



國立中正大學

*National Chung Cheng University*



積極創新 修德澤人



**113-1**

**特色實驗教材四：以 WebMO 進行化學分子  
模擬**

**113.11.03 ~ 113.11.09 (預估操作時間：1.5 小時)**

# 一、目的

利用 WebMO 視覺化介面軟體建構化學分子的三維空間結構，並透過計算化學軟體預測分子性質。本實驗透過學習分子的建構與調整，使學生熟習利用電腦工具進行分子結構模擬以及量子化學計算，進而增進對於化學分子構型與性質及反應性間之關聯性的理解。



## 二、原理

分子模擬的是根據分子力學 (MM) 或量子力學 (QM) 的理論，來預測分子結構及其各種性質的方法。在 WebMO 中，分子模擬的核心原理主要有兩種：

分子力學模型：

分子力學利用能量之經驗公式及參數來計算分子的鍵長、鍵角和二面角。此方法可快速將一般分子的結構調整成一個合理的、低能量的形狀，但並不能考慮電子的行為，也不能模擬化學反應或電子密度的重新分佈。

## 量子化學模型：

量子化學模型利用量子力學理論方法來精確描述分子中的電子行為，並能夠預測分子的電子相關性質、化學鍵結強度及反應性。WebMO 可以整合多種量子化學計算軟體（如 Gaussian, MOPAC, GAMESS 等），提供更高精度的模擬，並使用相同的視覺化介面進行操作分析。



# 三、使用須知

設備

電腦

學校網域 (VPN)

WebMO 登入可經由

- ▶ 國立中正大學普通化學實驗課程→WebMO

國立中正大學  
普通化學實驗課程

國立中正大學  
高等教育深耕計畫

課程資訊 課程教材 實驗教學影片 WebMO 暑期微課程 相關連結 特色實驗室

教學照片

WebMO 課程講義

由連結網址  
或普通化學  
網頁可進  
WebMO 頁面



助教創建  
帳號



輸入帳號與密  
碼後即可使用  
WebMO

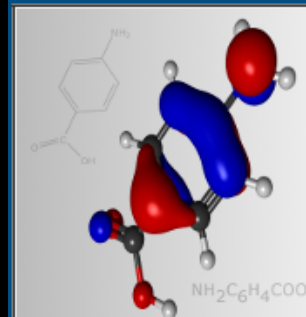


[http://apollo.chem.ccu.edu.tw/~WebMO/cgi-bin/webmo\\_pro/login.cgi](http://apollo.chem.ccu.edu.tw/~WebMO/cgi-bin/webmo_pro/login.cgi)

## WebMO Login

Version: 23.0.017p

WebMO pro for Computational Chemistry



Username

Password

[Connect using WebMO app](#)

Login



# 四、建構分子

1. 登入後可看到如下圖的主頁面，頂部選單用於建立和管理作業該頁面，其餘部分列出了您已提交或正在執行的作業

**WebMO Job Manager**

Status: 609260020, webmo, unlimited, 0 jobs

Folders: Inbox, Trash

Search: Search..., Displayed jobs, Search

Actions: New Job, Refresh, Download, Move To, Delete, Utilities, Logout

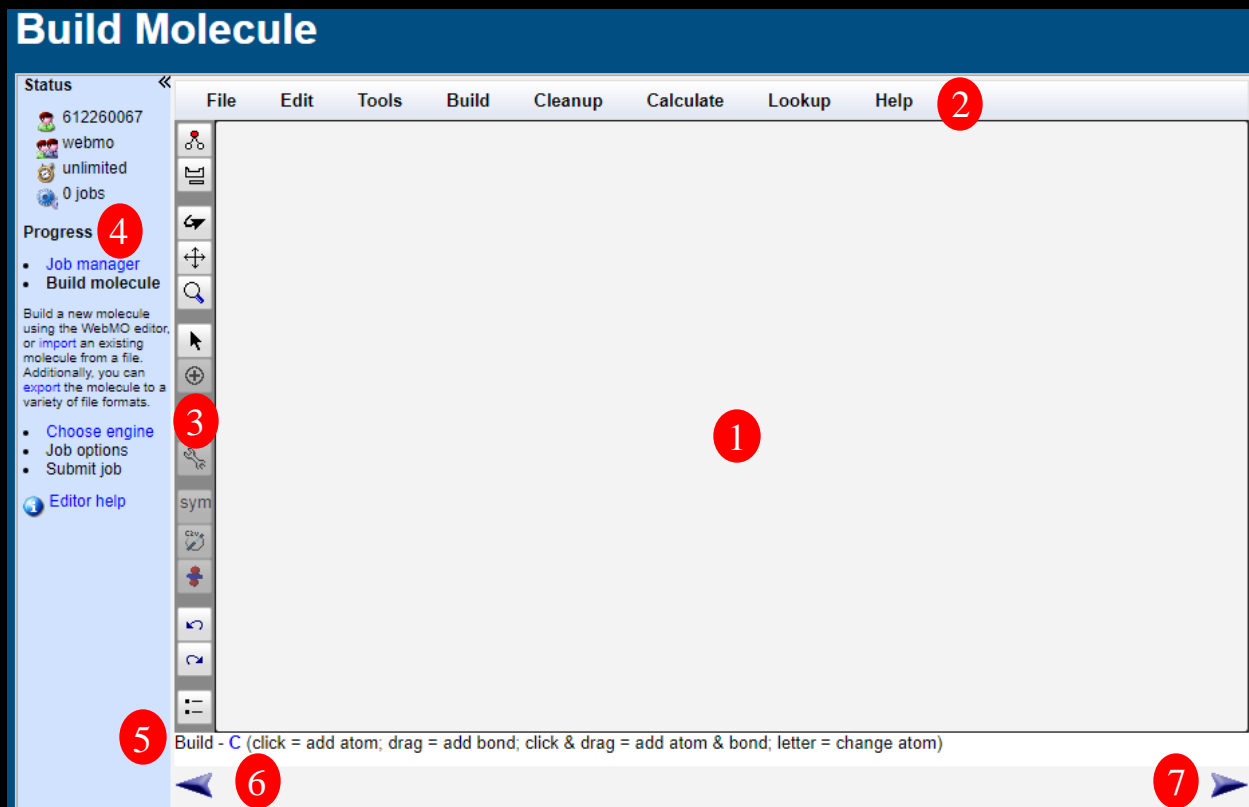
Sub-menu: Create New Job, Import Job, Execute Input File

