

Winmostar™ チュートリアル

Gaussian

化学反応解析 (MEP・IRC計算)

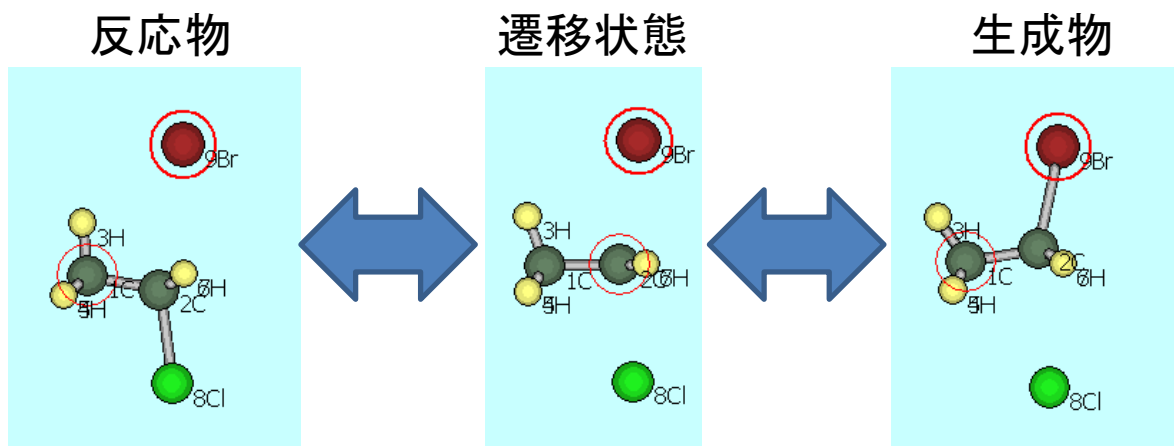
V9.2.0

株式会社クロスアビリティ

2019年4月22日

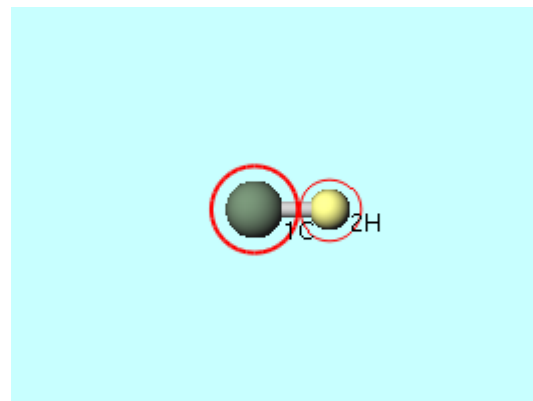
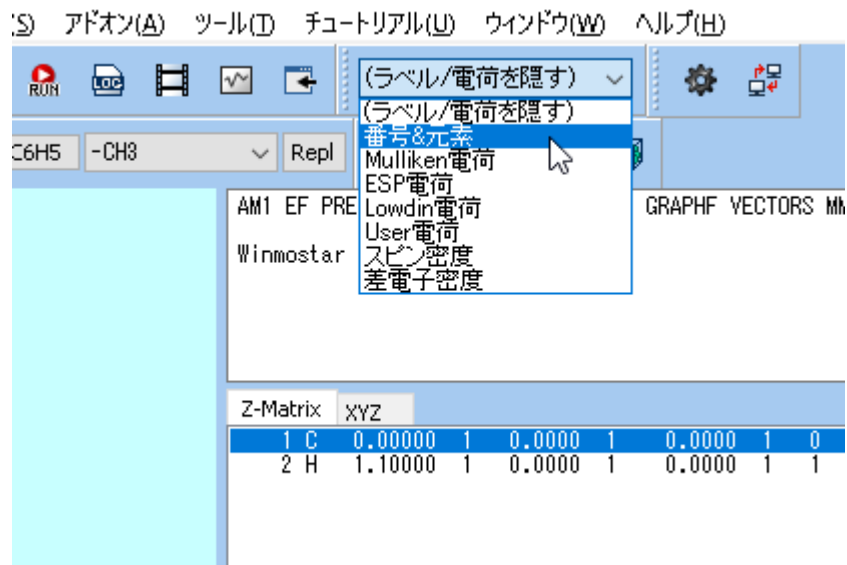
概要

- 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。



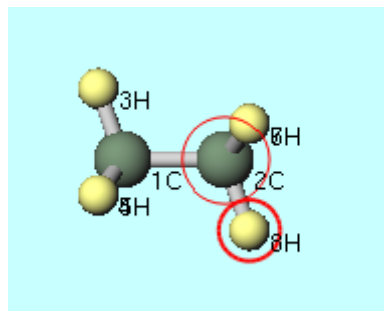
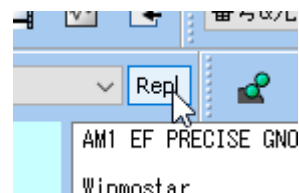
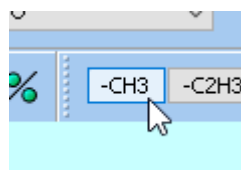
I. モデルの作成

Winmostarを起動し、メインウイ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。また、ファイル | 座標出力形式を切り替え | Z-Matrix形式にチェックを入れる。



