

Winmostar™ チュートリアル

MOPAC

化学反応解析 (MEP・IRC計算)

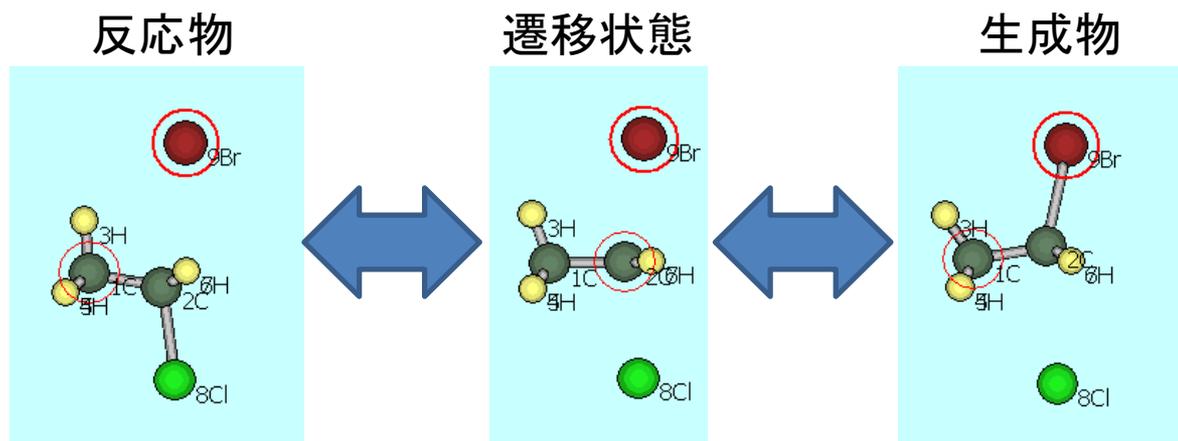
V9.2.0

株式会社クロスアビリティ

2019年4月8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。

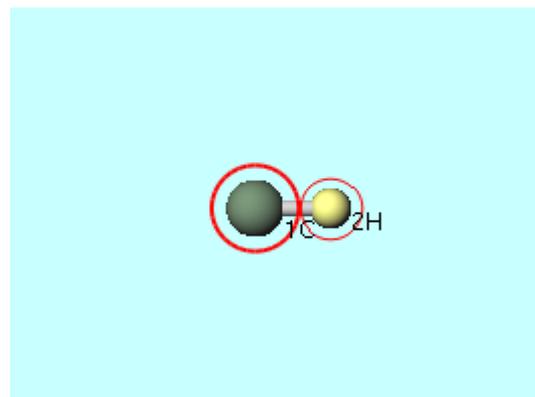
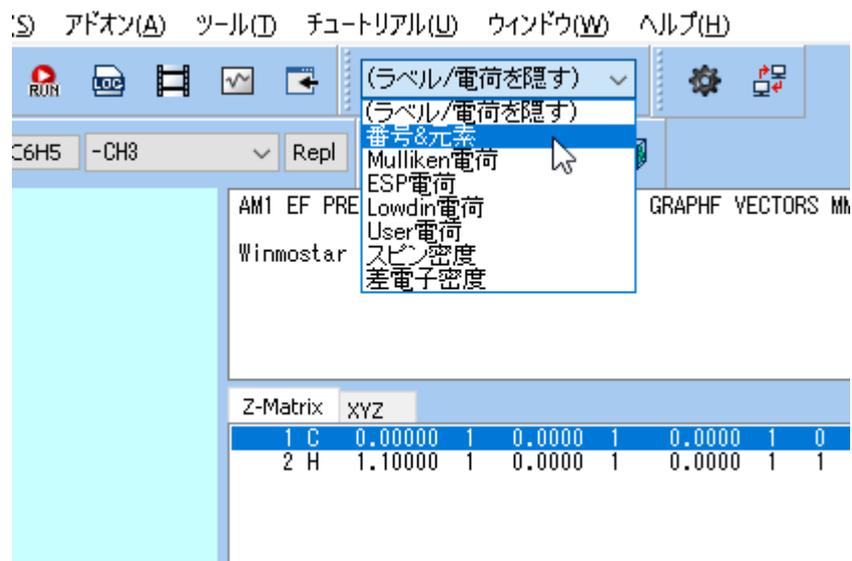


注意点:

- 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。

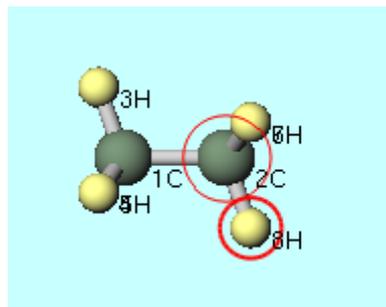
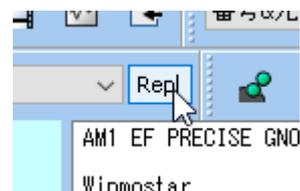
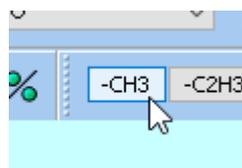
I. モデルの作成

Winmostarを起動し、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。



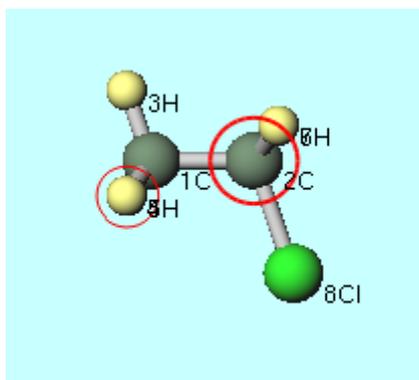
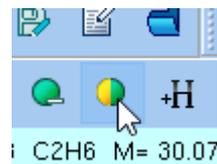
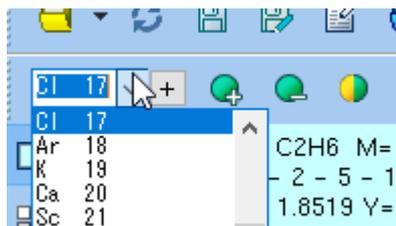
I. モデルの作成

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。



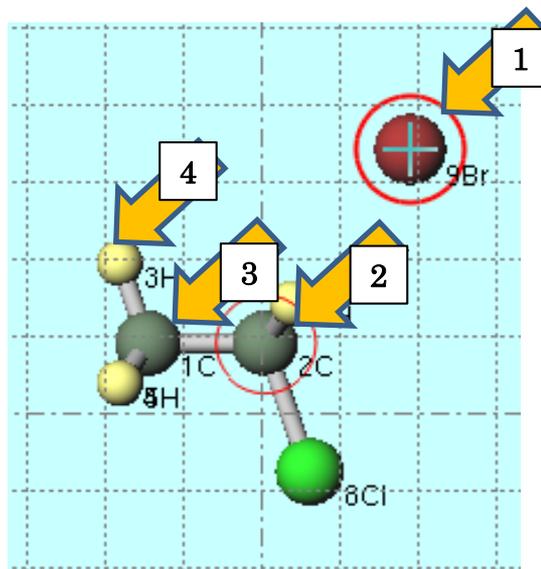
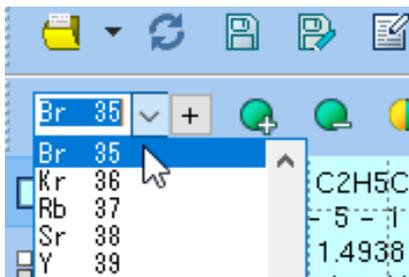
I. モデルの作成

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。



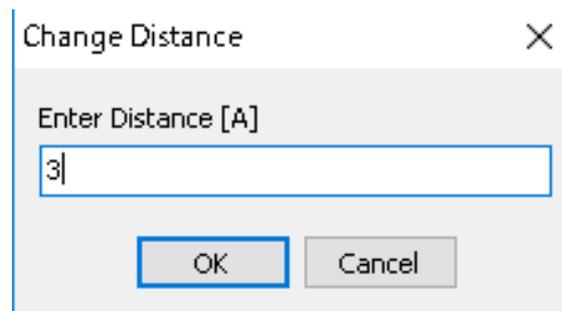
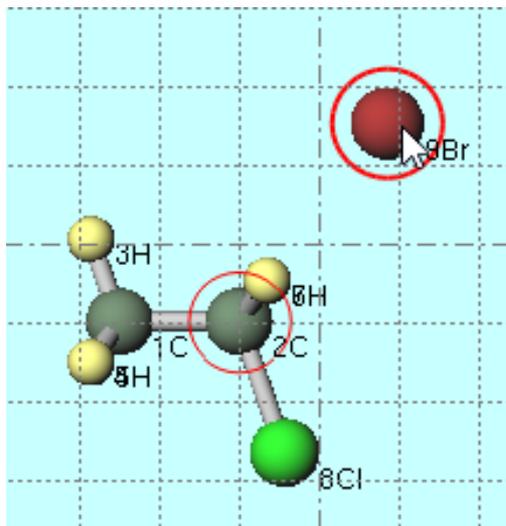
I. モデルの作成

