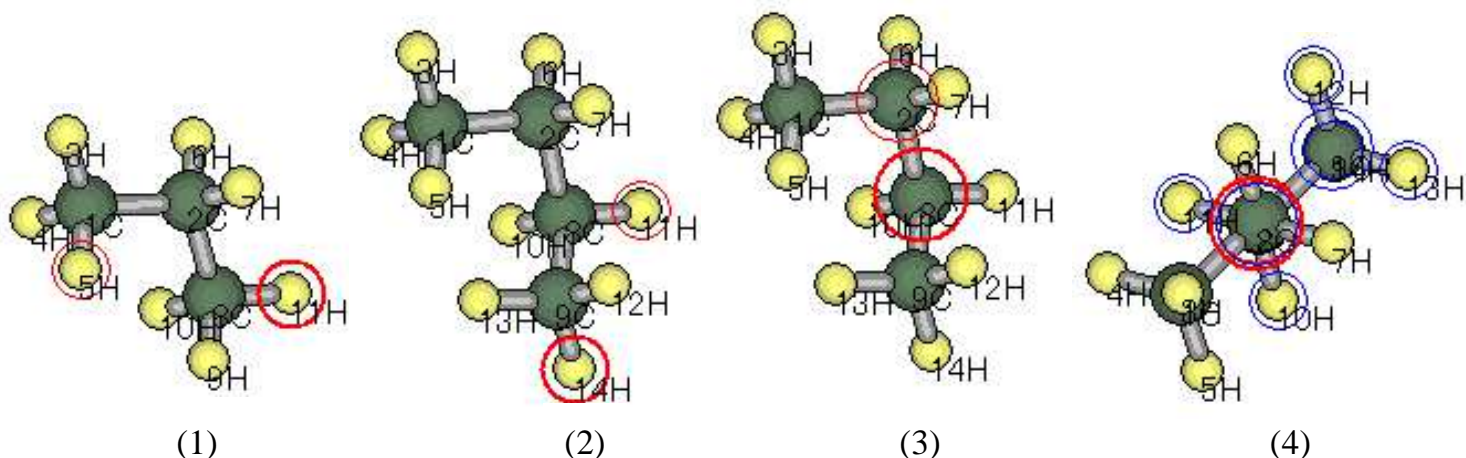


演習4.3

初期画面で部品[-CH3]が選択されている状態で[Rep]を3回押し、回転してプロパン(1)ができていることを確認します。

ここで、11Hではなく、最も小さい番号の9Hを[-CH3]で置換します(2)。これは、後の炭素の二面角回転で水素が連動して動くようにするためです。

2,8番の炭素をクリックして選択して(3)、見やすいように全体回転してから、部分回転で4個の炭素をトランス構造にします(4)。



9番原子の二面角の最適化指標を-1に変更し(5)、第二テキストエリアに、165 150 135 120 105 90 75 60 45 30 15 0を入力します(6)。

Winmostar(GE)/NB V4.104
 ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 計算1(C) 計算2_ その他(Z) ヘルプ(H)

Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 Rep H Chng

C:\Users\¥38000800\Desktop\temp\butane_am1rot.dat
 Winmostar 14 C4H10 58.12 0 1.7855 -0.7039 -0.0019
 9-8-9-14 Leng=1.5067 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999 C