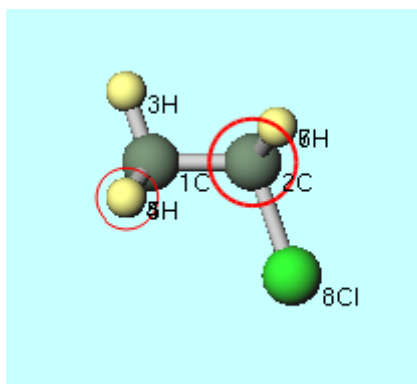
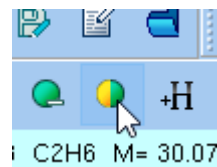
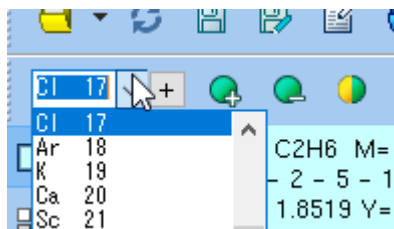
I. モデルの作成

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。



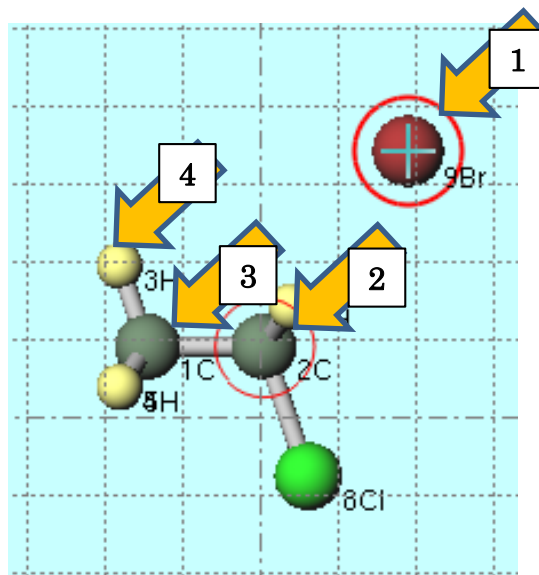
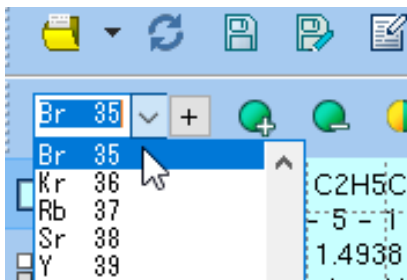
I. モデルの作成

8Hの原子が赤丸で選択された状態で、メインウインドウ上部の編集操作で適用される元素を選択メニューから **Cl 17**を選択する。次に、元素を変更ボタンをクリックし、クロロエタンを作成する。



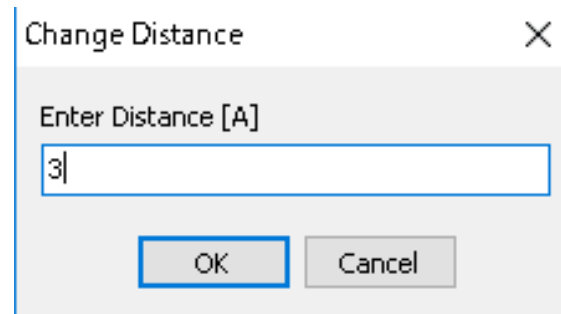
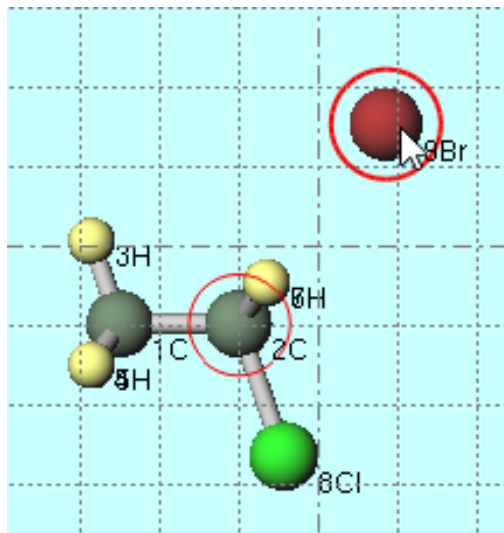
I. モデルの作成

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。次に、メインウインドウ上部の編集操作で適用される元素を選択メニューから **Br 35** を選択する。次に、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、下図の茶色の原子のあたりをクリックしてBr原子を置く。続けて、**2C**、**1C**、**3H**の原子をクリックし、Br原子がZ-Matrix上で接続する原子を指定する。



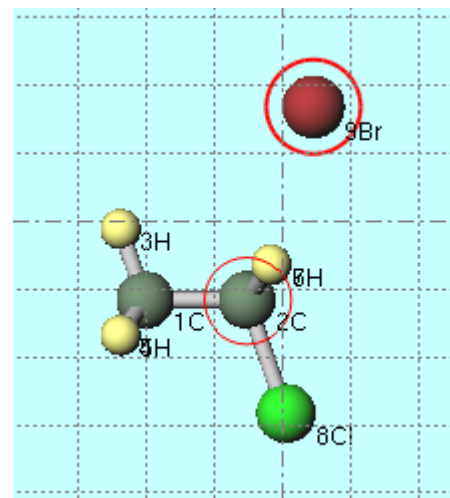
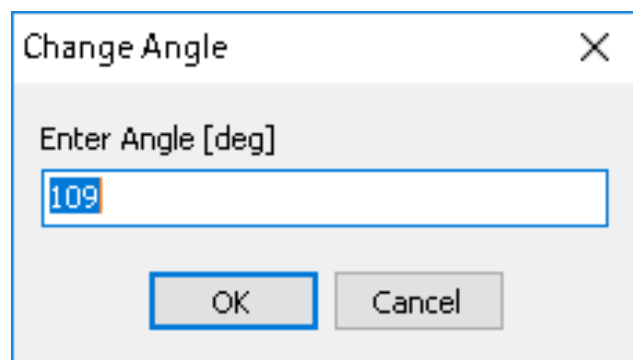
I. モデルの作成

