

 winmostar チュートリアル

# MOPAC

## 二面角スキャン計算

V11.3.0

2022年10月1日 株式会社クロスアビリティ

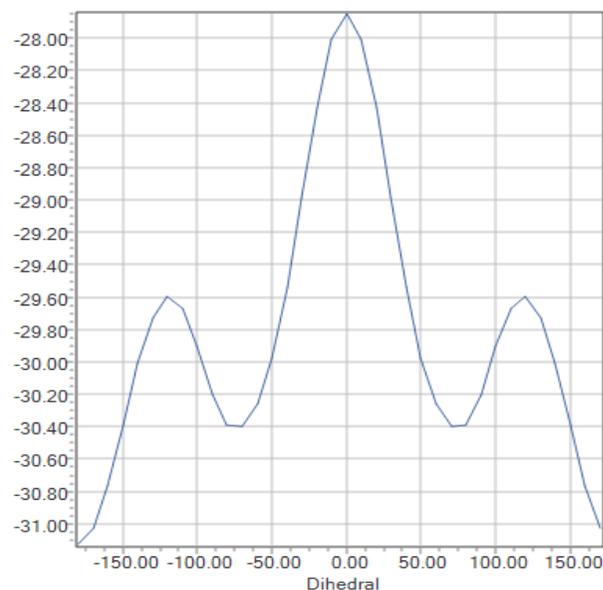
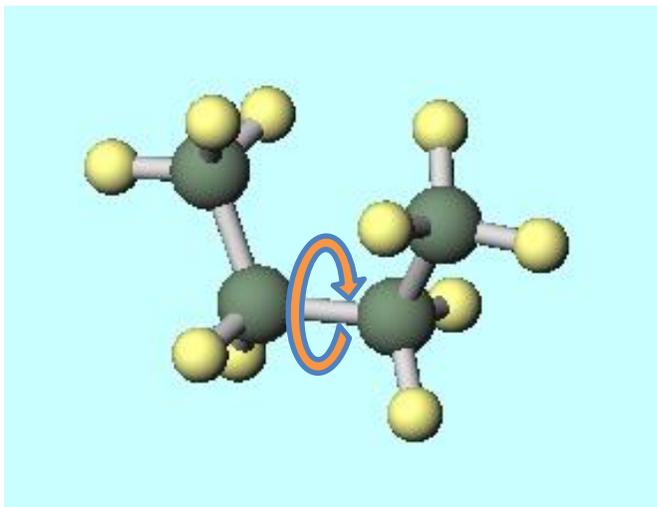
# 本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

# 概要

二面角を変数としたAM1法によるエネルギー(このチュートリアルではMOPAC定義の生成熱)のスキャン計算の手順を、真空中のブタンを例に示します。

スキャン計算では、指定した内部座標(結合長、角度、二面角)を少しずつ変化させ、エネルギーがどのように変化するかを調べます。指定以外の全ての内部座標はそれぞれの構造で最適化されます。