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。



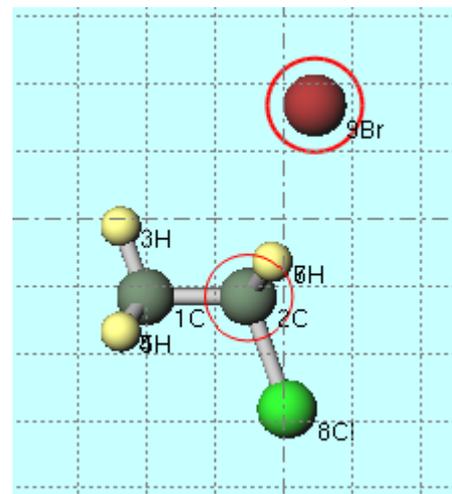
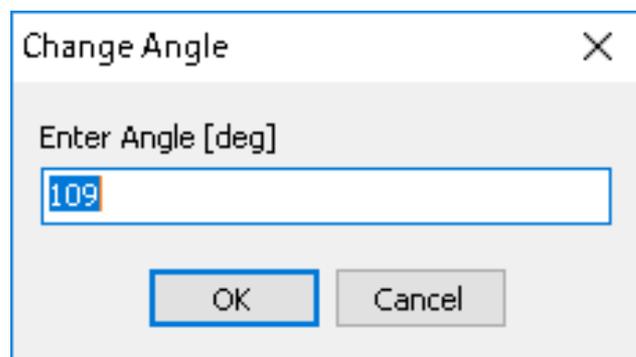
I. モデルの作成

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。



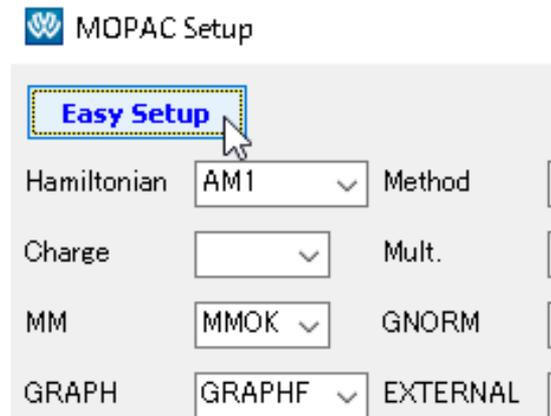
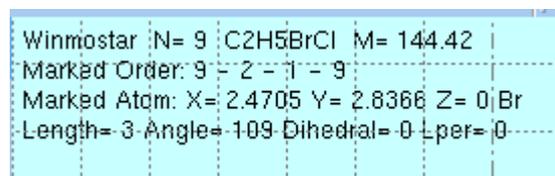
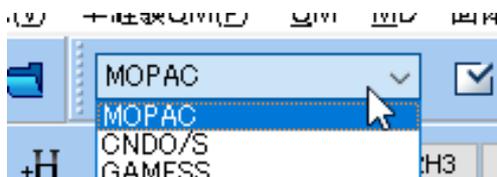
I. モデルの作成

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。



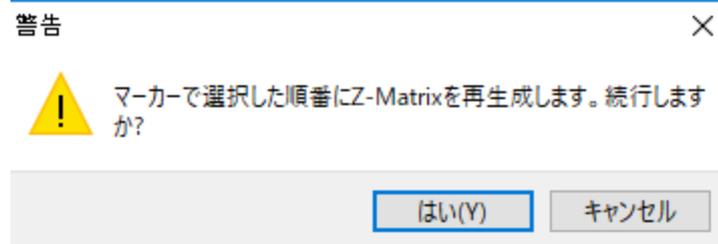
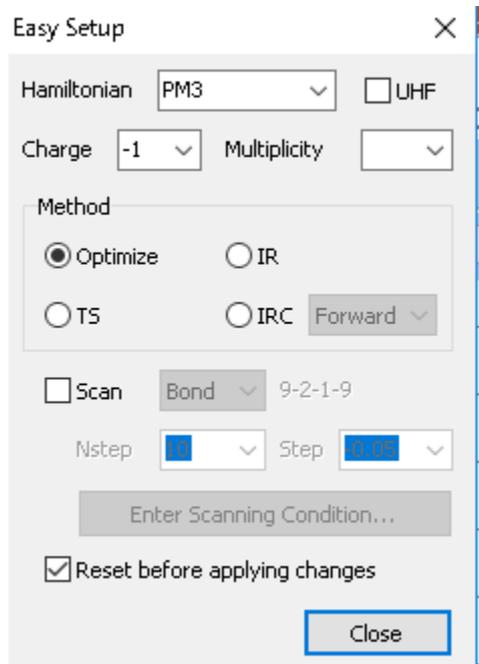
II. スキャン計算

ソルバを選択メニューで**MOPAC**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**MOPAC 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、**Hamiltonian**に**PM3**、**Charge**に**-1**、**Method**に**Optimize**を選択する。次に、**Scan**にチェックを入れると下図の警告が出現するので、**はい**をクリックする。



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。

The image shows two overlapping dialog boxes in a software application. The background is a 3D ball-and-stick model of a molecule with atoms labeled 1C, 2C, 3H, 4H, 5H, 6H, 7C, 8Cl, and 9Br. The 'Easy Setup' dialog box is on the left, and the 'Scanning Condition' dialog box is on the right.