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 | 選択原子間の距離/角度 | 距離**を選択する。開いたダイアログで「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。



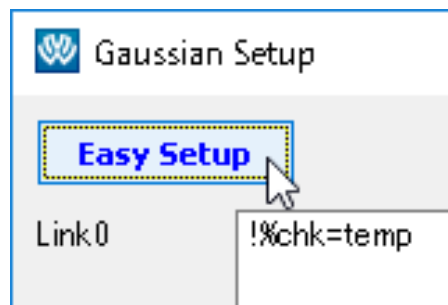
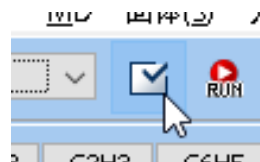
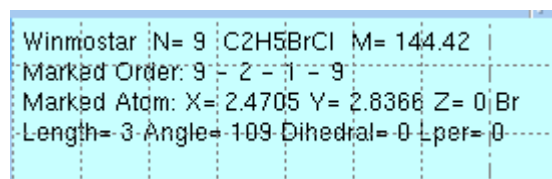
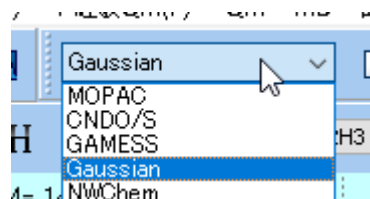
I. モデルの作成

続けてメインメニューから編集 | 選択原子間の距離/角度 | 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-9Br間の角度が109° に変更される。



II. スキャン計算

ソルバを選択メニューで**Gaussian**を選択する。次に、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(**9Br**と**2C**)が選ばれていることを確認する。違う場合は**2C**→**9Br**と左クリックする。次に、**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。



II. スキャン計算

Easy Setupウィンドウで、**Charge**に-1を選択する。次に、**Scan**にチェックを入れる。

Easy Setup

%nprocshared 1

hf / sto-3g

Charge -1 Multiplicity 1

Solvent

Optimize Energy

Method

None IR/Raman

TDDFT NMR

TS IRC Forward

Scan Bond 9-2-1-7

Nstep 10 Step -0.05

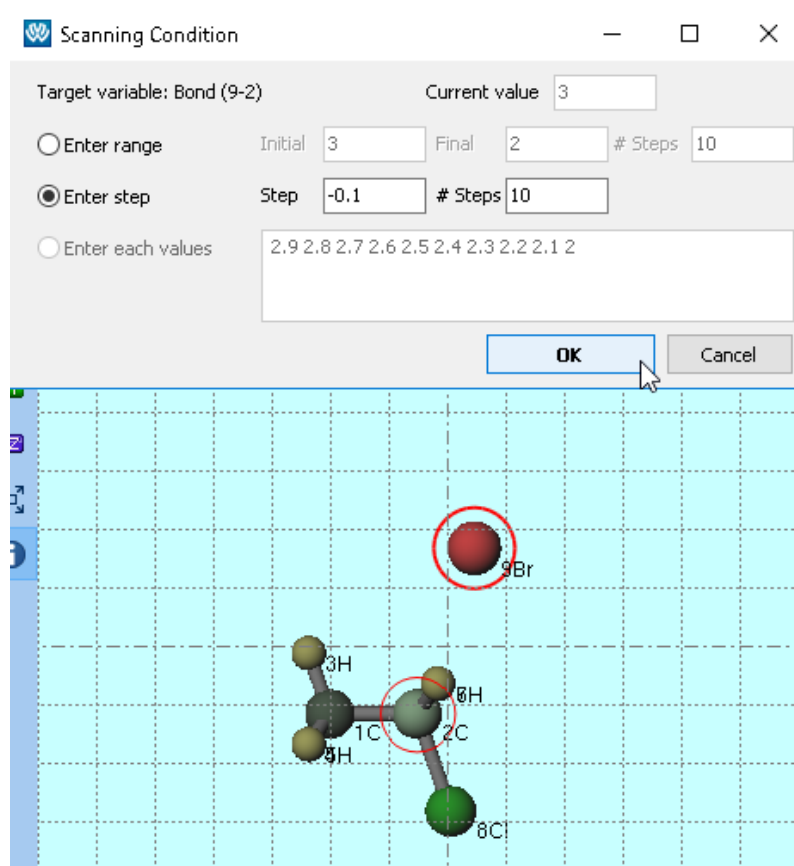
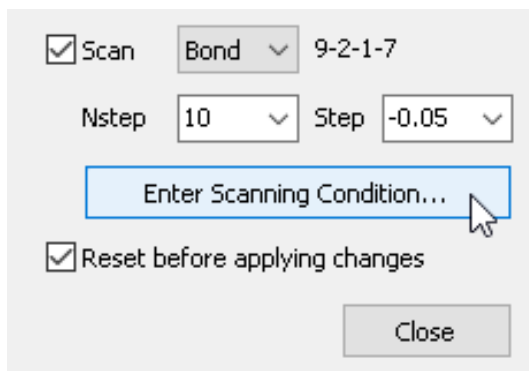
Enter Scanning Condition...