注意点：

- 本チュートリアルの計算は、半経験的手法でかつ真空中のため、高精度な結果が欲しい場合は、GAMESS, NWChem, Gaussianを使用してください。

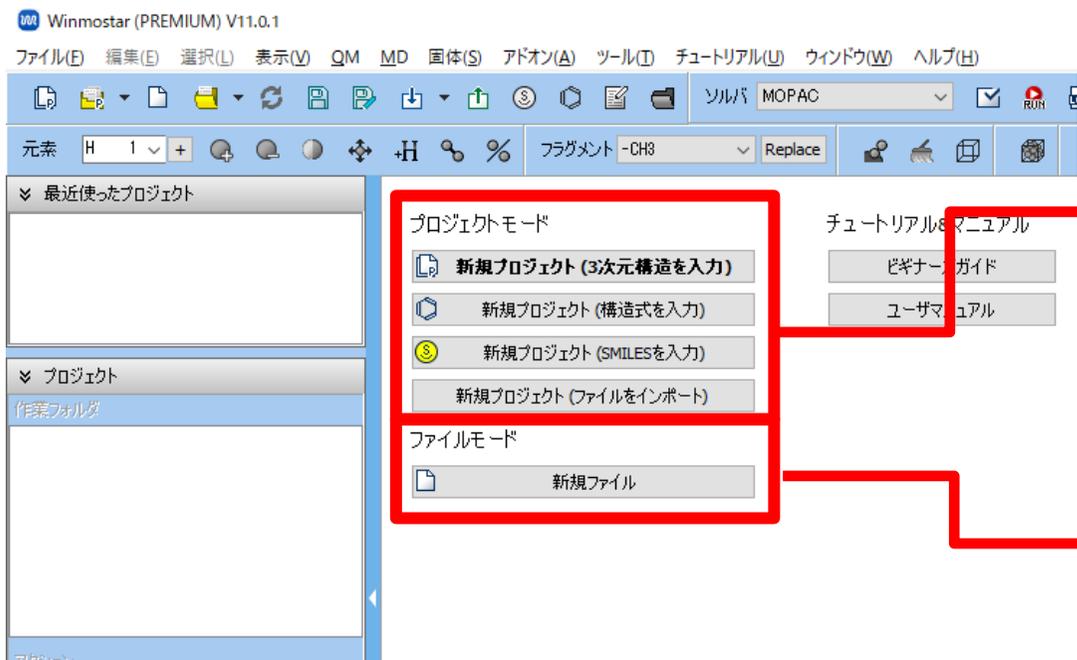
謝辞： 本資料作成にあたり元富山大学の木原寛氏の資料を参考にしました。

# Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**と**ファイルモード**の2つの動作モードが用意されています。

本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。

ファイルモードの操作方法は[V10のチュートリアル](#)を参照してください。



**プロジェクトモード V11新機能**  
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

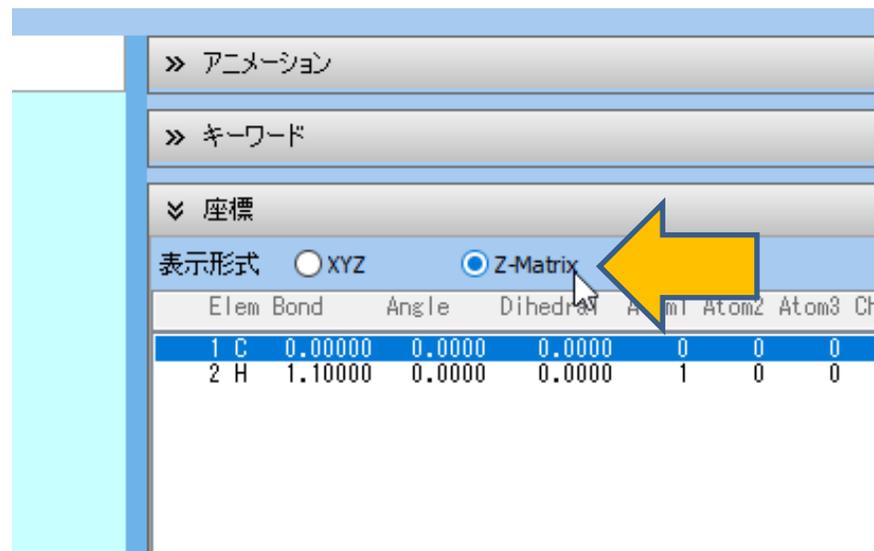
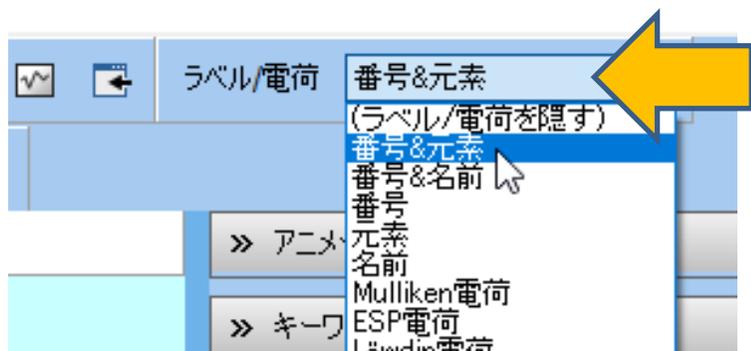
**ファイルモード**  
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

継続ジョブを作成するときに、ファイルモードまたはV10以前では都度継続元ジョブの最終構造を表示する必要がありますが、プロジェクトモードでは自動で最終構造が引き継がれます。