	Description	Date	Status	Time	Actions
<input type="checkbox"/> 145	<a href="#">C2H4O2</a> Molecular Energy - Mopac	7/11/2024 15:24	Complete	0.0 sec	
<input type="checkbox"/> 131	<a href="#">C2</a> Molecular Energy - Gaussian	6/28/2024 15:17	Complete	0.6 sec	
<input type="checkbox"/> 129	<a href="#">CH3Cl</a> Optimize + Vib Freq - Gaussian	6/28/2024 11:02	Complete	16.5 sec	
<input type="checkbox"/> 128	<a href="#">CH3Cl</a> Optimize + Vib Freq - Gaussian	6/28/2024 10:58	Complete	18.4 sec	
<input type="checkbox"/> 127	<a href="#">C2H2</a> Natural Bond Orbitals - Gaussian	6/28/2024 10:45	Complete	0.9 sec	
<input type="checkbox"/> 125	<a href="#">CH4</a> Optimize + Vib Freq - Gaussian	6/28/2024 10:25	Complete	5.9 sec	
<input type="checkbox"/> 124	<a href="#">CHOF</a> Molecular Energy - Gaussian	6/28/2024 10:21	Complete	1.0 sec	

圖三、WebMO 登入時主頁面




## 2. 先點選「New job」再按「Create new job」可開啟「Build molecule」頁面

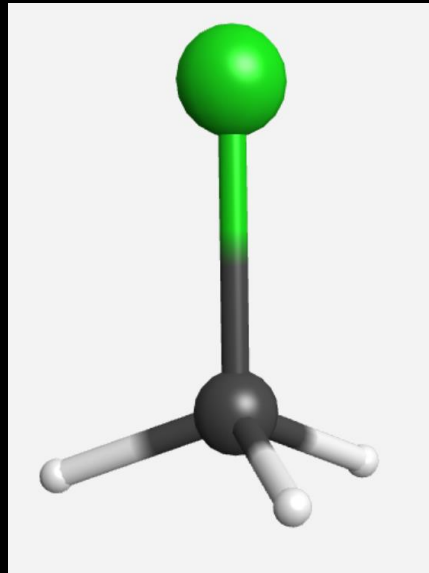


1. 編輯器視窗：建立和編輯分子結構
2. 功能表列：編輯器操作的位置
3. 工具列：常用工具的捷徑
4. 進度：顯示作業序列的進度
5. 狀態列：顯示目前模式
6. 上一步箭頭：返回上頁
7. 下一步箭頭：前進下頁

9 圖四、建構分子頁面介紹

# 建構氯甲烷分子 (CH<sub>3</sub>Cl)

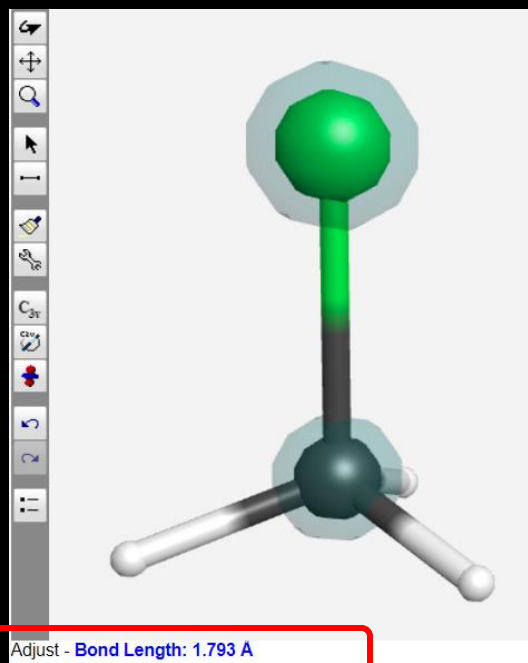
3. 在視窗中點一下插入 C 原子
4. 點選 Build → Other 選擇 Cl，在沿著 C 往外拉產生 C-Cl
5. 選擇 Cleanup  可使結構初步最佳化