BS1 BS2 1.15 Connect
 Number All Atoms Mark
 Zoom Atom 0.25 Bond 10

undo AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF
 Winmostar

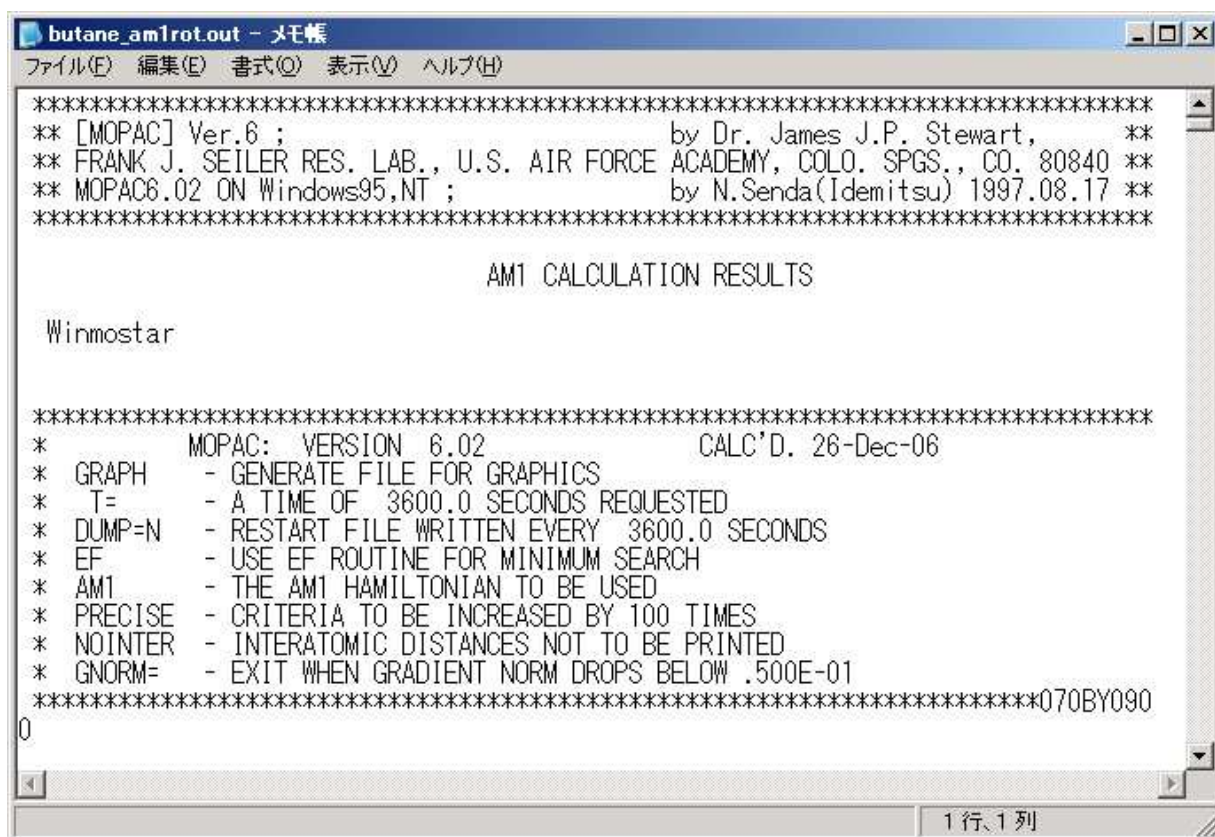
1	C	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	C	1.50670	1	0	0	0	0	1	0	0
3	H	1.11683	1	110.3643	1	0	0	1	2	0
4	H	1.11683	1	110.6844	1	120.0226	1	1	2	3
5	H	1.11692	1	110.6801	1	-119.987	1	1	2	3
6	H	1.12214	1	109.6317	1	-58.7305	1	2	1	3
7	H	1.12211	1	109.6491	1	117.2759	1	2	1	6
8	C	1.51427	1	111.6085	1	-121.354	1	2	1	6
9	C	1.50669	1	111.6021	1	179.8386	-1	8	2	1
10	H	1.12212	1	109.3888	1	121.515	1	8	2	9
11	H	1.12213	1	109.3892	1	-121.505	1	8	2	9
12	H	1.11691	1	110.6818	1	-60.0038	1	9	8	2
13	H	1.11691	1	110.6806	1	119.9843	1	9	8	12
14	H	1.11683	1	110.3654	1	-120.009	1	9	8	12