Reset before applying changes

Close

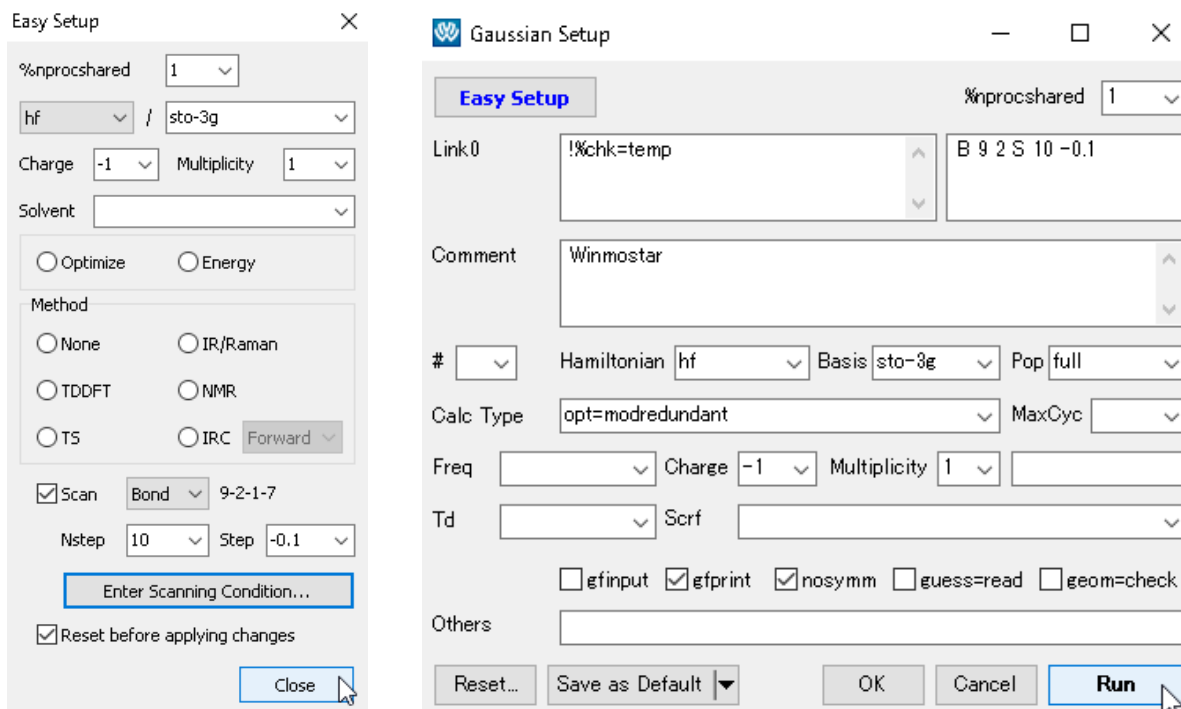
II. スキャン計算

次に**Enter Scanning Condition...** ボタンをクリックする。**Enter step**の**Step**を**-0.1**に変更し、**OK**ボタンを押す。



II. スキャン計算

Easy Setupウィンドウを**Close**ボタンで閉じ、**Gaussian Setup**ウィンドウでは**Run**ボタンを押す。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.gjf」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

メインウィンドウ上部の結果解析ボタンからアニメーション(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。開いたAnimationウィンドウで、エネルギー極大値を示す、7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 screenshot displays the software interface for the Animation window. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a molecule with atoms labeled: 8Cl (green), 1C (grey), 2C (grey), 3H (yellow), 4H (yellow), 5H (yellow), 6H (yellow), 7H (yellow), and 9Br (red). The Animation window is open, showing a list of energy components (comp E(RHF)) for 11 frames. The 7th frame is selected, corresponding to the maximum energy value. The plot below the list shows a curve of energy values over time, with a red vertical line indicating the selected frame.

