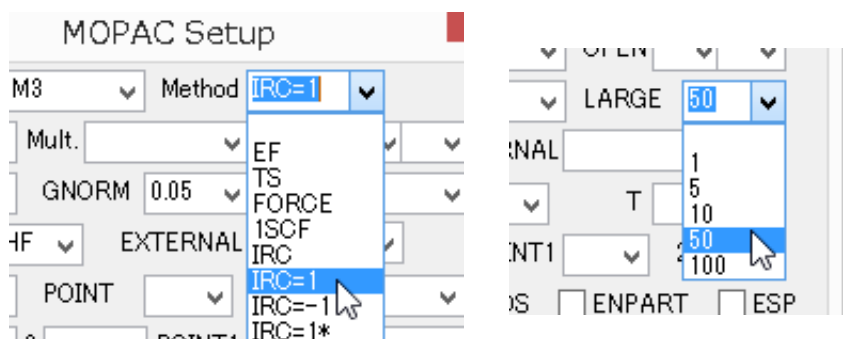
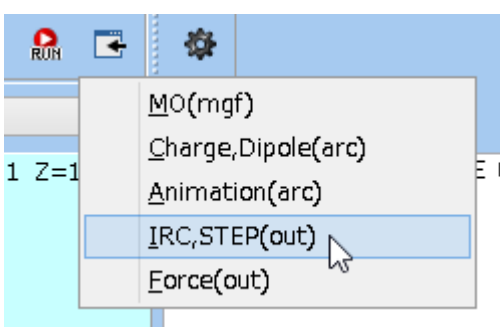
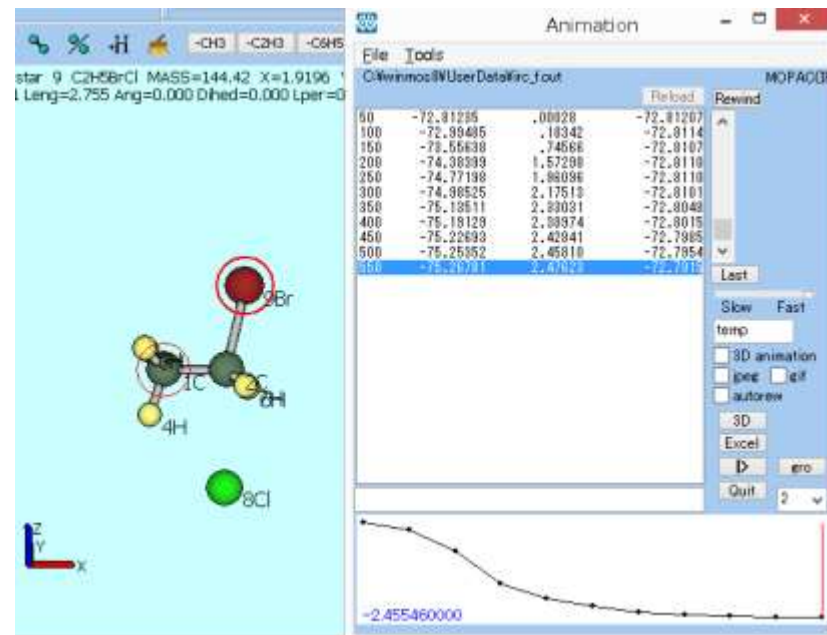


Quit	Save	Excel
Anim.	Vector	copy
-409	9.172	
168	0.744	
172	0.383	



V. IRC計算

再びMOPACキーワード設定において、[Method]に[IRC=1]、[LARGE]に[50]を選択し、[Set]ボタンを押す。その後MOPACを実行する(ファイル名は「irc_f.dat」とする)。計算終了後、[インポート]ボタンで[IRC,STEP(out)]をクリックし、デフォルトで選ばれるファイル(irc_f.out)を開くと、Animationウインドウが開き、反応座標に沿ったアニメーションとエネルギー変化を見ることができる。