9 C 1.506693 111.6021 179.8386 -1 8 2 1
 Debug 1 1 -1 (5)
 165 150 135 120 105 90 75 60 45 30 15 0 (6)

ファイル／名前を付けて保存で、butane_am1rot等とします。
 計算／MOP6W70で、計算が始まります。



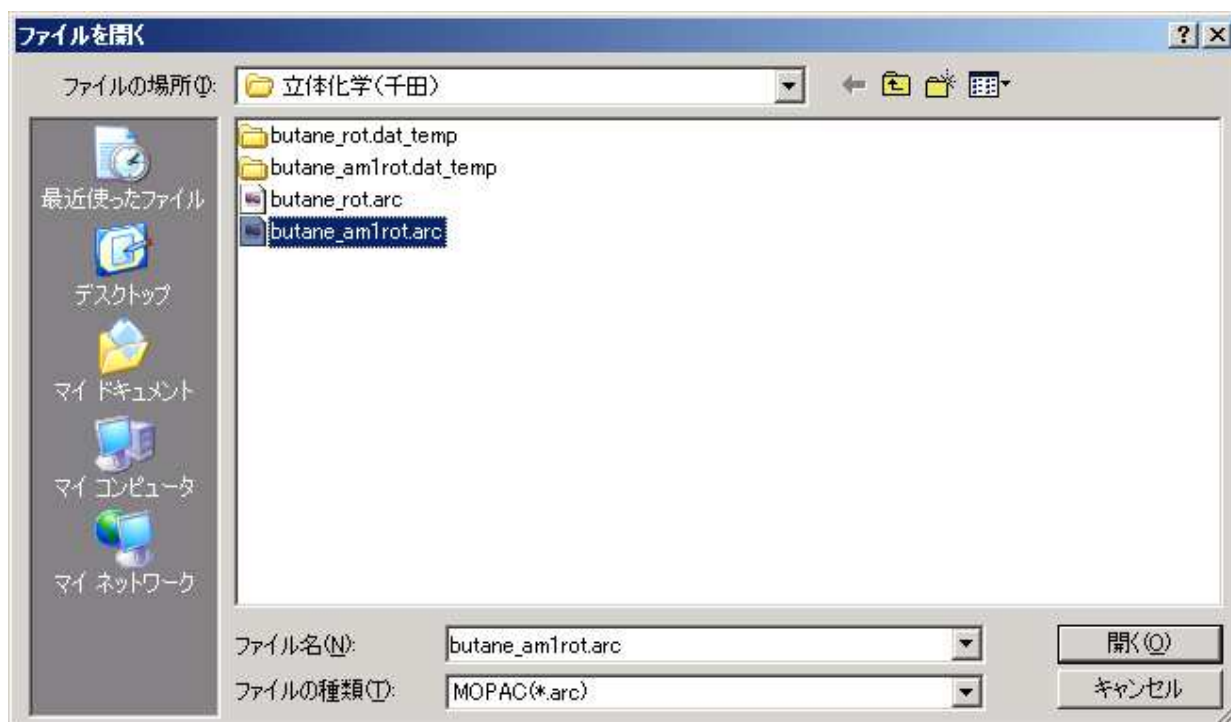
計算が終了すると、butane_rot.outのメモ帳が開くので、正常に計算が終了していることを確認したら、メモ帳を終了します。