Animation window content:

```

%npocshared=1
# hf/sto-3g opt=modredundant pop=full gprint nosymm

File Control Tools
C:\winmos9\UserData\scan.log
Gaussian Opt
Reload
1 comp E(RHF) = -3076.85477955 7
2 comp E(RHF) = -3076.85215847 7
3 comp E(RHF) = -3076.84846990 7
4 comp E(RHF) = -3076.84349031 8
5 comp E(RHF) = -3076.83752507 8
6 comp E(RHF) = -3076.83208383 8
7 comp E(RHF) = -3076.83114454 7
8 comp E(RHF) = -3076.84281940 7
9 comp E(RHF) = -3076.85744628 8
10 exceeded E(RHF) = -3076.87001941 8
11 comp E(RHF) = -3076.89140109 6

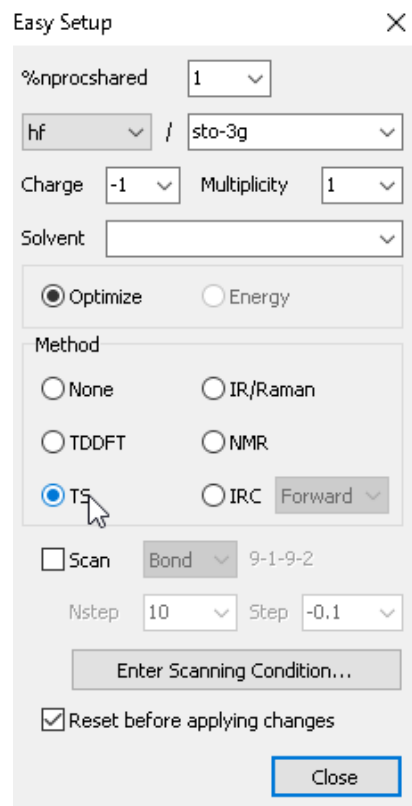
Speed :
Loop
Open Viewer
Export...
Close

Result Optimization completed.
Plot Column 5 Excel Custom Plot
0.392239682


```

III. TS計算

再びキーワード設定ボタン→**Easy Setup**ボタンをクリックする。**Method**に**TS**を選択し、**Easy Setup**ウィンドウを**Close**ボタンで閉じる。**Gaussian Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックし、ファイル名「ts.gjf」として計算を開始する。



III. TS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、デフォルトで選択されるファイル(ts.log)を開く。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。その後**Close**ボタンを押ししてAnimationウィンドウを閉じる(下図参照)。



The screenshot shows the Animation window with the following content:

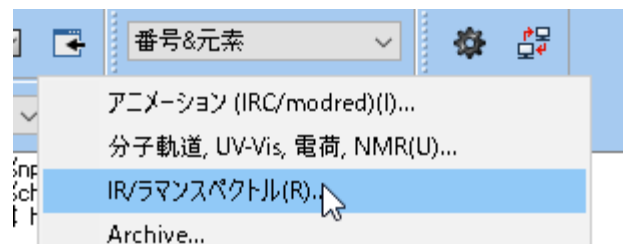
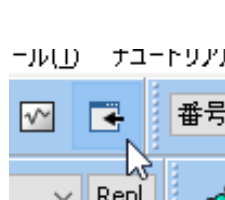
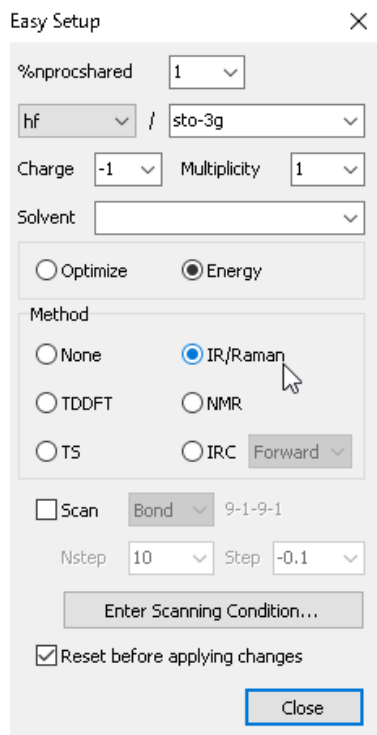
- Top Panel:**
 - File: C:\winmos9\UserData\ts.log
 - Energy list (E(RHF) values):

1	E(RHF) = -3076.83114457	10
2	E(RHF) = -3076.83051703	10
3	E(RHF) = -3076.83048718	9
4	E(RHF) = -3076.83048780	7
5	E(RHF) = -3076.83026665	10
6	E(RHF) = -3076.83045792	9
7	E(RHF) = -3076.83045860	9
8	E(RHF) = -3076.83048718	9
9	E(RHF) = -3076.83048779	7
10	E(RHF) = -3076.83033114	10
11	E(RHF) = -3076.83046694	9
12	E(RHF) = -3076.83047360	9
13	E(RHF) = -3076.83048757	8
14	E(RHF) = -3076.83048781	7
15	E(RHF) = -3076.83048780	6
16	E(RHF) = -3076.83048781	6
17	E(RHF) = -3076.83048781	1
- Bottom Panel:**
 - Result: Optimization completed.
 - Plot: Column 4, Excel, Custom Plot
 - Energy value: 0.748086386

The main window displays a ball-and-stick model of a transition state structure with atoms labeled: 8Cl (green), 3C (grey), 3H (yellow), 9Br (red), 5H (yellow), and 4H (yellow). A red circle highlights the bromine atom (9Br). The plot shows a sharp peak in energy corresponding to the transition state.