# I. 系のモデリング

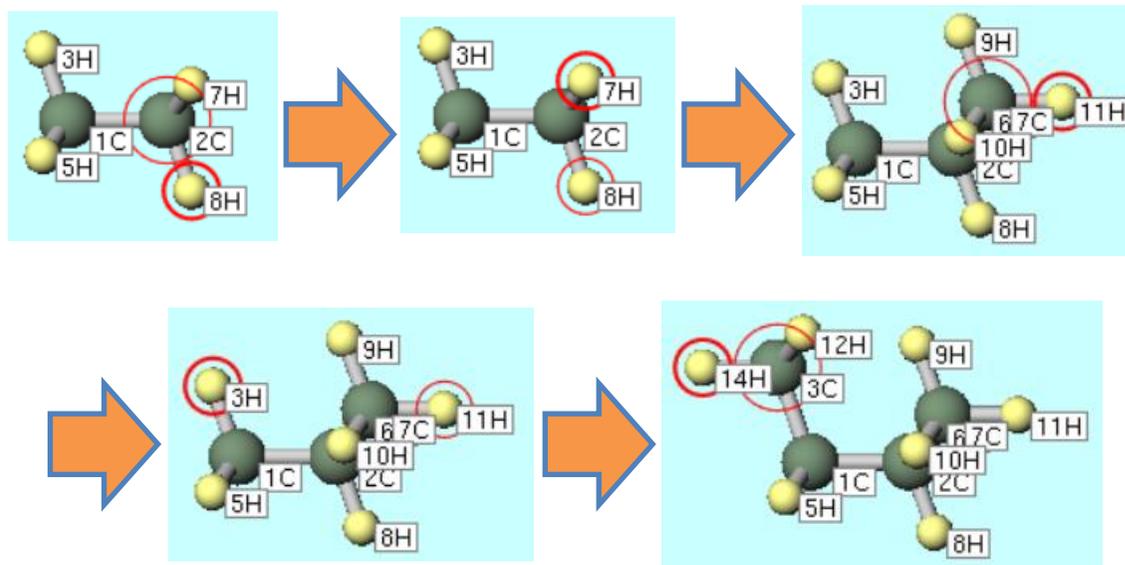
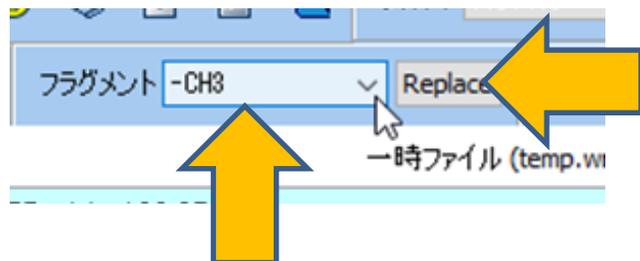
基本的な操作方法は[MOPAC基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

1. **ファイル** | **新規プロジェクト**をクリックし、**プロジェクト名**に「butane\_mopac」と入力して**保存**をクリックします。
2. メインウィンドウ右上の**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します。
3. 座標表示エリアの**表示形式**を「**Z-Matrix**」に変更します。



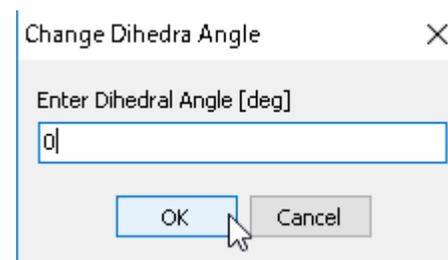
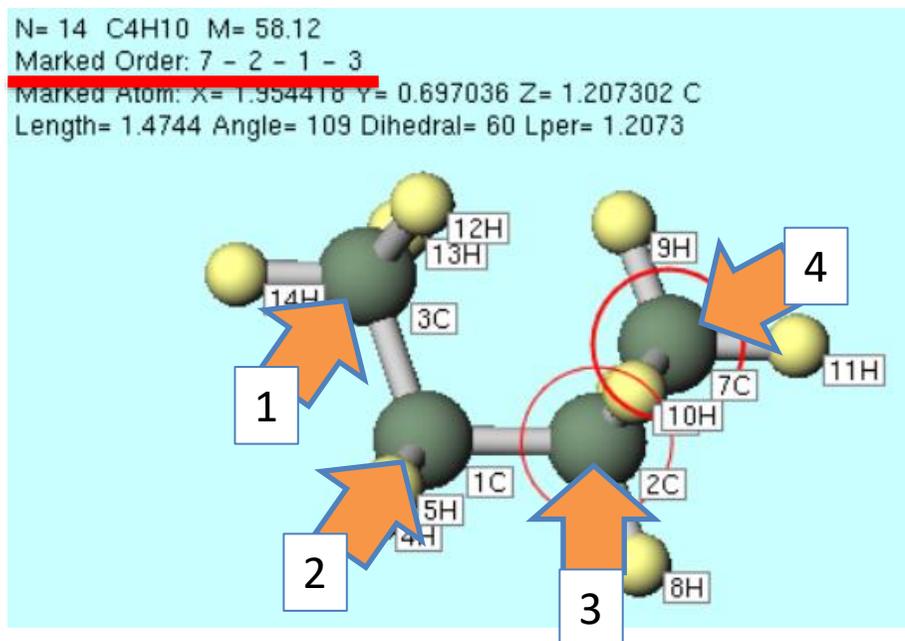
# I. 系のモデリング