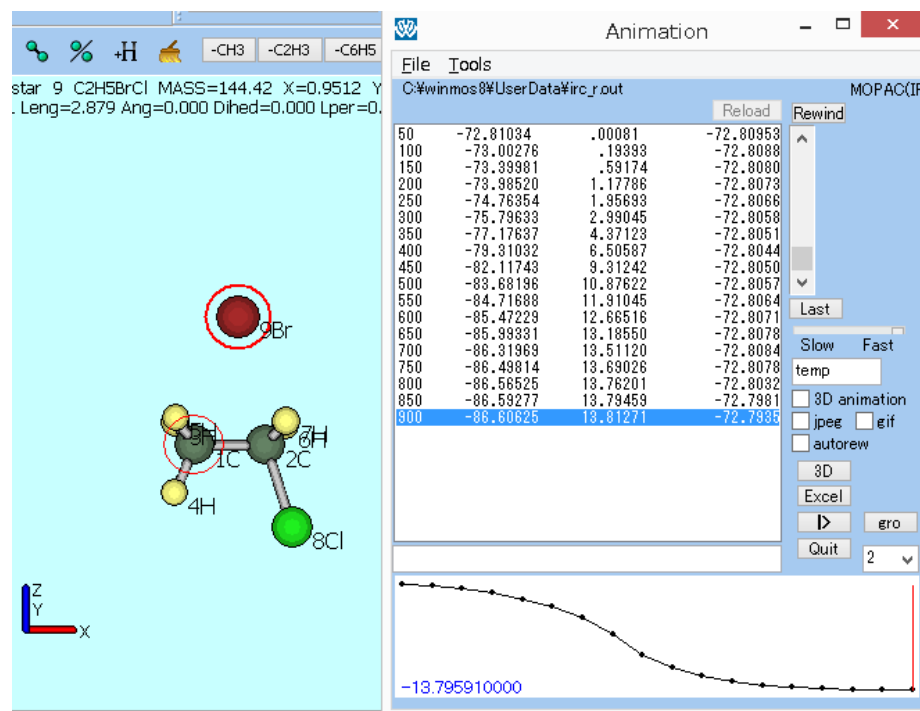
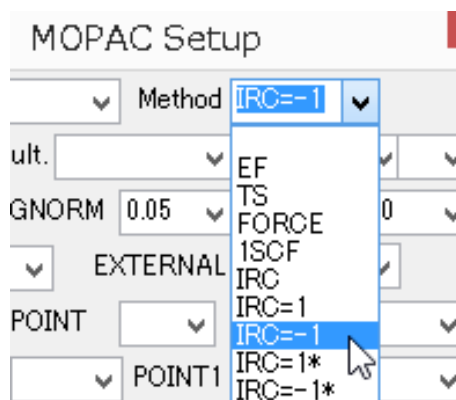




The Animation window displays the following energy profile data:

Step	Energy (eV)	Distance (Å)	Angle (deg)
50	-72.81285	.00028	-72.81207
100	-72.80405	.10342	-72.8114
150	-72.85638	.74668	-72.8107
200	-74.38333	1.57298	-72.8110
250	-74.77198	1.86096	-72.8110
300	-74.88525	2.17513	-72.8101
350	-75.18511	2.33031	-72.8048
400	-75.18129	2.38974	-72.8015
450	-75.22693	2.42841	-72.7985
500	-75.25052	2.45818	-72.7954
550	-75.25711	2.47013	-72.7915

V. IRC計算

先ほどのIRC計算の計算条件を編集して、逆方向のIRC計算を行いたいのので、メインウィンドウで、先ほどのIRC計算の入力ファイル(irc_f.dat)を開く。次に、MOPACキーワード設定を開き、[Method]に[IRC=-1]を指定し、[Set]ボタンを押す。その後、先ほどと同様にMOPACを実行し(ファイル名はirc_r.datとする)、[インポート]-[IRC,STEP(out)]からアニメーションを表示すると、先ほどと逆方向のIRC計算の結果が表示される。



facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_au_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