Easy Setup Dialog:

- Hamiltonian: PM3
- Charge: -1
- Method: Optimize (selected)
- Scan: Bond (selected), 9-2-1-3
- Nstep: 10
- Step: -0.05
- Button: Enter Scanning Condition...

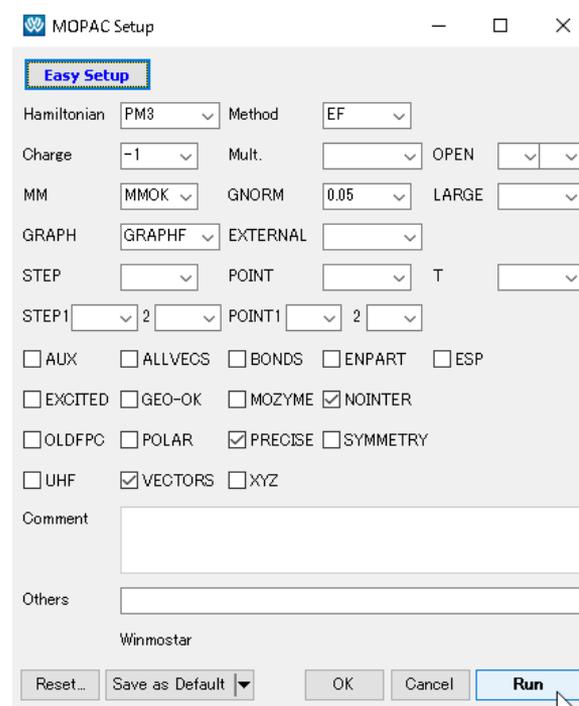
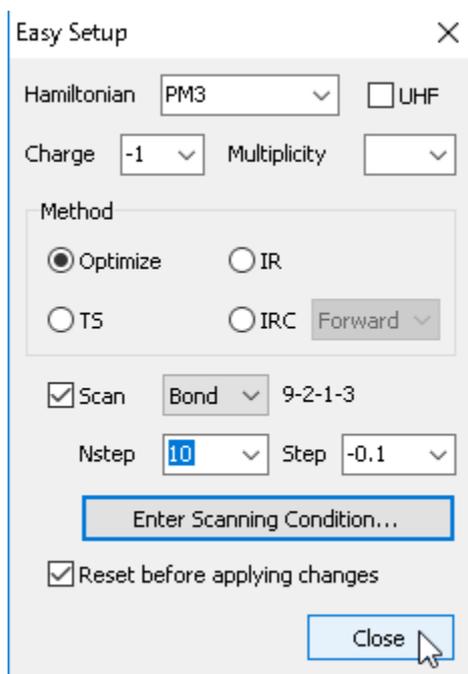
Scanning Condition Dialog:

- Target variable: Bond (9-2)
- Current value: 3
- Enter step (selected): Step -0.1, # Steps 10
- Buttons: OK, Cancel

II. スキャン計算

Easy Setupウィンドウを**Close**ボタンで閉じ、**MOPAC 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.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(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。

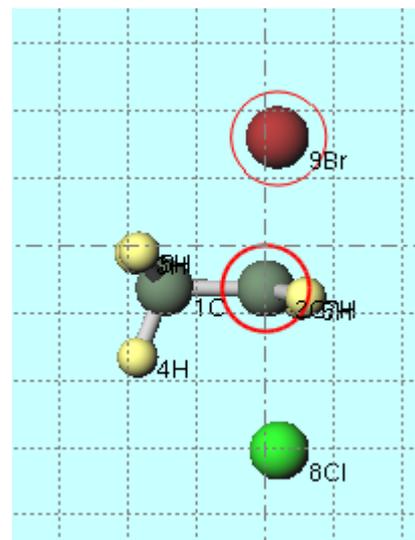
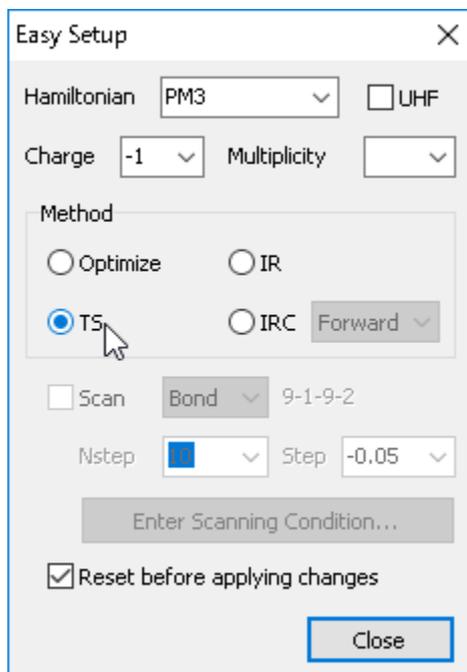
The Animation window shows the following energy values (KCAL) for different bond lengths:

Bond Length	Energy (KCAL)
3.0000	-88.277971
2.9000	-88.364749
2.8000	-87.945540
2.7000	-86.736138
2.6000	-84.438504
2.5000	-80.942135
2.4000	-77.688347
2.3000	-73.787861
2.2000	-73.151908
2.1000	-74.734149
2.0000	-75.241026

The 3D model shows a molecule with atoms labeled 1C, 2C, 3H, 4H, 5H, 6H, 7H, 8Cl, and 9Br. A red circle highlights the bond between atom 1C and atom 9Br.

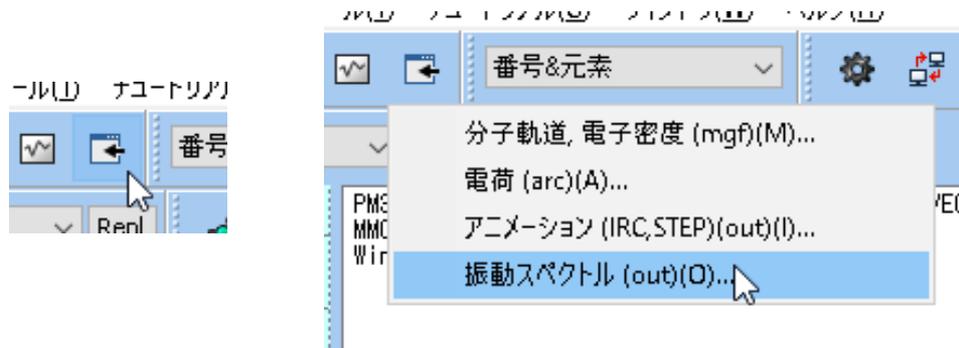
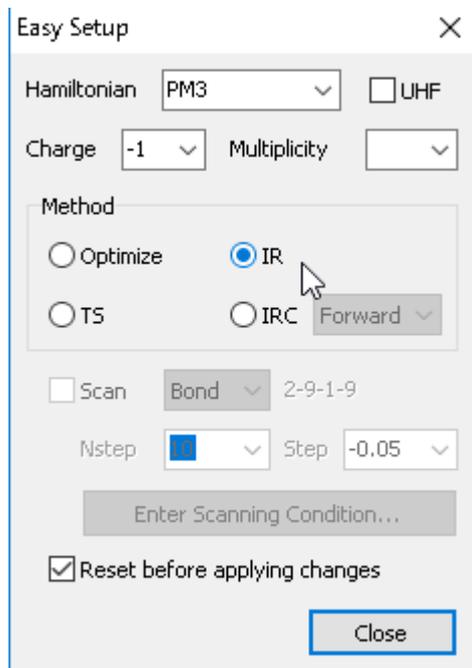
III. TS計算

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。**MOPAC Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックし、ファイル名「ts.dat」として計算を開始する。
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。