1. フラグメントを-CH3に変更してから**Replace**ボタンを2回クリックし、エタンを作成します。
2. **7H**の原子をクリックして太い赤丸で囲まれた状態にし、**Replace**ボタンをクリックしてプロパンにします。
3. さらに、**3H**の原子をクリックして太い赤丸で囲まれた状態にし、**Replace**ボタンをクリックしてブタンにします。



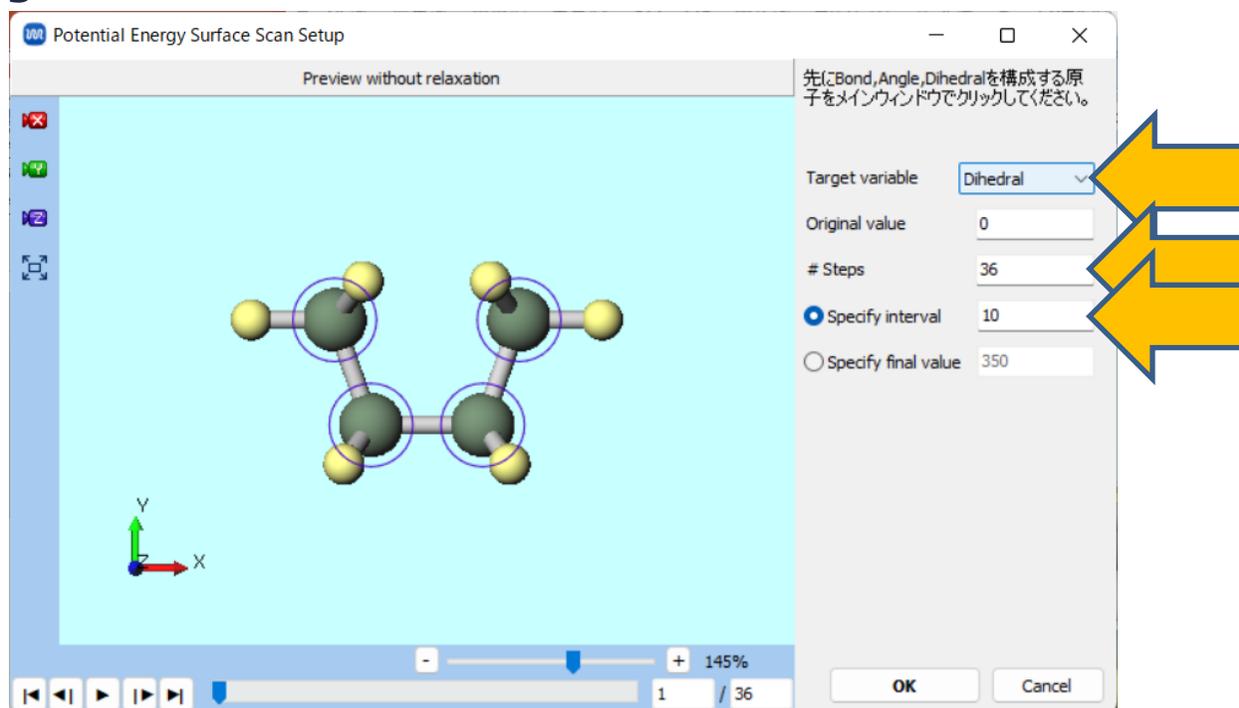
## II. 計算の実行(スキャン計算)

