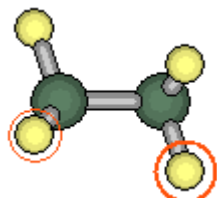


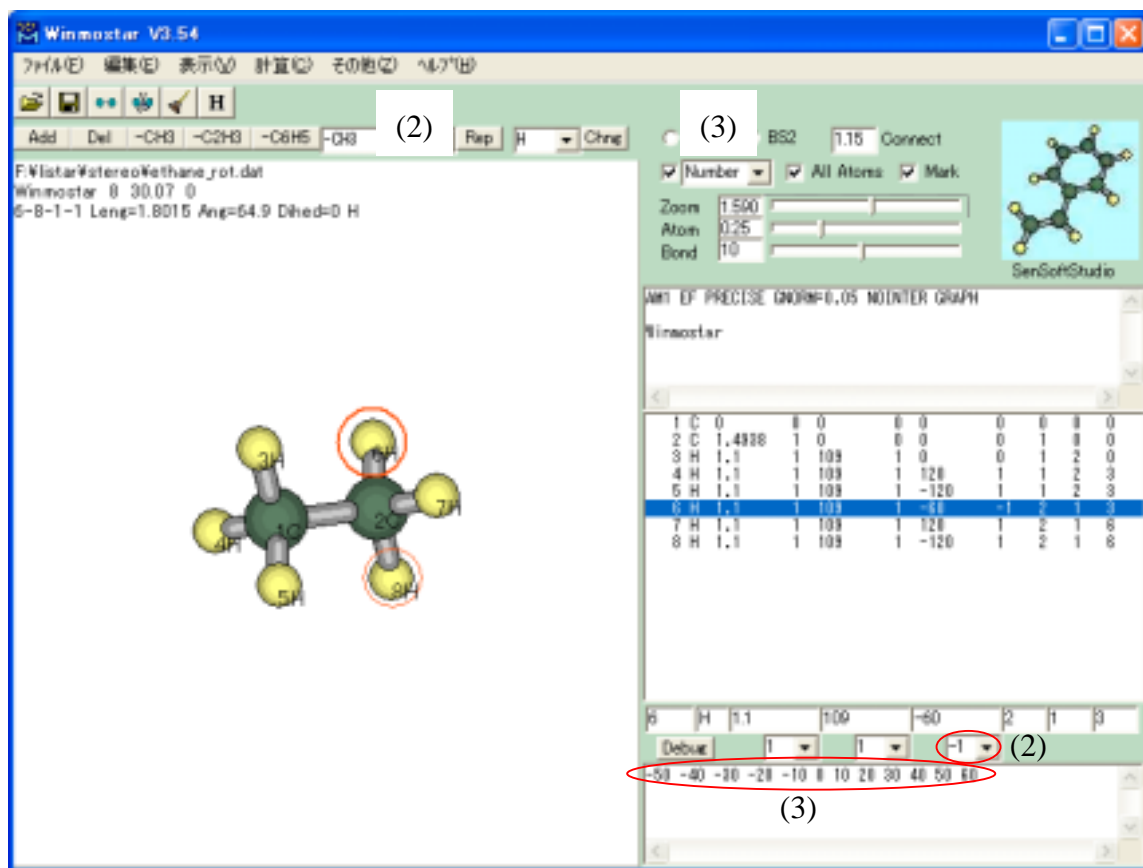
## 演習 4.1

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)。



(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 -10 0 10 20 30 40 50 60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。



Winmostar V3.54

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 計算(C) その他(O) ヘルプ(H)

Add Del [-CH3] [-C2H3] [-C6H5] [-CH3] (2) Rep H Chng (3) BS2 1.15 Connect

F:\Wistar\Wstereo\Kethane\_rot.dat  
Winmostar 0 30.07 0  
6-8-1-1 Leng=1.8015 Ang=64.9 Dihed=0 H