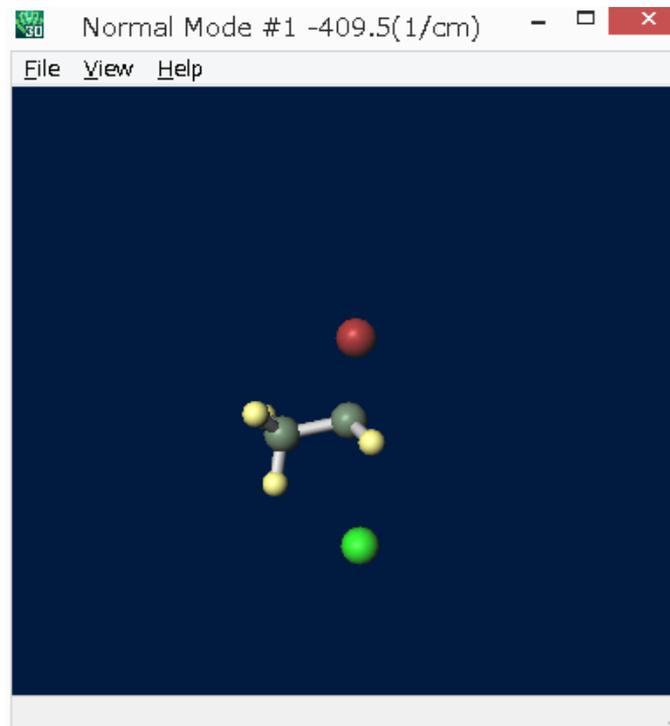
IV. 振動計算

再びキーワード設定ボタン→**Easy Setup**ボタンをクリックする。**Method**に**IR**を選択し、**Easy Setup**ウィンドウを**Close**ボタンで閉じる。**MOPAC Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックし、ファイル名「freq.dat」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**振動スペクトル**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.out)を開く。



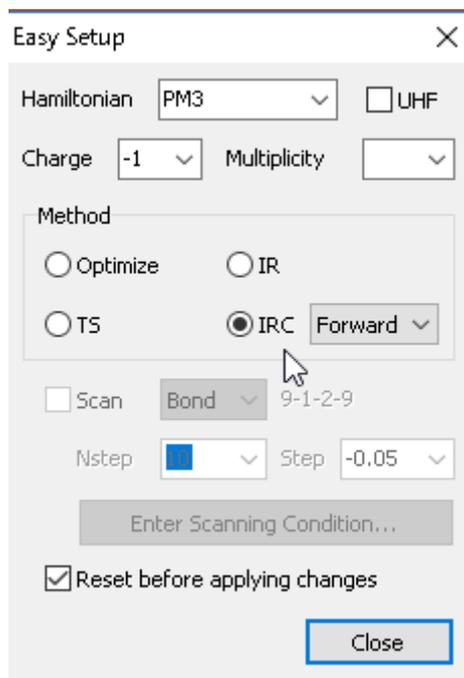
IV. 振動計算

開いたIR Spectrumウィンドウ左のリストで、虚振動(-409)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ウィンドウを閉じる。



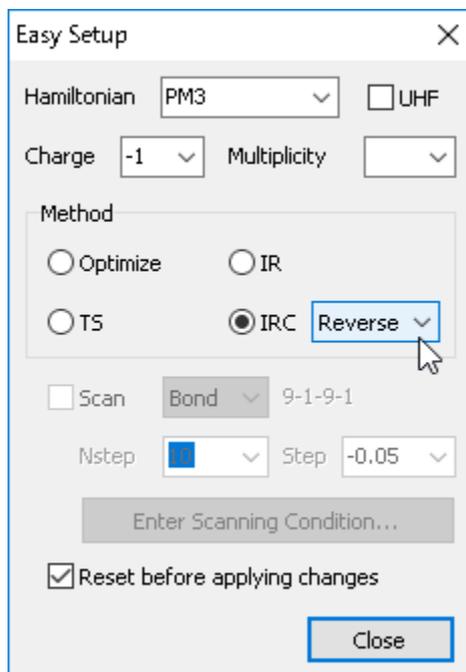
V. IRC計算

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。**MOPAC Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックし、ファイル名「irc_f.dat」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。**MOPAC Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックし、ファイル名「irc_r.dat」として計算を開始する。



V. IRC計算

計算終了後、メインウィンドウの結果解析ボタンからアニメーション(IRC, STEP)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outファイル(irc_f.out)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 screenshot shows the software interface with the following elements:

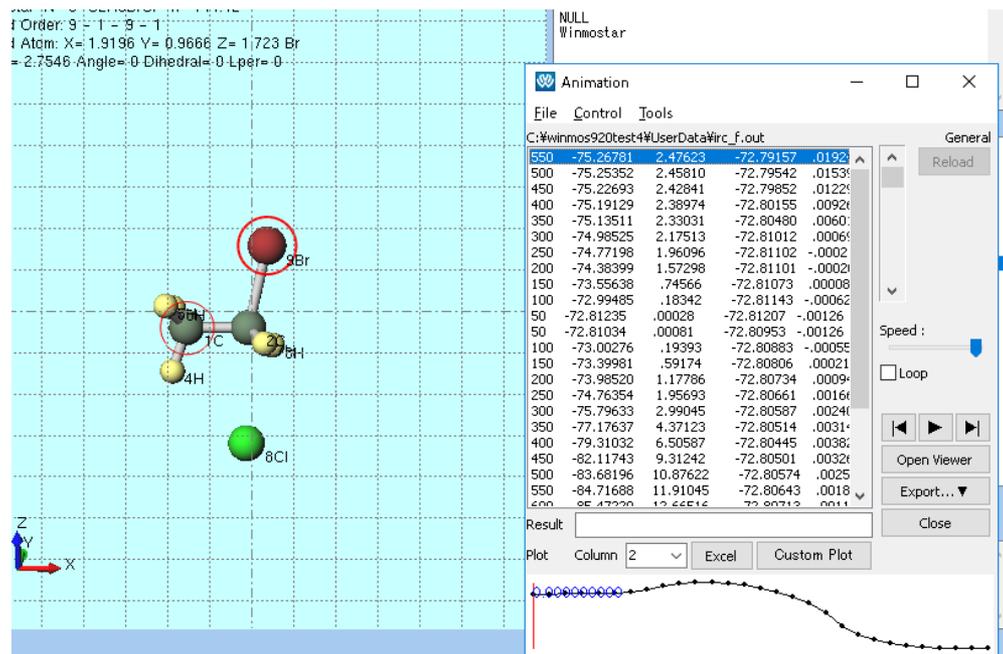
- Main Window:** A menu is open over the '結果解析' (Result Analysis) button. The option 'アニメーション (IRC,STEP)(out)(I)...' is selected.
- Animation Window:** A separate window titled 'Animation' is open. The 'Tools' menu is active, and 'Invert Trajectory' is highlighted. Below the menu, a table lists time steps and coordinates:

Time Step	Coordinate
50	-72.81235
100	-72.99485
150	-73.55636
200	-74.38399
250	-74.77196
300	-74.98525
350	-75.13511
400	-75.19129
450	-75.22693
500	-75.25352
550	-75.26781

Below the table, there are playback controls (play, stop, next) and buttons for 'Open Viewer', 'Export...', and 'Close'. At the bottom, a 'Plot' section shows a graph with 'Column 2' selected, displaying a curve that starts at 0.00000000 and decreases over time.

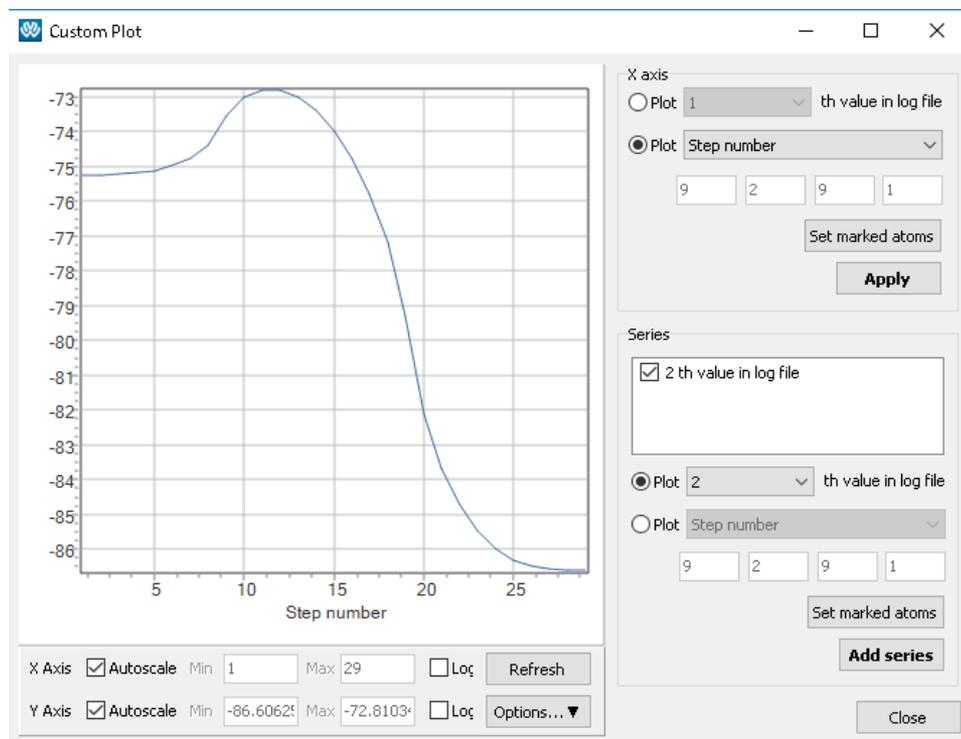
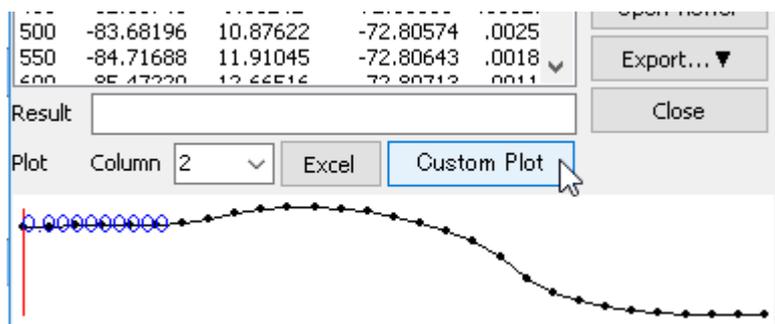
V. IRC計算