1. 主鎖の炭素原子を**3C**→**1C**→**2C**→**7C**の順にクリックして、分子表示エリア左上の**Marked Order**が「7-2-1-3」と表示されることを確認します。
2. **編集 | 選択原子の距離/角度を変更 | 二面角**をクリックします。
3. 出現したダイアログで「0」と入力してOKボタンをクリックします。**3C-1C-2C-7C**の二面角が0になり、この位置からスキャンが開始されます。



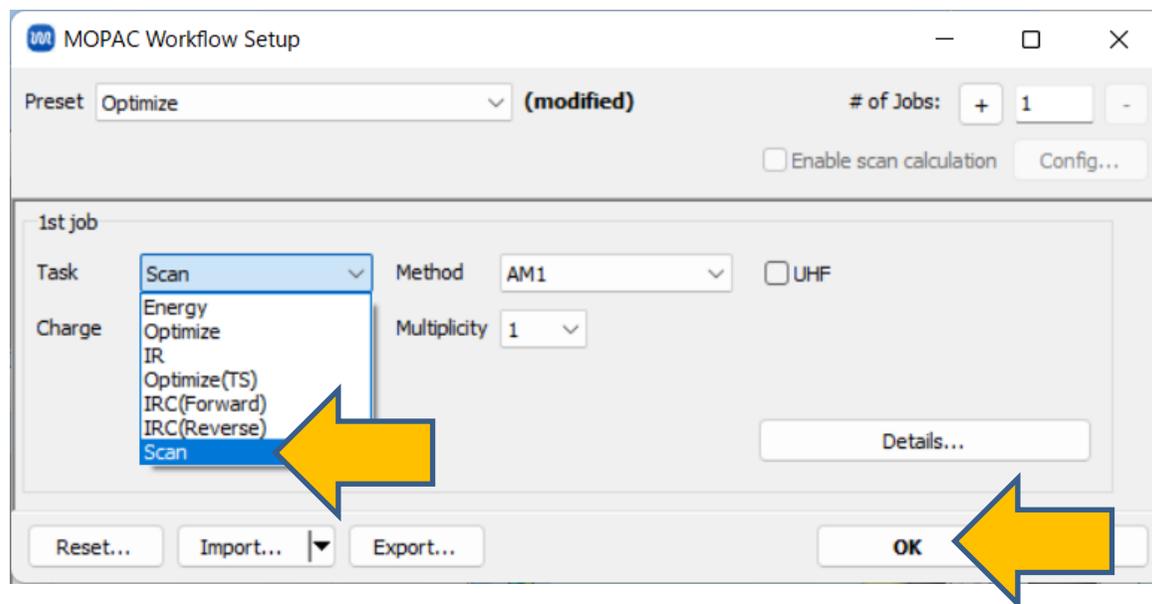
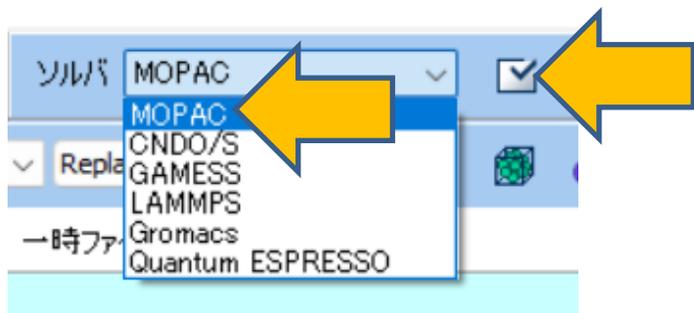
## II. 計算の実行(スキャン計算)

1. **QM | MOPAC | Potential Energy Surface Scan | 設定**をクリックします。
2. 出現したウィンドウで、**Target variable**を**Dihedral**、**# Steps**を**36**、**Specify interval**を**10**にして、OKをクリックします。表示の構造から3C-1C-2C-7Cの二面角を10°ずつ変化させて、この二面角以外の構造最適化計算を36回行います。
3. 出現したダイアログで、**はい**をクリックします。分子表示エリア下部で「**PES Scan configured**」と表示されることを確認します。



## II. 計算の実行(スキャン計算)

1. ソルバを選択メニューでMOPACを選択して、ワークフロー設定ボタンをクリックします。
2. Taskを「Scan」に変更しOKボタンをクリックします。
3. ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします。



