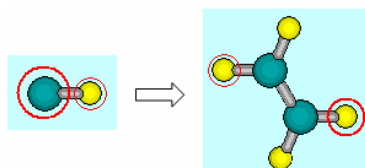


実験 反応解析 (Diels- Alder 反応)

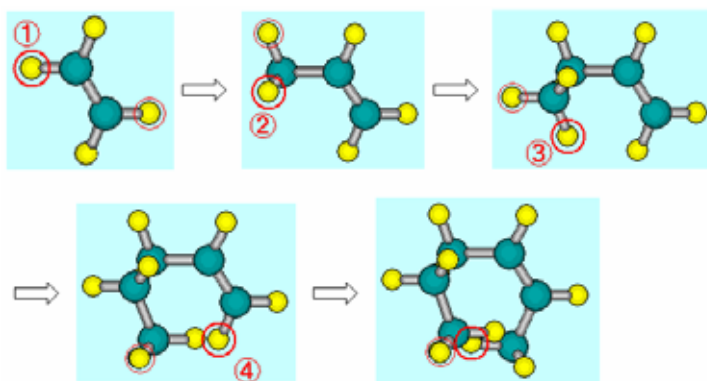
I. Diels-Alder 反応の遷移状態の探索

1. シクロヘキセンの作成

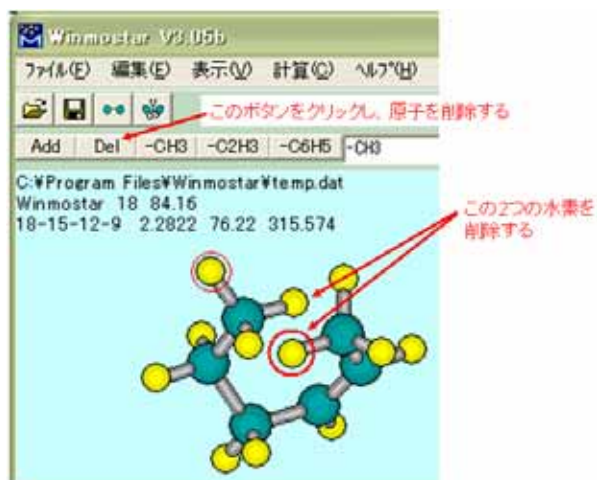
- i. [-C2H3]ボタンをクリックした後、炭素を右クリックしてエチレンの構造を作成する。