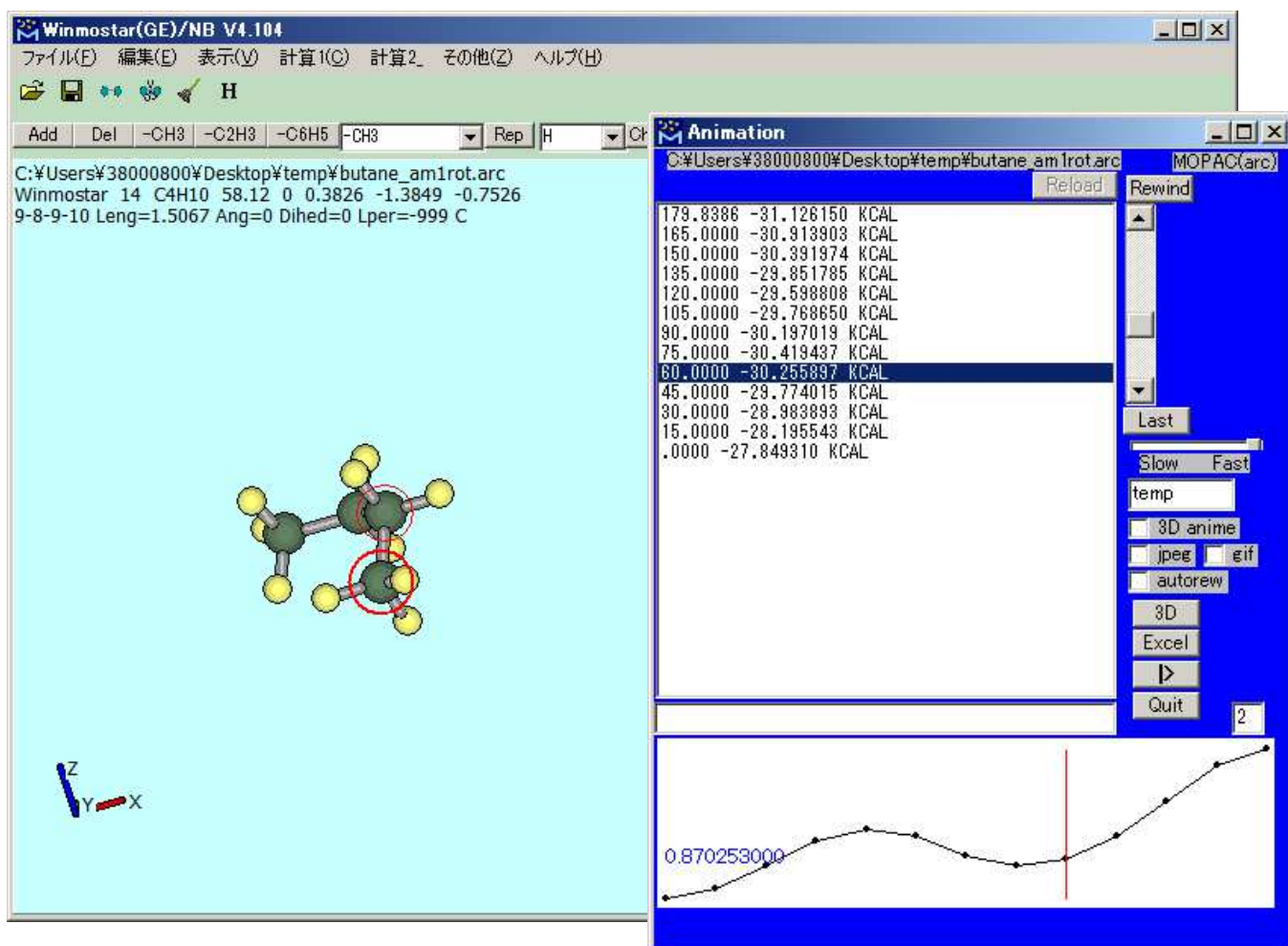
計算／インポート／Animation(arc)



