演習4.1

初期画面で部品[-CH3]が選択されている状態で[Rep]を2回押すと、エタンができます(1)。



2Cに接続している水素の中で最も番号の若い6Hの最適化指標を"-1"に変更します(2)。 -50-40-30-20-100102030405060を入力します(3)。こうすることで、6-2-1-3の二面角 を-50に固定して後の構造を緩和させた計算を、二面角を60まで連続して計算することがで きます。



ファイル/名前を付けて保存で、ethane\_rot.dat等とします。

計算 / MOP6W70で、計算が始まります。

😤 Winmostar V3.53b							
ファイル(E) 編集(E) 表示(⊻)	計算(C) その他(Z) ヘルフ°(H)						
🗃 🖬 💀 🐝 🖌 H	MO <u>P</u> 6W70 start						
Add Del -CH3 -C2H3	MOP <u>7</u> W70 start MOP <u>A</u> CX(2)スタート ep H	👻 Chng					

計算が終了すると、ethane\_rot.outのメモ帳が開くので、正常に計算が終了していることを確認したら、メモ帳を終了します。



## 計算 / Import / Arcで、保存に関する警告が出たら[いいえ]を選択します。





ファイルを開くで、ethane\_rot.arcを選択して開きます。

ファイルを目的		? 🔀
ファイルの場所の	🔁 stereo 💌 🔶 📑 📰-	
した 最近使ったファイル	ethane_rot.dat_temp ethane_rot.aro	
ごう デスクトップ		
ک ۲۲/۲۲		
71 I)Ľ1-9		
्रि ए-एन्हर्म भन्न		
	ファイル名(№:     ethane_rotarc     ●       ファイルの種類(①:     MOPAC(*.arc)     ●	駅(Q) キンセル

スライダーや[|>]ボタンで構造を確認します。

🕅 Winmostar V0.54		
7ヶ山田 編集田 表示型 計算型 その担心 へいがい		
📽 🖬 🕶 🐳 🖌 H		
Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -DH3  Pep H  Chne	C BS1 C BS2 1.15 Connect	Jon Carlos
FWlistarWistereoWethane_rot.arc Winmostar 8 30.07 0 8-7-1-1 Leng=1.8078 Ang=65.5 Dihed=0 H	Zoom 1500 Atom 025 Bond 10	A A
	Nonation	MUPAC(arc)
	F-Ristartorecontinue rolarc         HEAT OF FORMATION       =       -17,41445         HEAT OF FORMATION       =       -17,1240         HEAT OF FORMATION       =       -16,4034         HEAT OF FORMATION       =       -16,25231         HEAT OF FORMATION       =       -16,25231         HEAT OF FORMATION       =       -17,13428         HEAT OF FORMATION       =       -17,13445         HEAT OF FORMATION       =       -17,41445         HEAT OF FORMATION       =       -17,41445	Bow Roard Rewind Rewind Last Slow Fast temp SD anime per SD Excel D Quit

[Excel]ボタンでExcel表が開きます。

🔀 Microsoft Excel - temp1.csv 📃 🗖 🔀								X	
1	ファイル(E) 編集	(E) 表示(V)	挿入(1) 書言	大(1) クール(1)	データ(D) ウィント	う <u>(W)</u> ヘルプ(	H) Acrobat(	B) _ [#	l X
	🚔 🖬 进	🗟 🌾 👗	Pa 🛍 🚿	<b>n</b> - cr	🍓 🏶 Σ	f≈ ĝ↓ X↓	h 🔮 4	3 🖸	33
MSPゴシック ・11 ・ B J U 三三三国 野 % , 18 48 伊 田・参・ム・ <sup>20</sup>									
	F1 •	-	-60						
	A	В	С	D	E	F	G	н	-
1	ethane_rot.	1	HEAT	OF	FORMATIC	-60,	-17.4145	KCAL	-
2	ethane_rot.	2	HEAT	OF	FORMATIC	-50	-17.3343	KDAL	
3	ethane_rot	3	HEAT	OF	FORMATIC	-40	-17.1129	KCAL	
4	ethane_rot	4	HEAT	OF	FORMATIC	-30	-16.8046	KCAL	
5	ethane_rot	5	HEAT	OF	FORMATIC	-20	-16.4889	KCAL	
6	ethane_rot.	6	HEAT	OF	FORMATIC	-10	-16.2528	KDAL	
7	ethane_rot	7	HEAT	OF	FORMATIC	0	-16.1652	KCAL	
8	ethane_rot	8	HEAT	OF	FORMATIC	10	-16.2528	KCAL	
9	ethane_rot	9	HEAT	OF	FORMATIC	20	-16.4889	KCAL	
10	ethane_rot.	10	HEAT	OF	FORMATIC	30	-16.8046	KCAL	
11	ethane_rot.	11	HEAT	OF	FORMATIC	40	-17.1129	KDAL	
12	ethane_rot	12	HEAT	OF	FORMATIC	50	-17.3343	KCAL	
13	ethane_rot	13	HEAT	OF	FORMATIC	60	-17.4145	KCAL	*
H 4	H \temp	1/			•	$\bigcirc$		10000	
1724	*								

[F列に角度を記入し、F列とG列の散布図を描くと下のようなグラフが得られます。



図から、回転障壁は1.25kcal/mol=5.2kJ/molと計算されます。実測値よりかなり小さい値 になるのは、MOPACの計算精度が悪いためと思われます。GaussianやGAMESS等で高 精度計算を行うと、より正確な計算値が得られます。