Zoom 1.500  
Atom 0.25  
Bond 10

SenSoftStudio

Winmostar

1	C	0	0	0	0	0	0	0	0
2	C	1.4828	1	0	0	0	0	1	0
3	H	1.1	1	109	1	0	0	1	2
4	H	1.1	1	109	1	120	1	1	2
5	H	1.1	1	109	1	-120	1	1	2
6	H	1.1	1	109	1	-40	1	2	3
7	H	1.1	1	109	1	120	1	2	3
8	H	1.1	1	109	1	-120	1	2	3

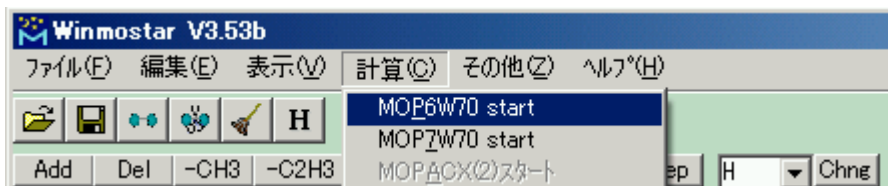
6 H 1.1 109 -60 2 1 3

Debug 1 1 -1 (2)

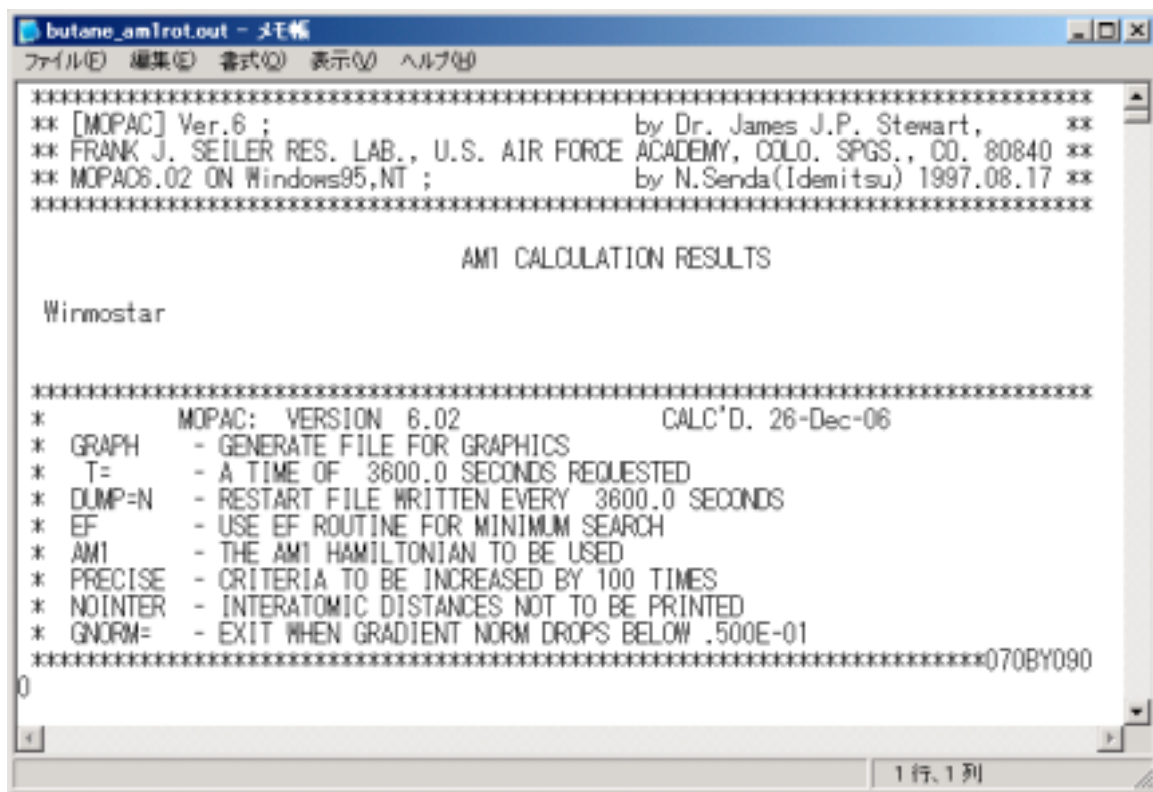
-50 -40 -30 -20 -10 0 10 20 30 40 50 60 (3)