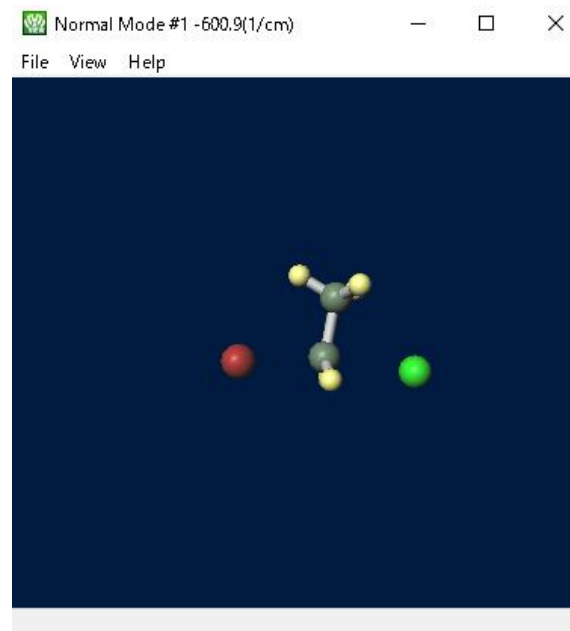
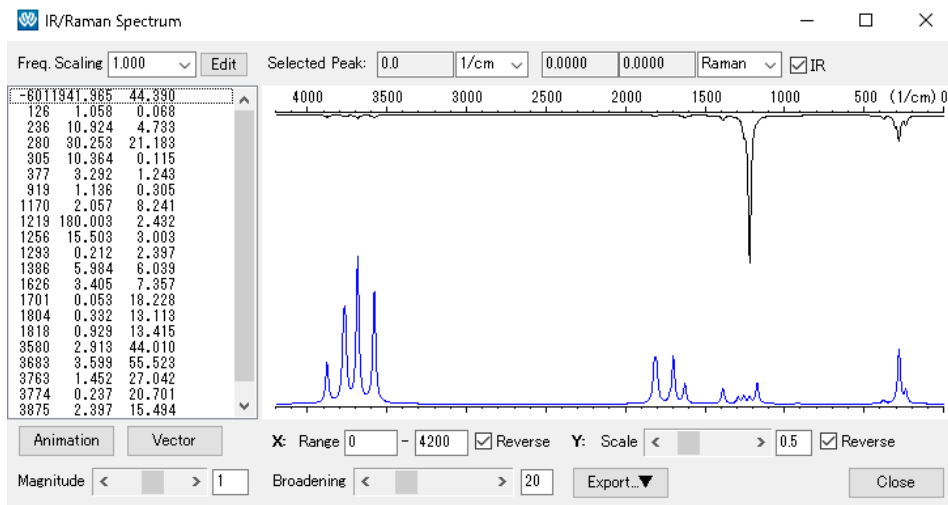
IV. 振動計算

再びキーワード設定ボタン→**Easy Setup**ボタンをクリックする。**Energy**をチェックし、**Method**に**IR/Raman**を選択し、**Easy Setup**ウィンドウを**Close**ボタンで閉じる。**Gaussian Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックし、ファイル名「freq.gjf」として計算を開始する。計算終了後、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。そして、デフォルトで選択されるファイル(freq.log)を開く。



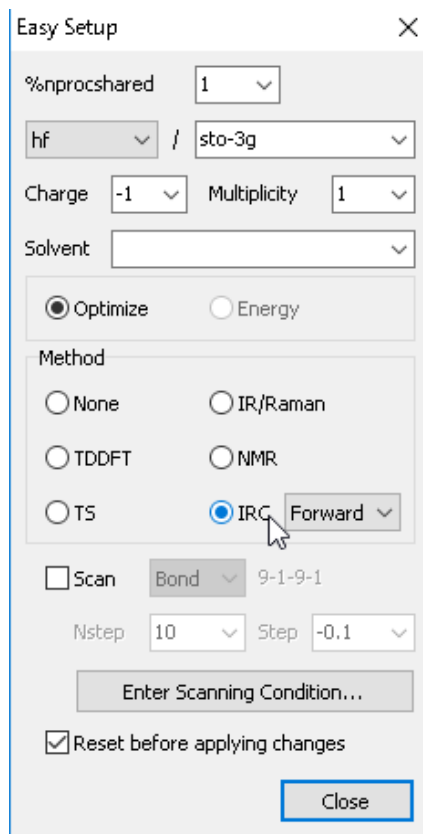
IV. 振動計算

開いたIR/Raman Spectrumウインドウ左のリストで、虚振動(-601)が1つしかないことを確認する。そして、虚振動の行を選択し、**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ウインドウを閉じる。



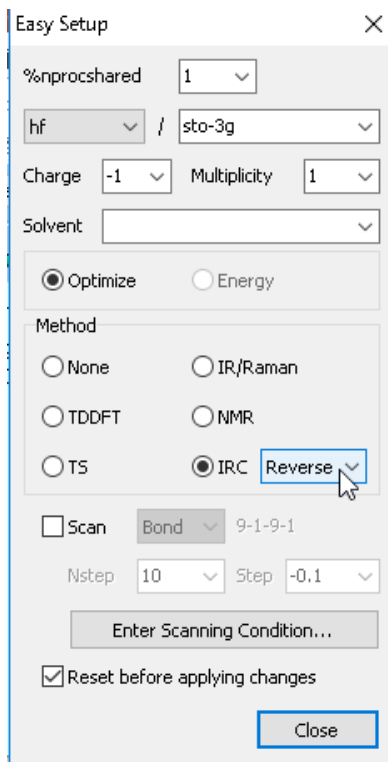
V. IRC計算

再びキーワード設定ボタン→**Easy Setup**ボタンをクリックする。**Method**に**IRC**を選択し、**Easy Setup**ウィンドウを**Close**ボタンで閉じる。**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.gjf」として計算を開始する。



V. IRC計算

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。**Method**にIRCを選択し、今度は横のプルダウンで**Reverse**を選択する。そして、**Easy Setup**ウィンドウを**Close**ボタンで閉じる。**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.gjf」として計算を開始する。



