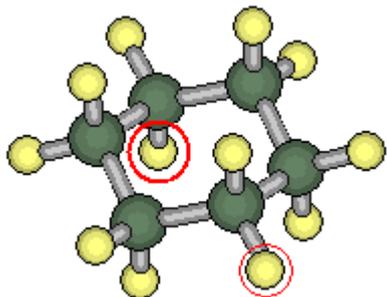


## 演習 5.2

### (a) いす形

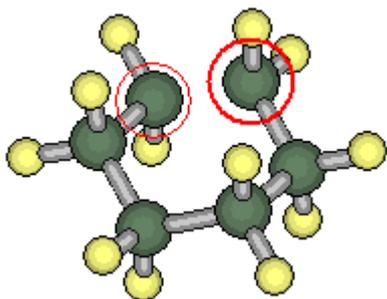
初期画面で、部品[-CYCLOHEXYL(AX)](または[-CYCLOHEXYL(EQ)])を選択して部品置換すると、いす形シクロヘキサンができます(1)。MOPACで構造最適化して、いす形が保たれることを確認して、cyclohexane\_chair.datなどの名前で保存します。



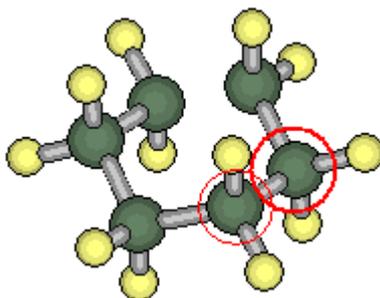
(1)

### (b) 舟形

いす形シクロヘキサンから、[結合削除]で環の一箇所を切断します(2)。二原子を指定します(3)。

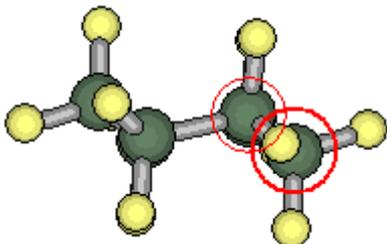


(2)

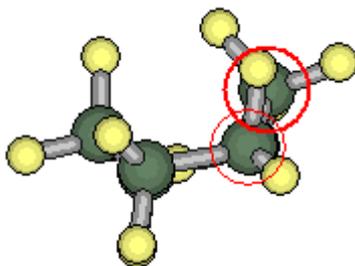


(3)

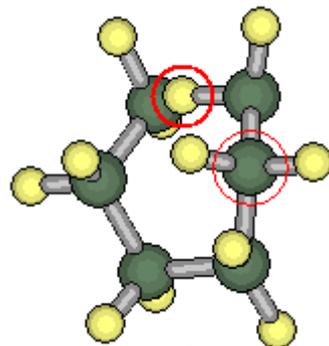
構造がわかり易くなるように、回転します(4)。編集/結合角変更で、舟形にします(5)。炭素に近い位置の水素を削除します(6)。



(4)



(5)

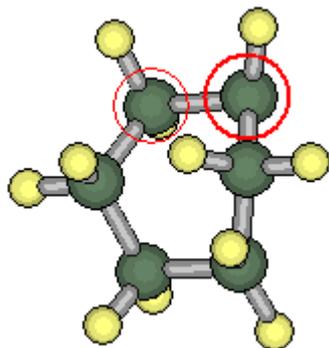


(6)

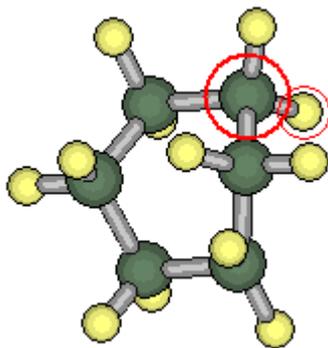
結合付加した後(7)、水素付加します(8)。

水素の方向を正しくするために、水素を一個削除した後で、水素付加します(9)。

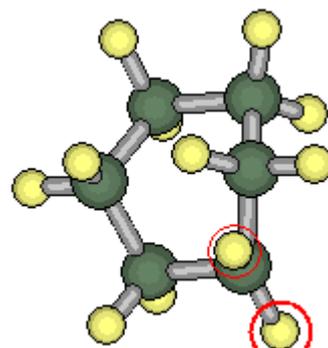
舟型は遷移状態なので、キーワード“TS”を入れてMOPAC計算すると、きれいな舟型構造になります。cyclohexane\_boat.datなどの名前で保存します。