圖五、氯甲烷分子

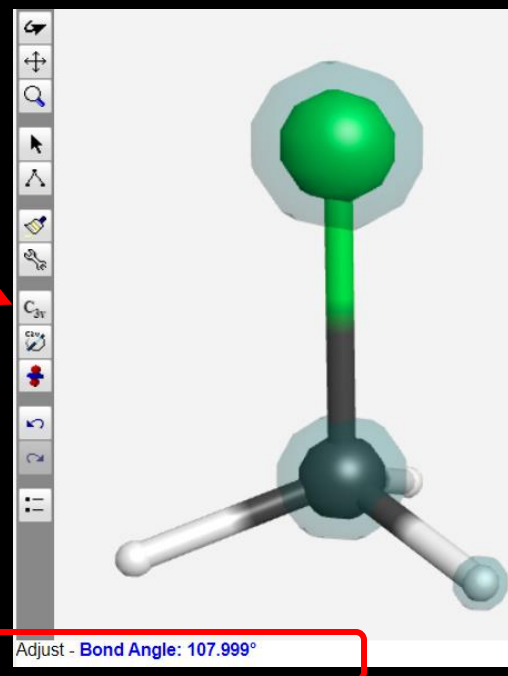
# 量測鍵長、鍵角

7. 量測鍵長、鍵角，並與實驗值進行比較
8. 點選欲測量鍵長的兩個原子
9. 點選欲測量鍵角的三個原子



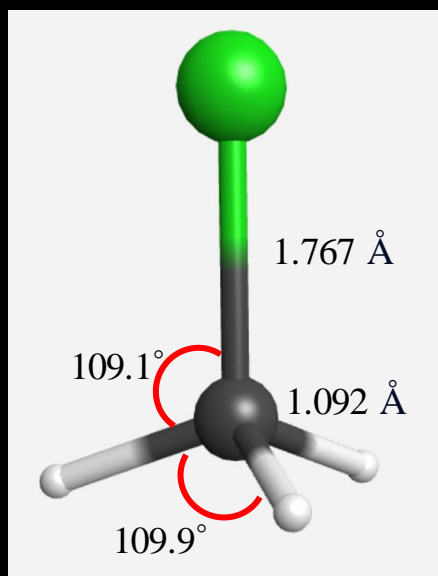
圖六、測量鍵長示意圖

※左側圖示  
可顯示分子  
之對稱性



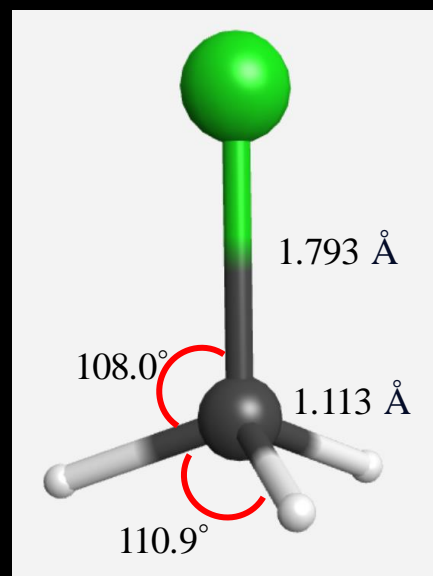
圖七、測量鍵角示意圖

CH<sub>3</sub>Cl實驗值：




圖八、部分氯甲烷鍵長、鍵角實驗值

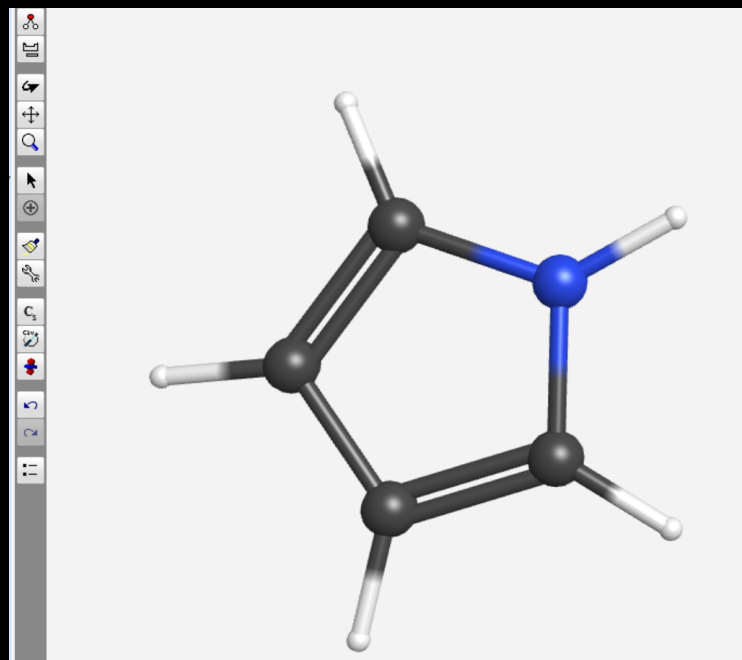
使用 Cleanup 後之最佳化結構：



圖九、經分子力學最佳化後，部分氯甲烷鍵長、鍵角

# 建構吡咯分子( $C_4H_4NH$ )

8. 在視窗中按一下以插入 C 原子，C 往外拉產生 C-C，形成五員環，拉雙鍵後，將其中 C 置換成 N
9. 選擇 Cleanup  可使結構初步最佳化
10. 量測鍵長、鍵角，與實驗值進行比較