ファイル / 名前を付けて保存で、ethane\_rot.dat等とします。

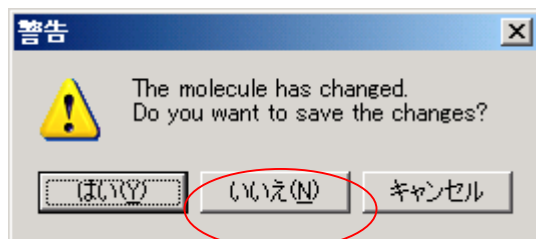
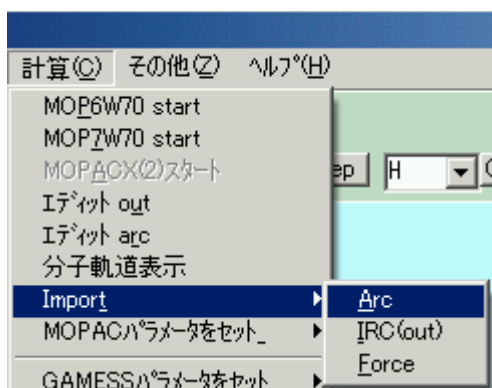
計算 / MOP6W70で、計算が始まります。



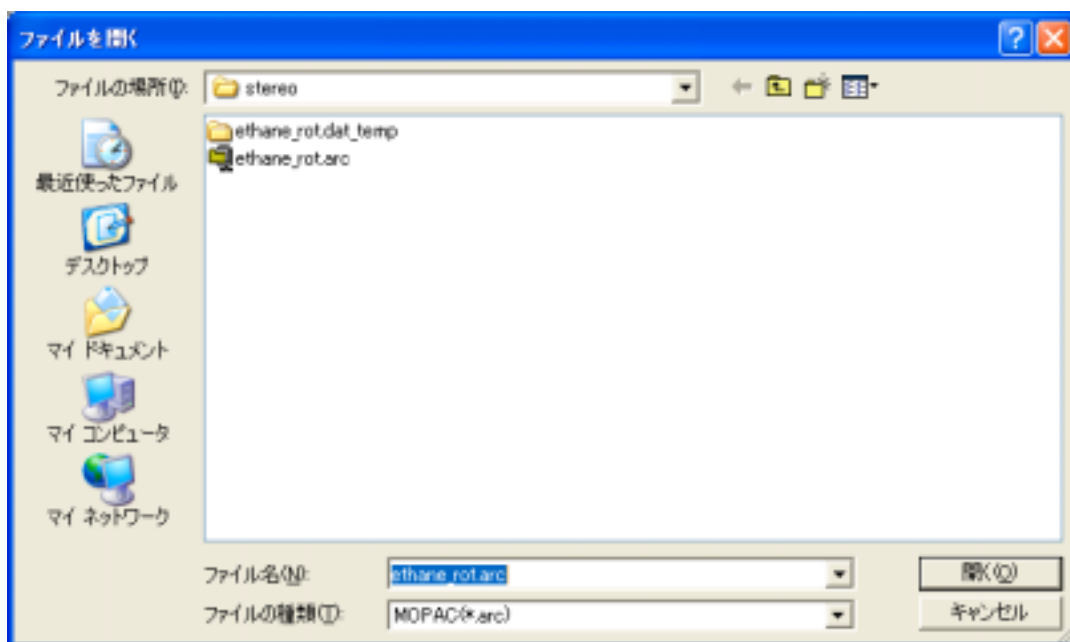
計算が終了すると、ethane\_rot.outのメモ帳が開くので、正常に計算が終了していることを確認したら、メモ帳を終了します。