V. IRC計算

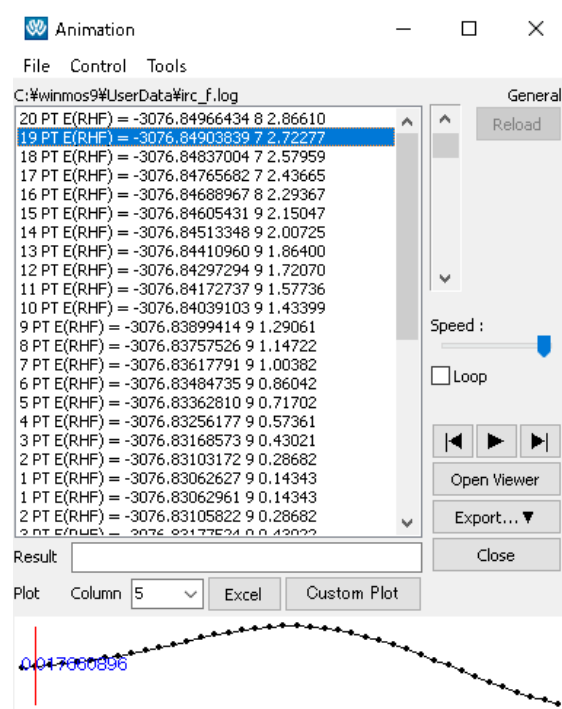
計算終了後、結果解析ボタンからアニメーション(IRC/modred)をクリックする。ここで、デフォルトのファイルではなく、IRC(Forward)計算のlogファイル(irc_f.log)を選択する。そして、AnimationウィンドウのTools | Invert Trajectoryメニューをクリックし、アニメーションを反転させる。

The image shows a sequence of three screenshots illustrating the steps to invert the trajectory animation:

- Top Screenshot:** A close-up of the 'Result' button in the software interface, with a mouse cursor hovering over it.
- Middle Screenshot:** A dropdown menu is open, showing various analysis options. The option 'アニメーション (IRC,STEP)(out)(I)...' is highlighted by the mouse cursor.
- Bottom Screenshot:** The 'Animation' window is open, displaying a list of trajectory points (e.g., '1 PT E(RHF) = -3076.84410960 9 1.86400'). The 'Tools' menu is open, and the 'Invert Trajectory' option is selected.

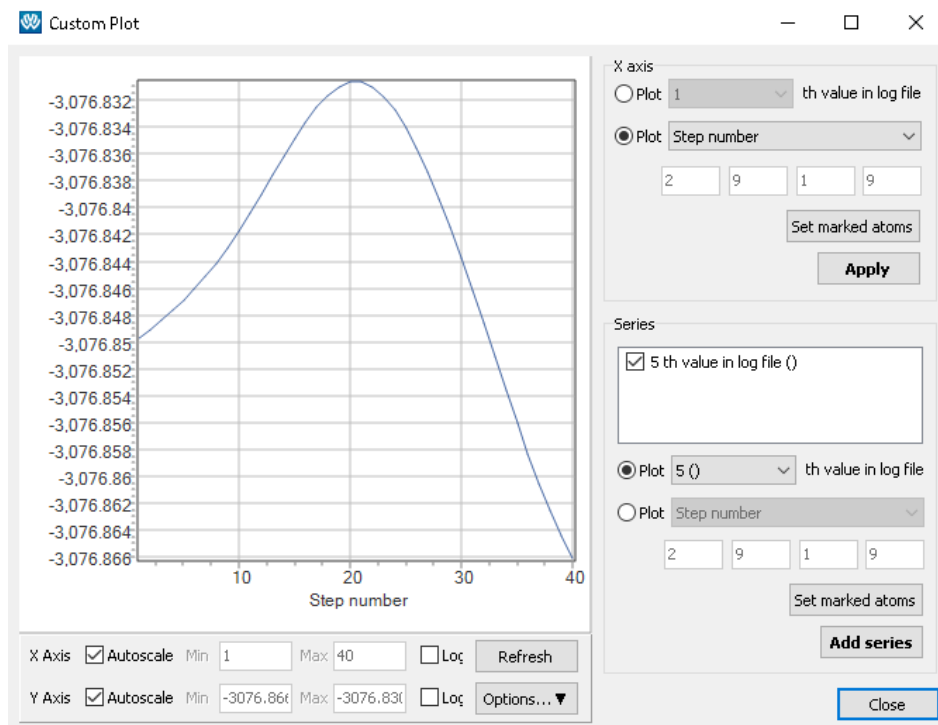
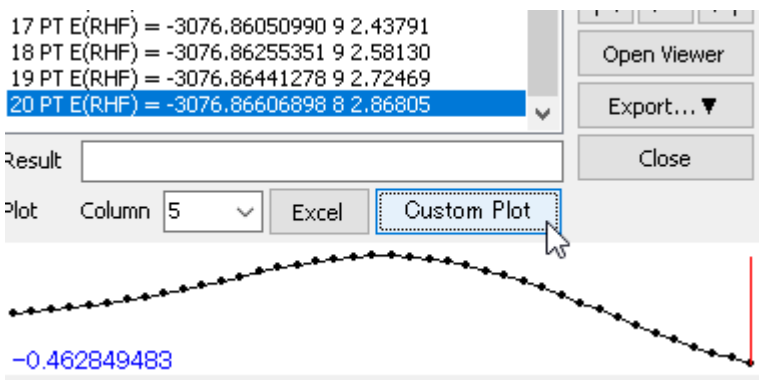
V. IRC計算