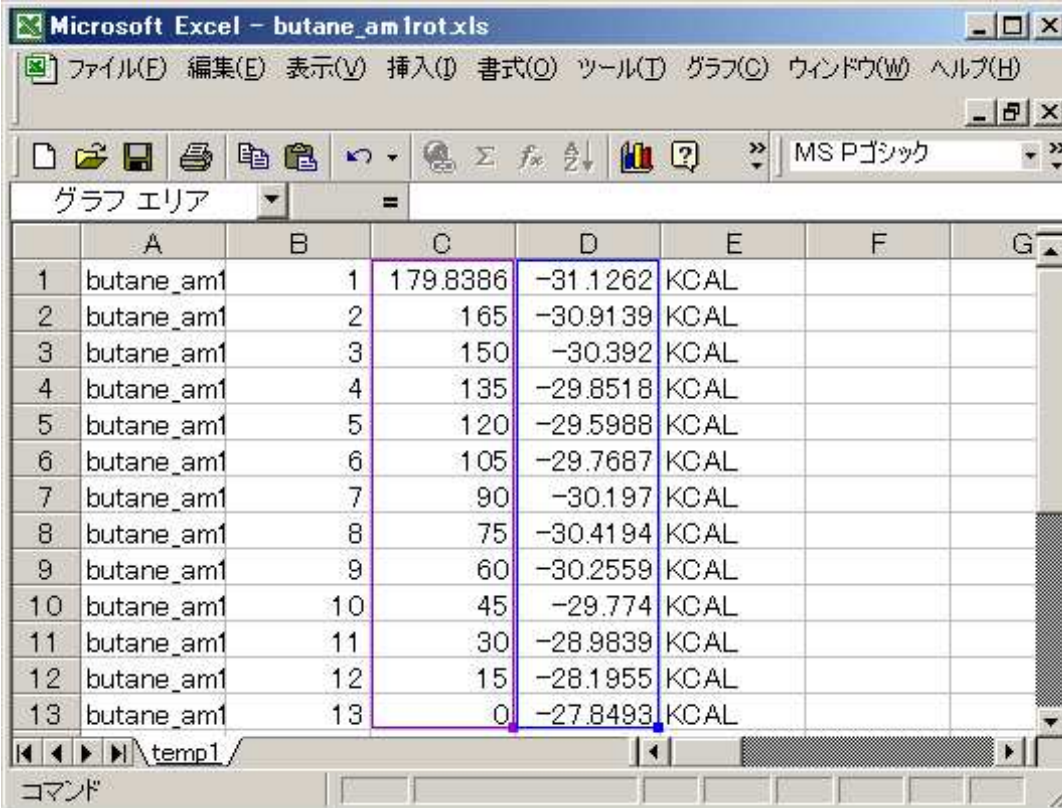
ファイルを開くで、butane_rot.arcを選択して開きます。



スライダーや[>]ボタンで構造とエネルギーを確認します。

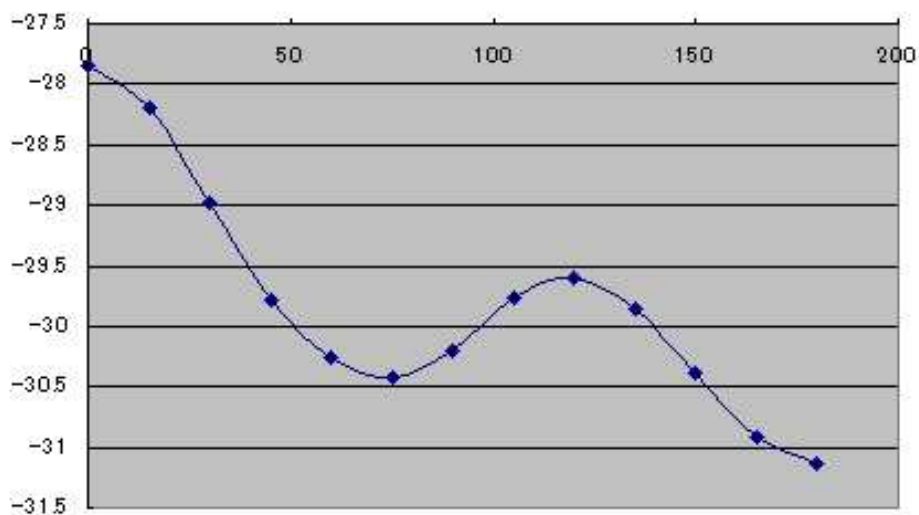


[Excel]ボタンでExcel表が開きます。

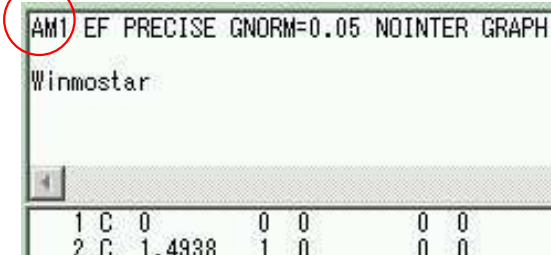


	A	B	C	D	E	F	G
1	butane_am1	1	179.8386	-31.1262	KCAL		
2	butane_am1	2	165	-30.9139	KCAL		
3	butane_am1	3	150	-30.392	KCAL		
4	butane_am1	4	135	-29.8518	KCAL		
5	butane_am1	5	120	-29.5988	KCAL		
6	butane_am1	6	105	-29.7687	KCAL		
7	butane_am1	7	90	-30.197	KCAL		
8	butane_am1	8	75	-30.4194	KCAL		
9	butane_am1	9	60	-30.2559	KCAL		
10	butane_am1	10	45	-29.774	KCAL		
11	butane_am1	11	30	-28.9839	KCAL		
12	butane_am1	12	15	-28.1955	KCAL		
13	butane_am1	13	0	-27.8493	KCAL		

C列とD列の散布図を描くと下のようなグラフが得られます。



図はAM1法を用いた結果ですが、PM3でも似たような結果になることを確認してください。



```
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPH
Winmostar

1 C 0 0 0 0
2 C 1.4938 1 0 0 0
```