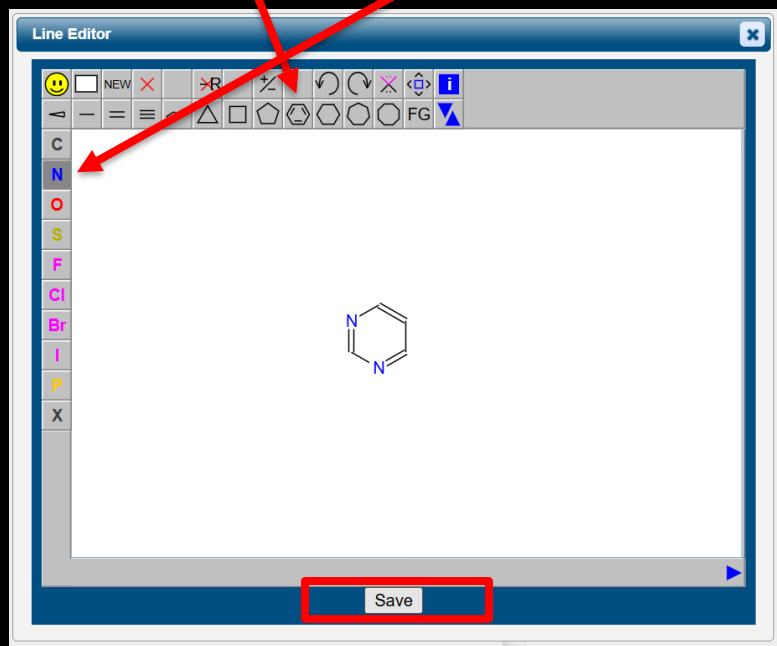


圖十、吡咯分子

# 以 2D Line Editor 方式建立 Pyrimidine

11. 上方工具列 Build → Line Editor 以 2D 方式建構分子

12. 點選苯環，再點選 N 原子取代兩個間位的 C 原子，  
按下 save，即可生成右邊的圖



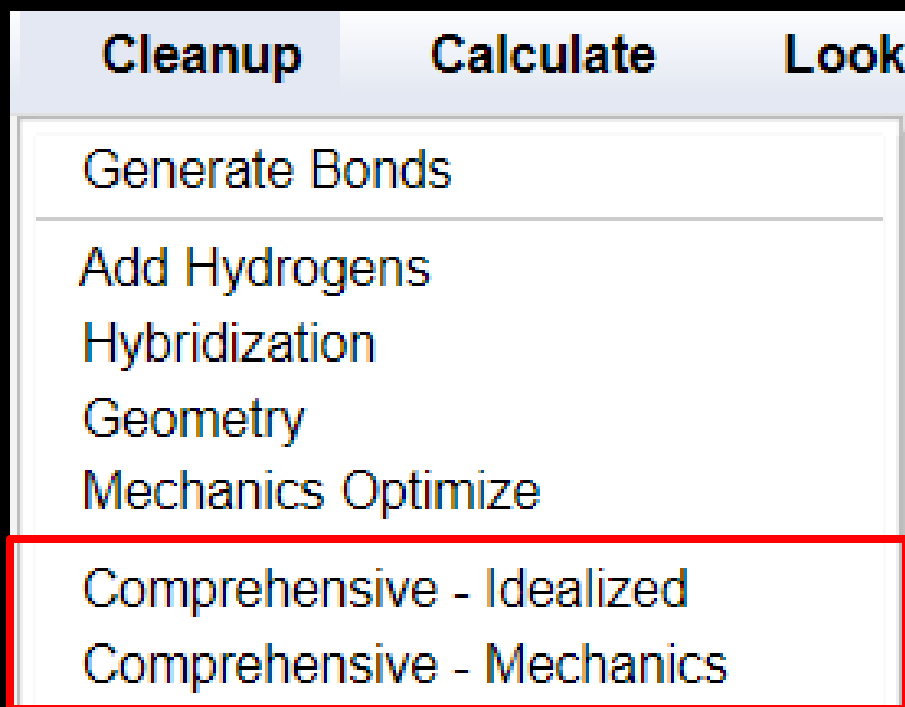
圖十一、2D 建構分子介面



圖十二、嘧啶分子



# Cleanup 選項



1. Comprehensive - Idealized  
符合VSEPR

2. Comprehensive - Mechanics  
使用 Molecular Mechanics Force  
Fields (MMFF)不考慮電子效應



Comprehensive Cleanup using Idealized Geometry



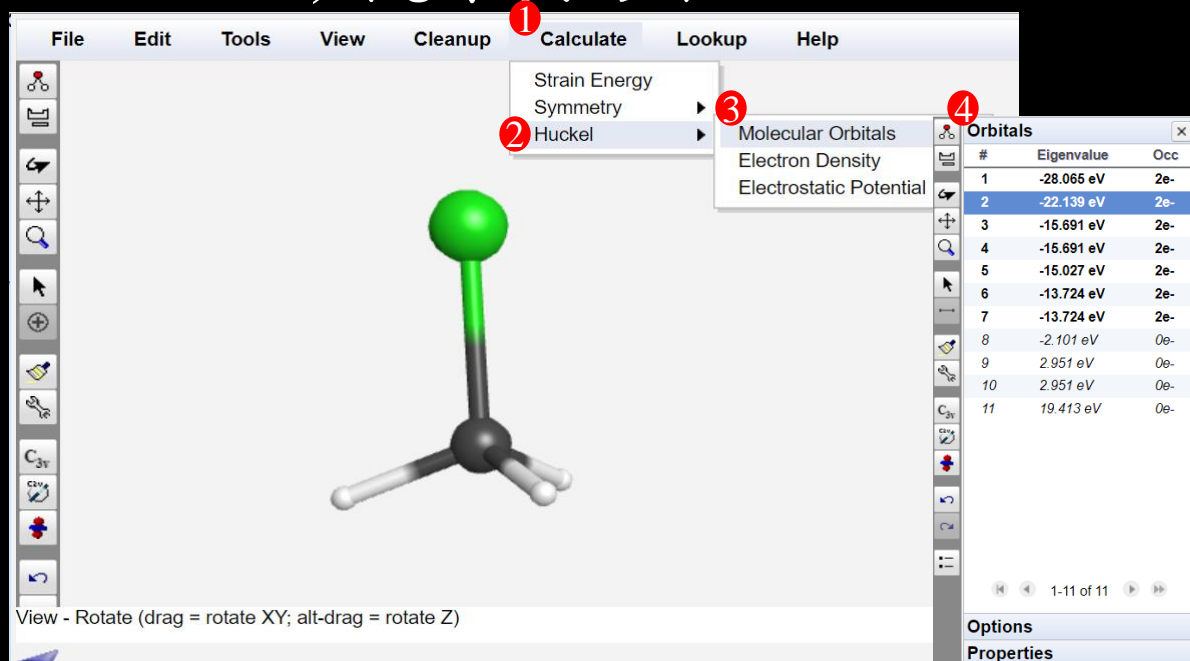
Comprehensive Cleanup using Mechanics

圖十二、兩種 cleanup 的區別

# 以 Hückel 方法計算分子軌域

13. 點選上方工具列中的 Calculate → Hückel → Molecular Orbitals

14. 可以選擇該分子的 orbital (如 Frontier Molecular Orbital) 觀察其形狀

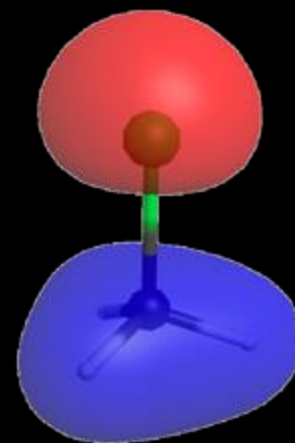