そしてAnimationウィンドウが開いた状態で、再び**結果解析ボタン**から**アニメーション (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**をクリックする。ここではIRC (Reverse) 計算のlogファイル(irc_r.log)を開く。「**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。



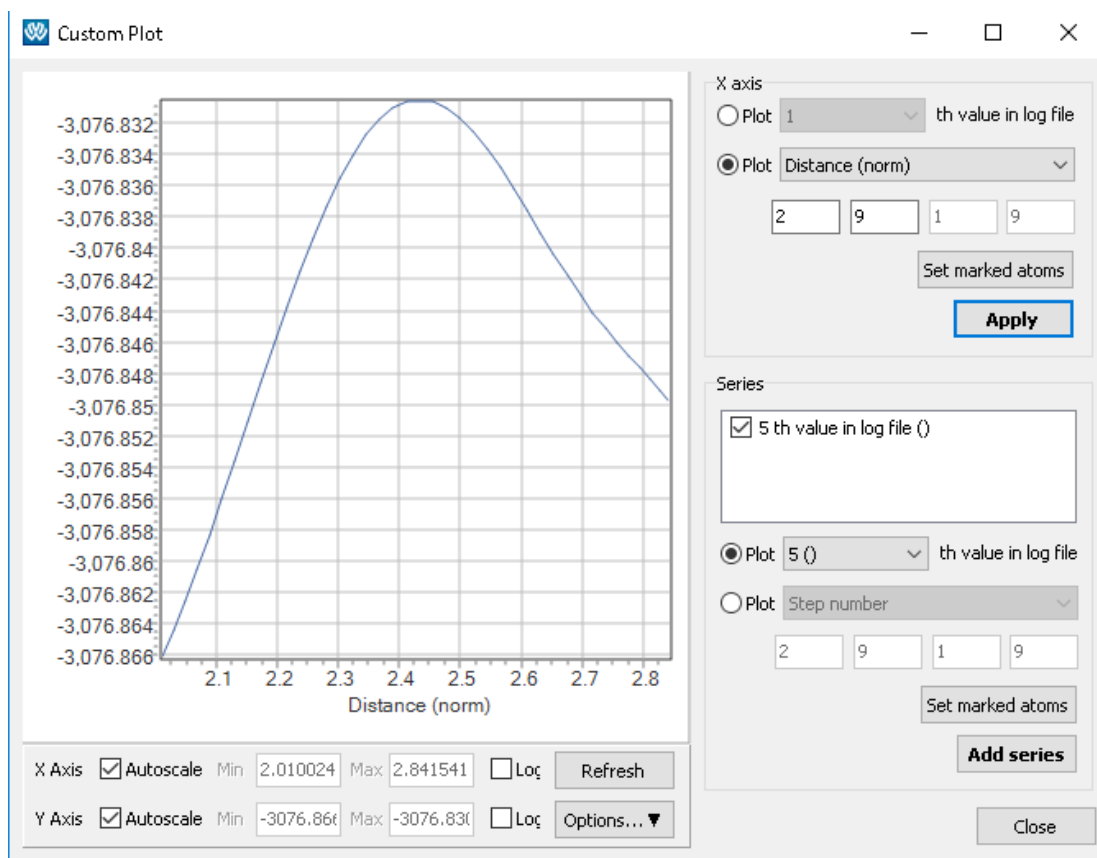
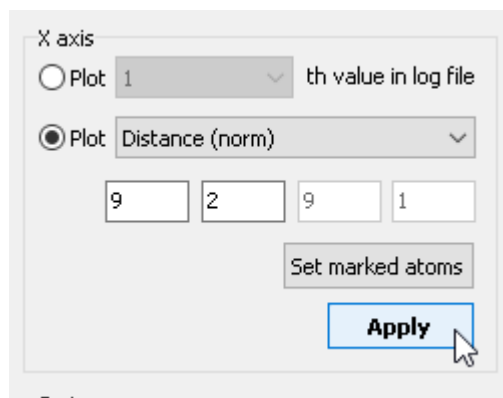
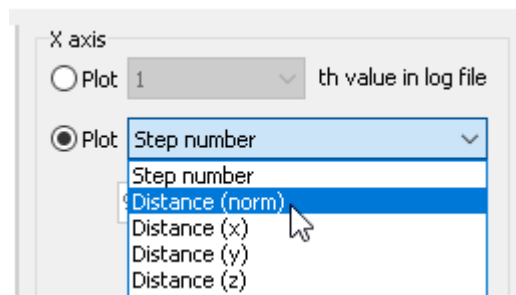
V. IRC計算

次に、**9Br-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**9Br→2C**を続けて左クリックする。そして、**Animation**ウィンドウで**Custom Plot**ボタンをクリックする。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。



V. IRC計算

Custom Plotウィンドウ右のX axisのPlot Step numberをDistance (norm)に変更する。すると、9Br-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。



<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友

アカウント登録 ログイン

X-Ability
クロスアビリティ

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! 138件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ユーザー投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30 · 公開

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 · 公開