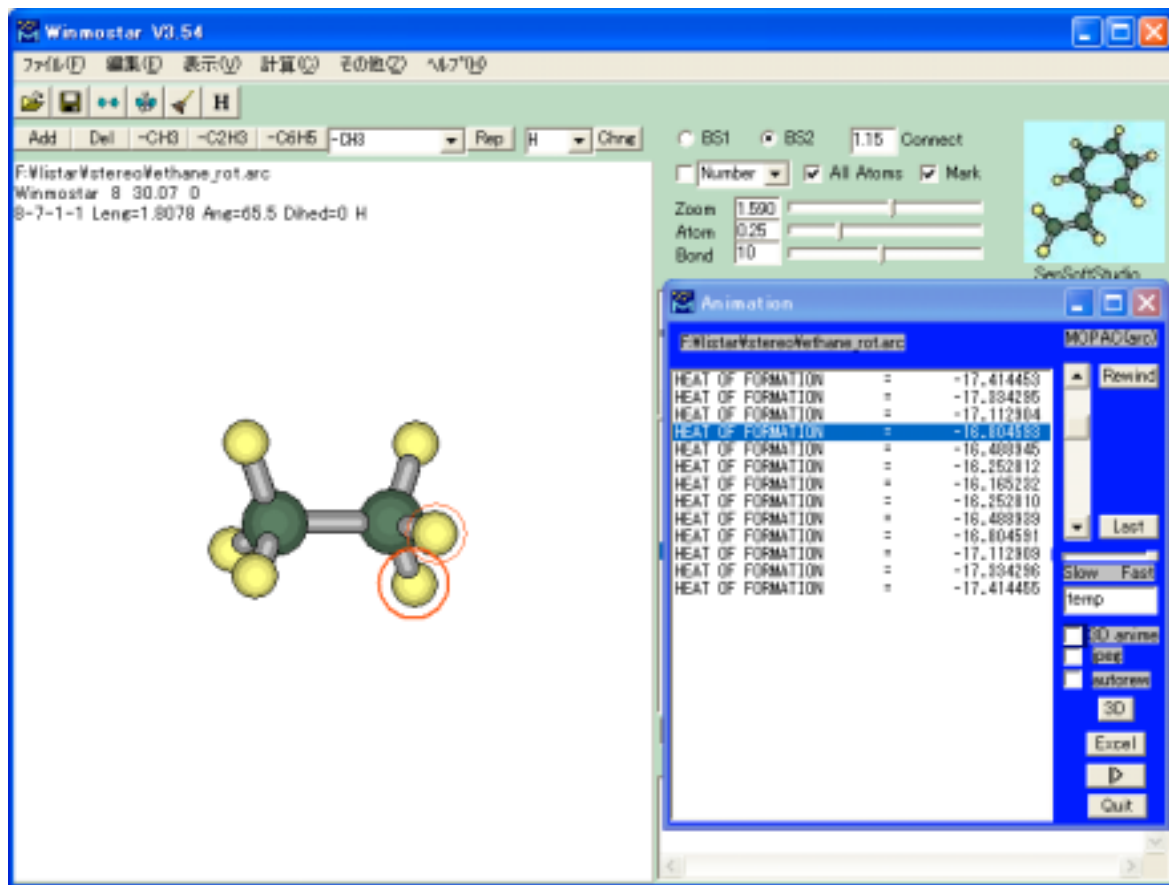
計算 / Import / Arcで、保存に関する警告が出たら[いいえ]を選択します。