The screenshot shows a software interface with a menu bar (File, Edit, Tools, View, Cleanup, Calculate, Lookup, Help) and a toolbar on the left. The 'Calculate' menu is open, showing options: Strain Energy, Symmetry, Huckel, Molecular Orbitals, Electron Density, and Electrostatic Potential. The 'Molecular Orbitals' option is selected. A table of orbitals is displayed on the right, with the following data:

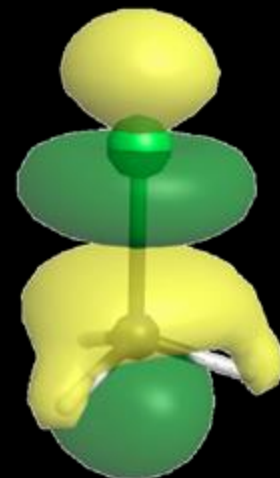
#	Eigenvalue	Occ
1	-28.065 eV	2e-
2	-22.139 eV	2e-
3	-15.691 eV	2e-
4	-15.691 eV	2e-
5	-15.027 eV	2e-
6	-13.724 eV	2e-
7	-13.724 eV	2e-
8	-2.101 eV	0e-
9	2.951 eV	0e-
10	2.951 eV	0e-
11	19.413 eV	0e-

The main window shows a 3D ball-and-stick model of a molecule (chloromethane) with a green sphere representing the chlorine atom and a grey sphere representing the carbon atom. The text 'View - Rotate (drag = rotate XY; alt-drag = rotate Z)' is visible at the bottom.

