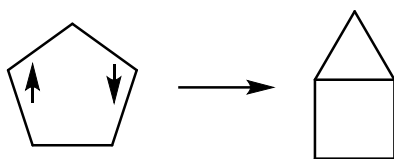


開殻一重項系の反応経路計算方法

ここでは、シクロペンタン-1,3-ジイルラジカルからハウサンが生成する反応経路計算を例にとります。



0 ファイル説明

以下のファイル・ディレクトリを Reaction plus Pro 2（以下、R+）計算環境にコピーして下さい。

housane-t.gjf	三重項の反応経路計算入力ファイル
housane-t.log	三重項の反応経路計算出力ファイル
housane-t.xyz	三重項の反応経路計算 xyz ファイル（開殻一重項反応経路の初期座標として利用）
housane-s.gjf	一重項の反応経路計算入力ファイル
housane-s.log	一重項の反応経路計算出力ファイル
housane-s.xyz	一重項の反応経路計算 xyz ファイル
housane-chk/	一重項の予備計算ファイルの入ったディレクトリ
housane-results.xlsx	一重項・三重項反応経路計算結果をまとめた Excel ファイル

1 開殻三重項の反応経路を求める

まず housane-t.gjf を R+で実行し、三重項の反応経路計算を実行します。この時、計算手法の文字列に「非制限」を意味する「u」を付けて下さい。（例：b3lyp → ub3lyp）

するともちろん三重項の反応経路が求まりますが、この時生成される housane-t-work ディレクトリの中に「bead-x.gjf」と「bead-x.chk」という一連のファイルを見つけることができます（ただし、x はビーズ番号で、デフォルトでは nbonds=15 なので、x = 0～14 となる）。

これらのファイルを利用して、次の計算を行います。

2 開殻一重項の一点計算を行う

開殻一重項の反応経路計算を行うには、各ビーズでの initial guess を用意するための一点計算を行う必要があります。

具体的には、housane-t-work ディレクトリ中の一連の bead-x.gjf と bead-x.chk ファイル（x = 0～14）を別ディレクトリ（housane-chk）にコピーした後、housane-chk 内の全ての bead-x.gjf ファイルについて以下のように中身を編集します。

- キーワード欄の「force」を消去し、代わりに「stable=opt」を指定する
- 電荷とスピン多重度欄のスピン多重度指定を「3」から「1」に変更する

上記変更が完了したら、housane-chk 内の rungau09（Gaussian 09 利用の場合）または rungau16（Gaussian 16 利用の場合）を実行します。（rungau09・rungau16 は bead-x.gjf を Gaussian で順次実行するスクリプトです。実行前に chmod コマンドで rungau09・rungau16 への実行権限付与をお願い致します。）

3 開殻一重項の反応経路を求める

1、2の計算結果を基に、R+で開殻一重項の反応経路計算を行います。この入力ファイル housane-s.gjf の特徴は、以下の通りです。

- %chk 欄に読み込むべき chk ファイルを指定する。例えば、

```
%chk=housane-chk/bead.chk
```

と指定すると、housane-chk ディレクトリ内の bead-0.chk~bead-14.chk を各ビーズにおける chk ファイルとして読み込む。

- 計算手法に「u」を付けて指定する。(例：ub3lyp)
- スピン多重度は「1」とする。
- インプット最後尾の追加インプット欄(\$react~\$end 欄)に、初期構造の座標として読み込むべき xyz ファイル（この場合は housane-t.xyz）を指定する（ファイル末尾に空行が必要）。

```
$react  
housane-t.xyz  
$end
```

以上のように指定することで、各ビーズの分子構造は1で得られた三重項の反応経路計算結果(housane-t.xyz)から、各ビーズの initial guess は2で得られた開殻一重項の一点計算結果(bead-0.chk~bead-14.chk)からそれぞれ読み込みまれ、開殻一重項の反応経路を計算することができます。

なお、UB3LYP/6-31G(d)での本反応例の計算結果は、以下のようになります。