# III. 結果解析 (スキャン計算)

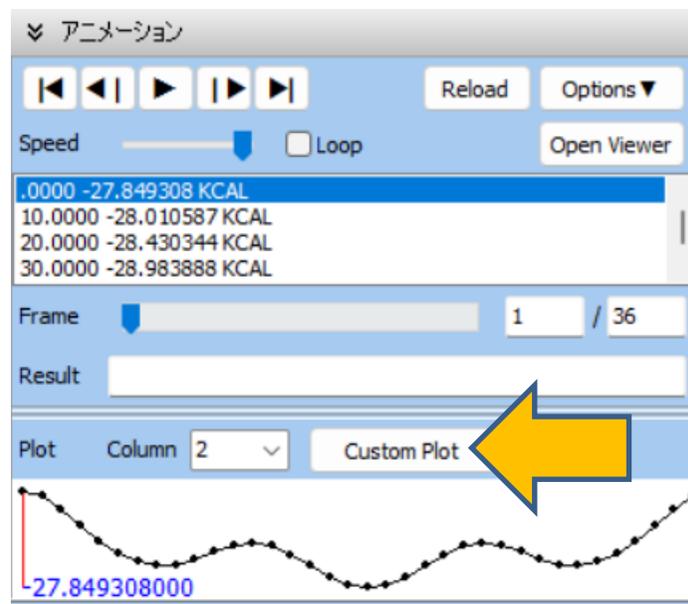
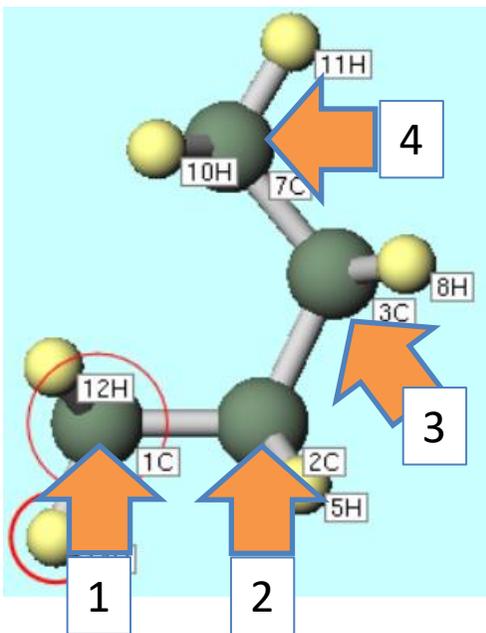
1. 計算が終了してwork1\_MOP\_SCANの作業フォルダの状態が**END**に変化した後、**作業フォルダ**のwork1\_MOP\_SCANをクリックし、**アクション**の**Animation**をクリックします。
2. アニメーション操作エリアのグラフにScan計算のエネルギー変化が表示されていることを確認します。

The screenshot displays the winmostar software interface. On the left, the '最近使ったプロジェクト' (Recently used projects) and 'プロジェクト' (Project) panels show the 'butane\_mopac' project with the 'work1\_MOP\_SCAN' folder selected and its status as 'END'. A yellow arrow points to this folder. Below, the 'アクション (work1\_MOP\_SCAN)' panel has the 'Animation' option selected, also indicated by a yellow arrow. The central window shows the molecular structure of butane (C4H10) with atoms labeled 1C, 2C, 3C, 4C, 5H, 6H, 7C, 8H, 9H, 10H, 11H, 12H, and 14H. The right panel, titled 'アニメーション' (Animation), is highlighted with a red box. It contains playback controls, a speed slider, and a list of energy values (KCAL) for frames 0.0000 to 30.0000. Below the list is a plot showing energy changes over 36 frames, with a red vertical line at frame 1. The plot shows a fluctuating energy curve. At the bottom of the right panel, a table displays the coordinates for the selected atoms.

| Elem | X       | Y      | Z       |
|------|---------|--------|---------|
| 8 H  | 2.8207  | 1.4592 | 0.8998  |
| 9 H  | 0.5434  | 2.5175 | -0.9057 |
| 10 H | 0.5429  | 2.5172 | 0.9054  |
| 11 H | 1.7860  | 3.4989 | 0.0003  |
| 12 H | -0.4013 | 0.5159 | 0.9054  |
| 13 H | -0.4013 | 0.5153 | -0.9057 |