Occupied orbitals

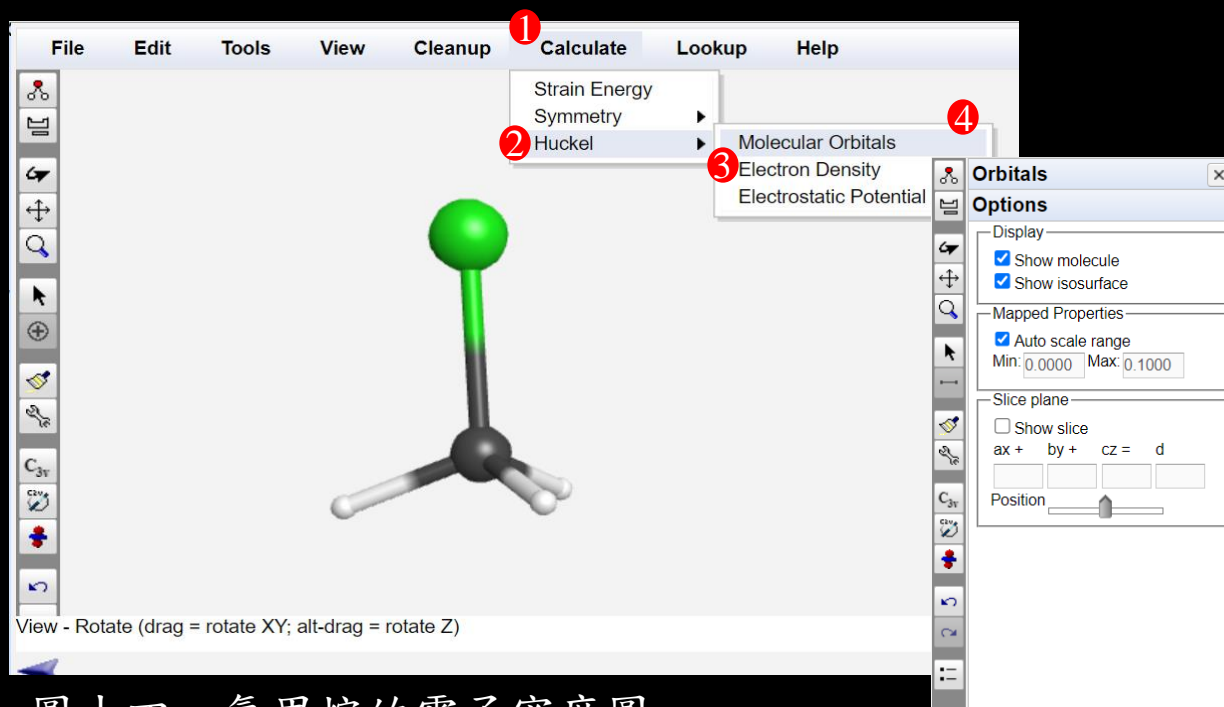


Unoccupied orbitals

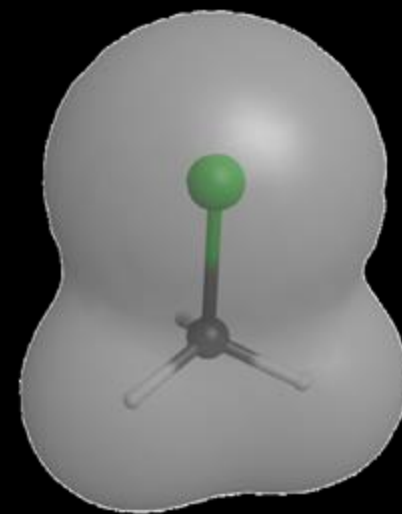


# 以 Hückel 方法計算電子密度

## 15. 點選上方工具列中的 Calculate → Hückel → Electron Density

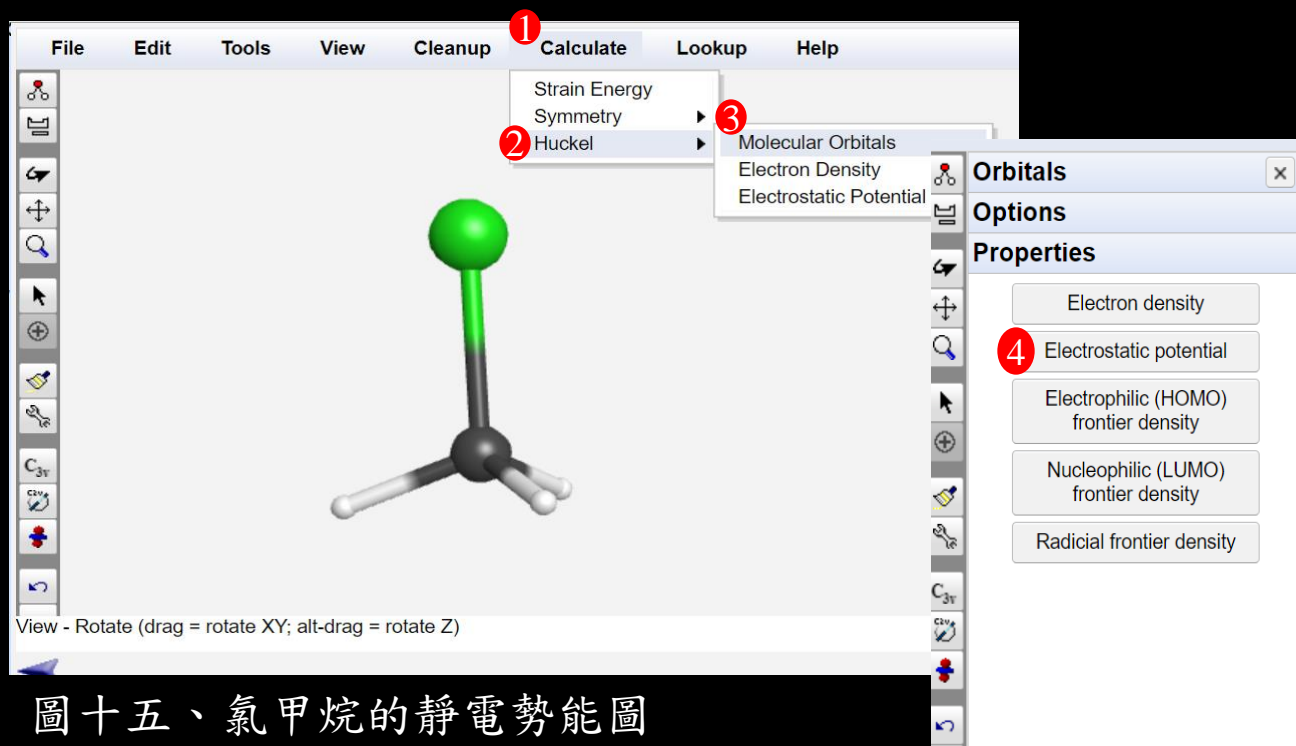


Electron density

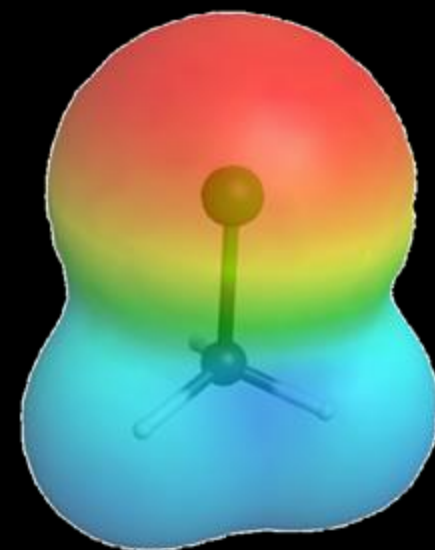


# 以 Hückel 方法計算靜電電位

## 16. 點選上方工具列中的 Calculate → Hückel → Electrostatic Potential



Electrostatic potential

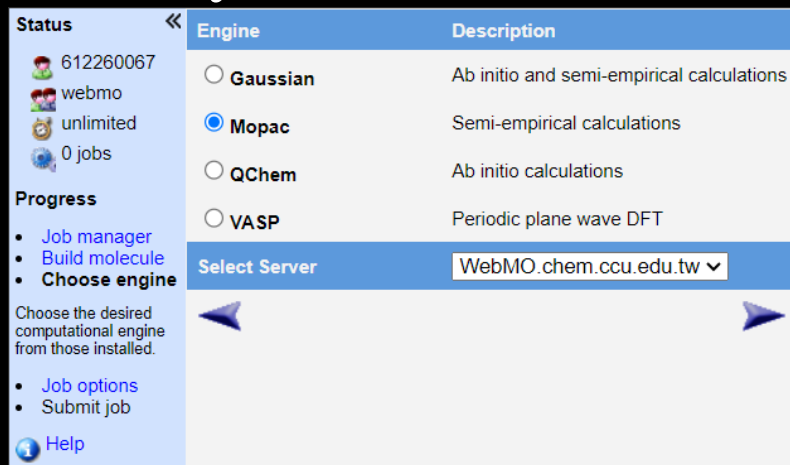


# 五、量子化學計算

1. 前面所使用的 MMFF 方法並未使用量子力學理論，若要獲得考慮鍵結及與電子相關的性質則需用量子化學的方法來處理

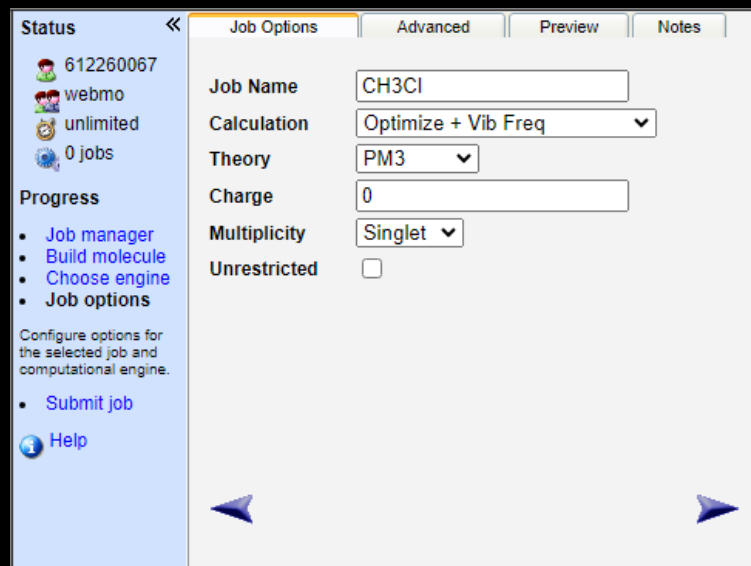
• Engine : Gaussian、MOPAC、Qchem...