- ii. [-CH3]ボタンをクリックした後、 ~ の順に、水素を右クリックしてメチル基を4つ付加する。



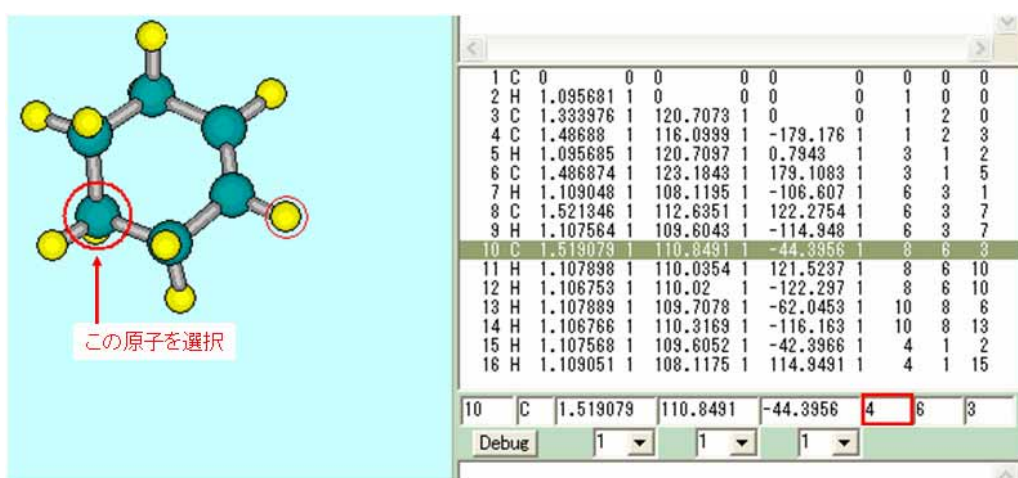
- iii. 不必要な水素が見えるように分子を回転させ、2つの水素を消去する。



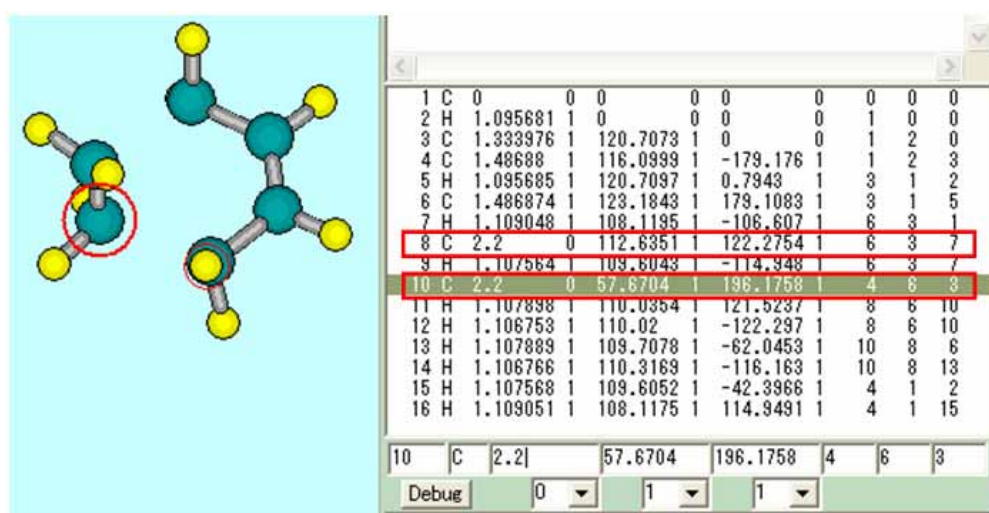
- iv. キーワード欄に「PM3 EF PRECISE」と入力する。
- v. 「cyclohexene.dat」の名前で保存する。
- vi. 計算メニューから、「MOP6W70 start」を選択する。

2. 遷移状態 (TS) 構造の作成

- i. 「10 C」の参照原子の1番目を「4」に変更する。

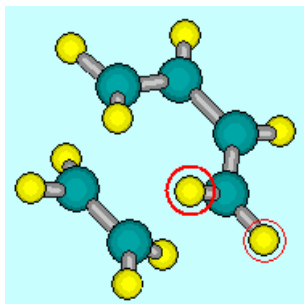


- ii. 「8 C」と「10 C」の2行について、他の炭素原子との間の結合距離を「2.2」とし、最適化フラッグを「0」にする。



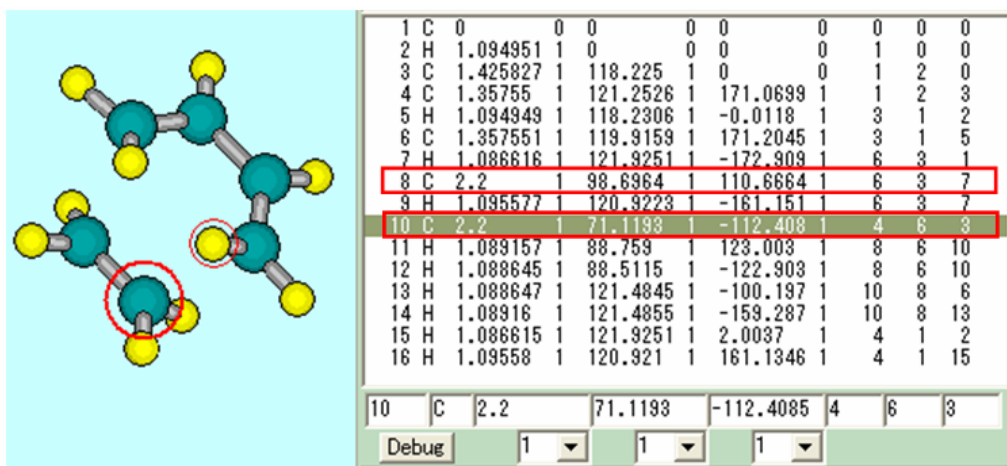
- iii. 計算方法を AM1 から PM3 に変更し、「prechts.dat」の名前で保存する。

- iv. 計算メニューから、「MOP6W70 start」を選択する。



3. 遷移状態の最適化と振動解析による確認

- i. 「8 C」と「10 C」の最適化フラッグを「1」に戻す。



- ii. キーワードとして「PM3 TS PRECISE」を入力し、「chts.dat」の名前で保存する。
- iii. 計算メニューから、「MOP6W70 start」を選択する。
- iv. 計算終了後、キーワードを「PM3 FORCE VECTORS」とし、「chfreq.dat」の名前で保存する。
- v. 計算メニューから、「MOP6W70 start」を選択する。
- vi. 計算が終了すると、「chfreq.out」が開かれる。

- vii. 得られた基準振動のなかで、ただ一つだけ負の固有値（虚の振動数）を有するものがあることを確認する。

ROOT NO.	1	2	3	4	5	6
基準振動	-932.94638	151.23662	269.40978	270.87090	390.39696	418.28657
1	-.00215	-.01260	.03020	-.01520	-.04664	.01469
2	.04375	-.02500	-.02152	-.01026	-.02539	-.00478
3	.00117	.01561	.05974	-.08848	-.01805	-.08738
4	-.00250	-.01261	.03055	-.01575	-.04384	.01487
5	-.01210	-.06272	.00174	-.01820	.04453	.01144
6	.05202	.04288	.11483	-.20971	-.06214	-.30057
7	.03594	.02785	.00280	-.01674	-.04628	-.00373

- viii. 遷移状態（TS）が得られたことになる。

（貞富博喬・木原 寛）