(7)



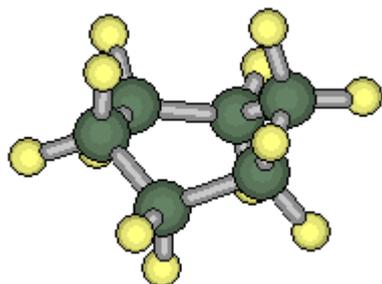
(8)



(9)

### (c)ねじれ形

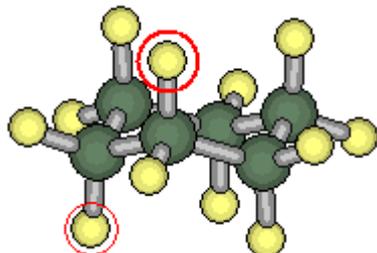
舟型シクロヘキサンをクリーンするとねじれ形になります(10)。MOPACで構造最適化して、ねじれ形構造を確認します。cyclohexane\_twist-boat.datなどの名前で保存します。



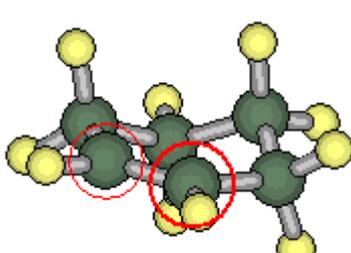
(10)

### (d)半いす形

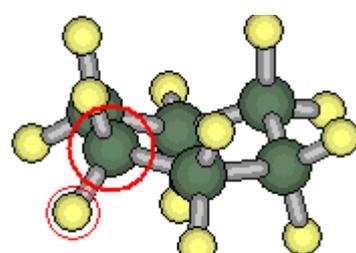
舟型シクロヘキサンの水素を2個削除してクリーンします(11)。水素を削除した炭素2個に水素付加すると半いす形になります(13)。半いす型は遷移状態なので、キーワード“TS”を入れてMOPAC計算して、半いす形が保たれることを確認します。



(11)



(12)

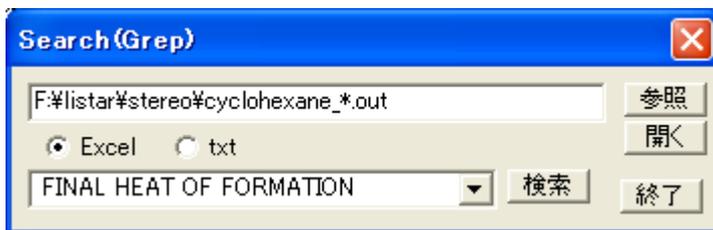


(13)

## (e)配座エネルギーの確認

計算結果は\*.outに保存されていますので、Notepad等のエディタで開いて、“FINAL HEAT OF FORMATION”の値を記録します。

その他 / 検索で以下のように指定すると、複数のファイル間で抽出することができます。



並び換えてグラフ化すると、以下のような図が得られます。

cyclohexane_chair.arc	-38.5424	KCAL	0	0	kJ/mol
cyclohexane_half-chair.arc	-32.0008	KCAL	6.541556	27.36987	kJ/mol
cyclohexane_twist-boat.arc	-35.3621	KCAL	3.180251	13.30617	kJ/mol
cyclohexane_boat.arc	-35.0147	KCAL	3.527694	14.75987	kJ/mol
				4.184	