• Theory : PM3, HF, MP2...



Engine	Description
<input type="radio"/> Gaussian	Ab initio and semi-empirical calculations
<input checked="" type="radio"/> Mopac	Semi-empirical calculations
<input type="radio"/> QChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> VASP	Periodic plane wave DFT

Select Server: WebMO.chem.ccu.edu.tw



Job Name: CH3Cl

Calculation: Optimize + Vib Freq

Theory: PM3

Charge: 0

Multiplicity: Singlet

Unrestricted:

# 能量單點計算 (SP)

- 使用 MOPAC 軟體
- Theory : PM3

計算氟原子的電子親和力，試與實驗值比較

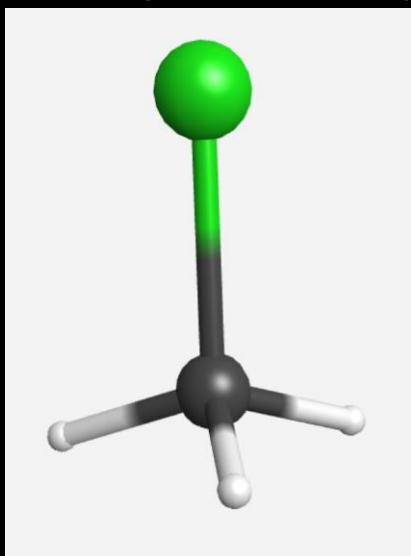




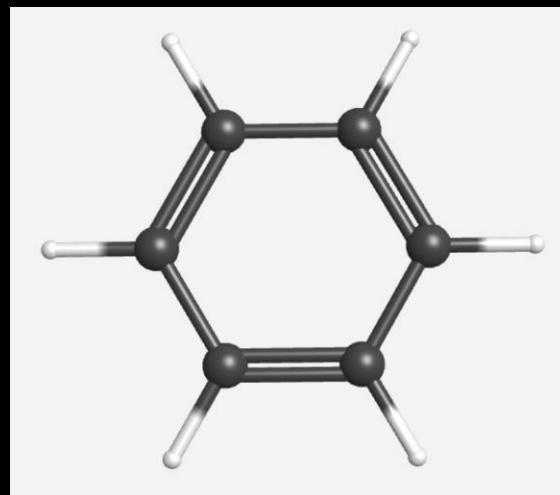
# 結構最佳化計算 (OPT)