そしてAnimationウィンドウが開いた状態で、再びメインウィンドウの結果解析ボタンからアニメーション(IRC, STEP)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outファイル(irc_r.out)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。



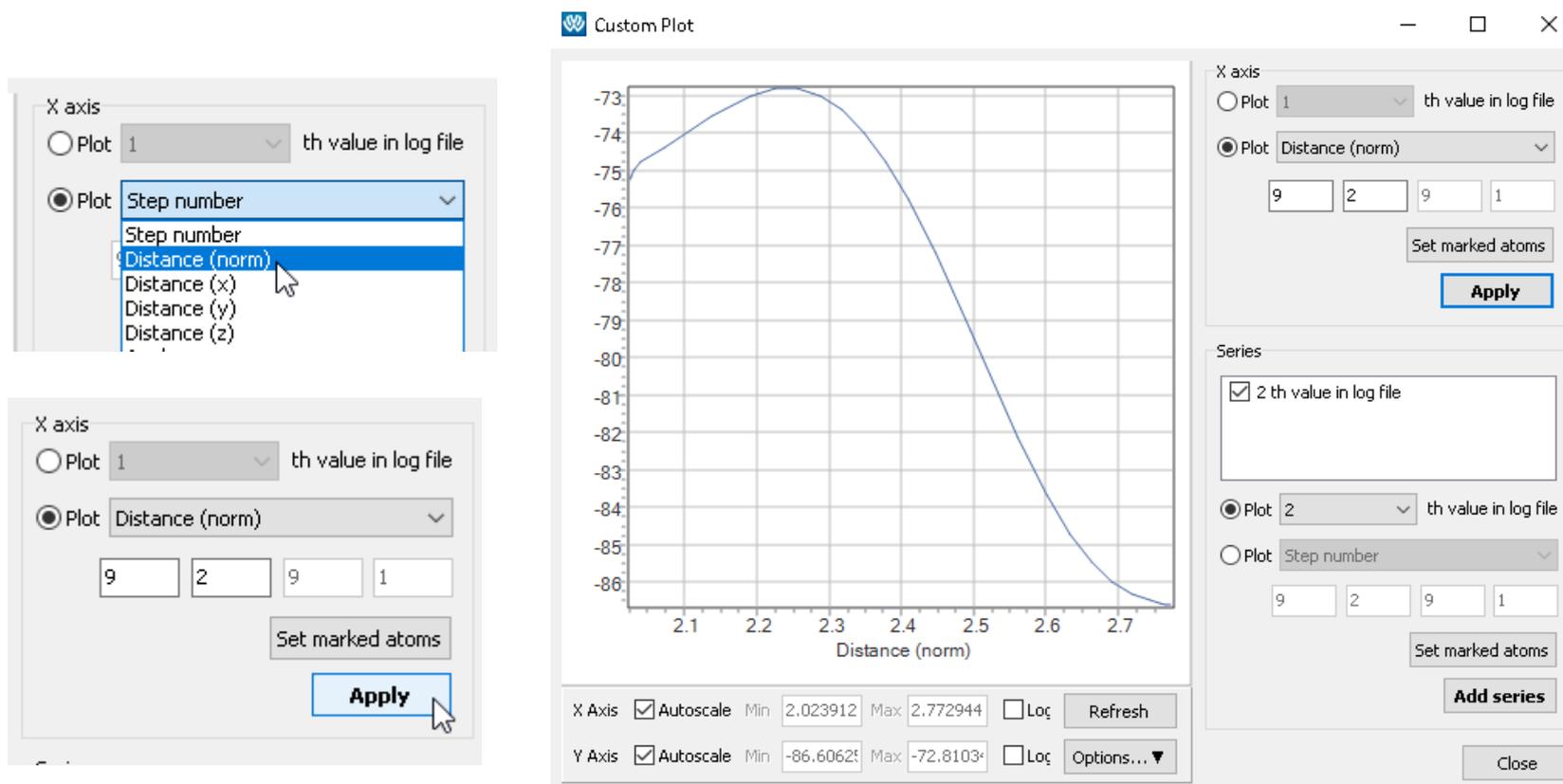
V. IRC計算

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

山口 達明

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...

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