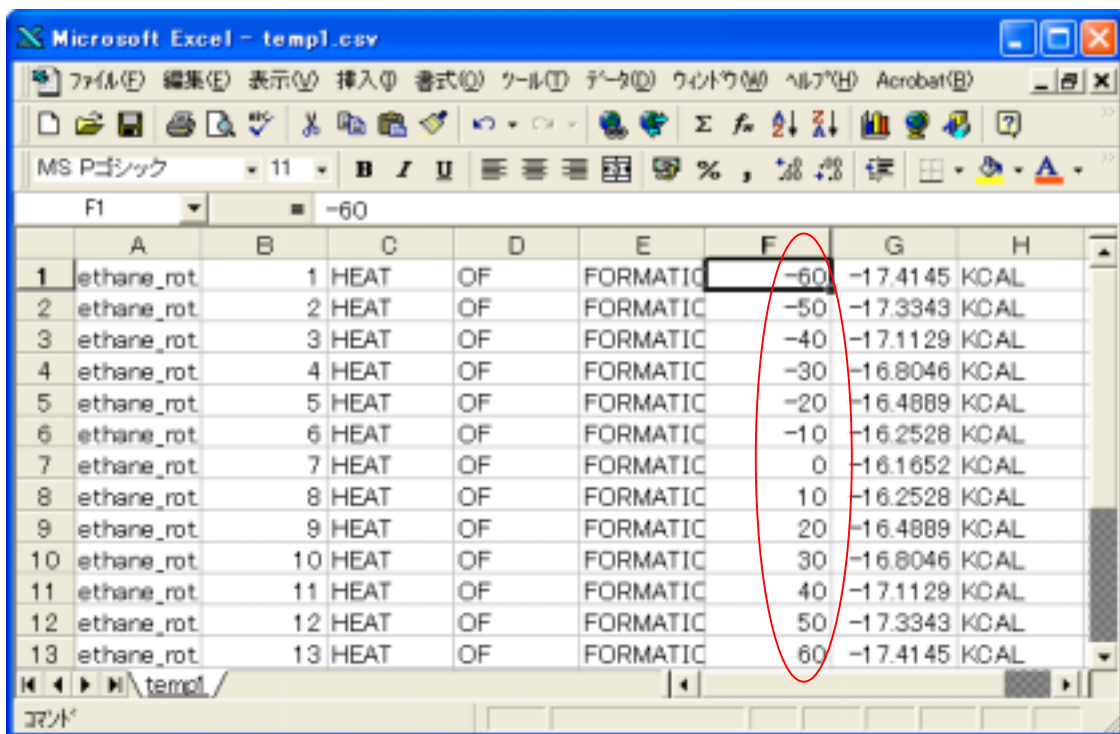
ファイルを開くで、ethane\_rot.arcを選択して開きます。



スライダーや[>]ボタンで構造を確認します。

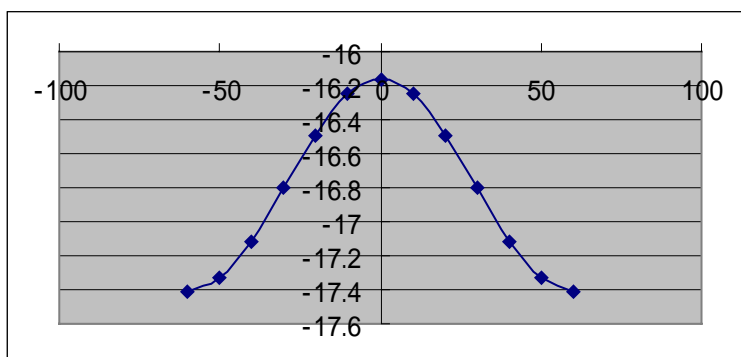


[Excel]ボタンでExcel表が開きます。



	A	B	C	D	E	F	G	H
1	ethane_rot	1	HEAT	OF	FORMATIC	-60	-17.4145	KCAL
2	ethane_rot	2	HEAT	OF	FORMATIC	-50	-17.3343	KCAL
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	KCAL
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	KCAL
12	ethane_rot	12	HEAT	OF	FORMATIC	50	-17.3343	KCAL
13	ethane_rot	13	HEAT	OF	FORMATIC	60	-17.4145	KCAL

[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 $1.25\text{kcal/mol} = 5.2\text{kJ/mol}$ 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。