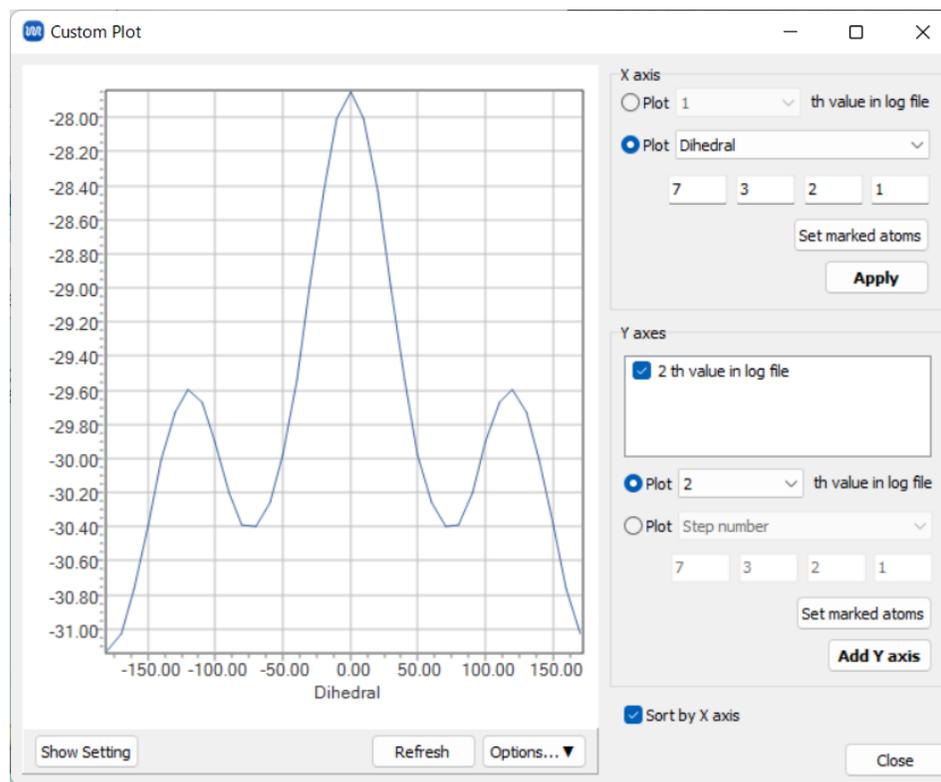
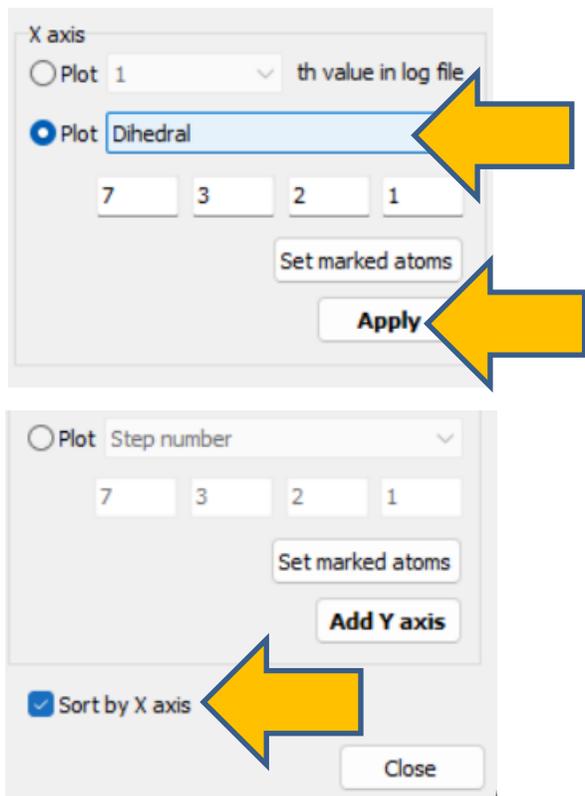
# III. 結果解析 (スキャン計算)

1. 主鎖の炭素原子を**1C**→**2C**→**3C**→**7C**の順にクリックします。
2. アニメーション操作パネルの**Custom Plot**ボタンをクリックします。



# III. 結果解析 (スキャン計算)

1. Custom Plotウィンドウ右のX axisのPlotのStep numberをDihedralに変更し、Applyボタンをクリックします。
2. Sort by X axisがウィンドウ右下に表示されている場合はチェックを入れます。
3. スキャンした二面角を変数としたときのエネルギーのグラフが表示されます。



# 最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



## [ユーザマニュアル](#)



## [Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar導入講習会](#)、[Winmostar基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上