- 使用 MOPAC 軟體
- Theory : PM3

計算 $\text{CH}_3\text{Cl}$ 、 $\text{C}_6\text{H}_6$  的鍵長鍵角，與實驗值比較




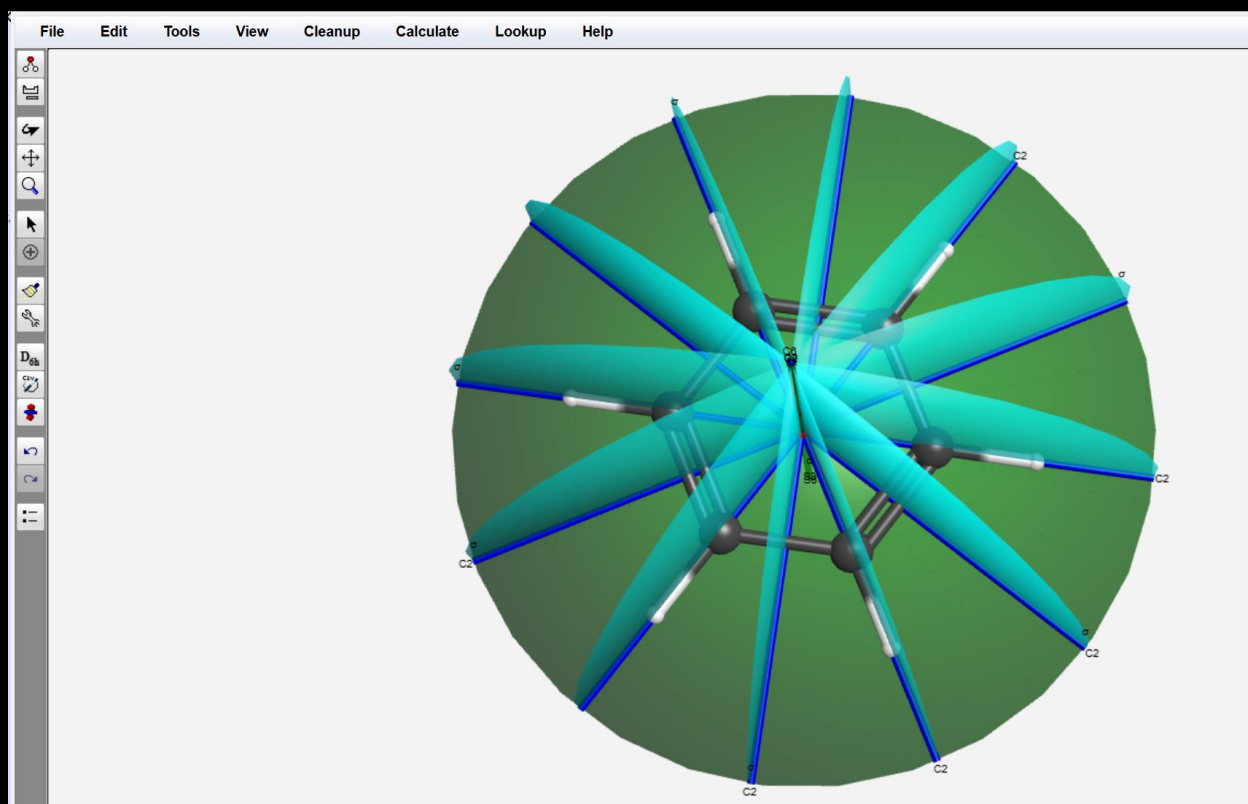
圖十八、氯甲烷分子



圖十九、苯環分子

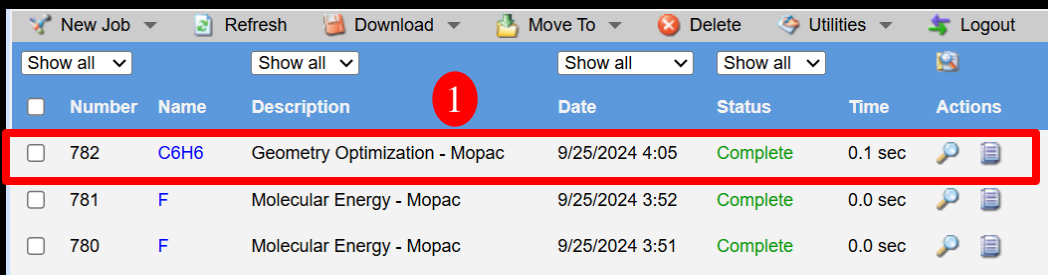
# 結構最佳化計算 (OPT)

- 點擊左側的  可得分子的結構對稱資訊，如點群、對稱平面、旋轉軸...等



圖二十、苯環的對稱資訊

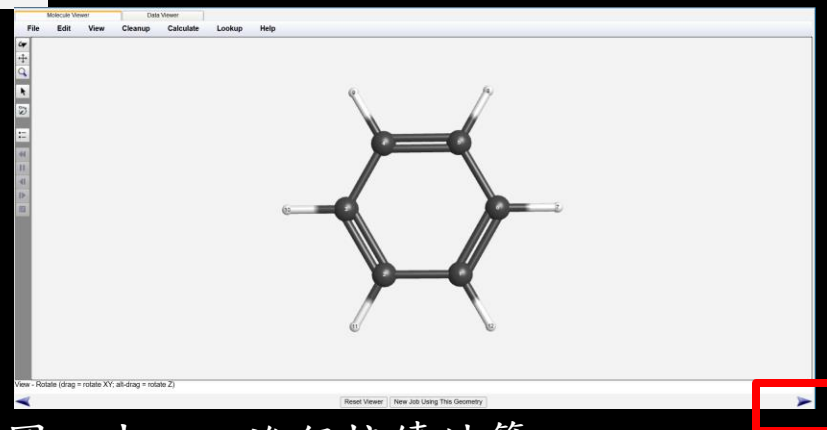
# 振動頻率及 IR 光譜計算



Number	Name	Description	Date	Status	Time	Actions	
<input type="checkbox"/>	782	C6H6	Geometry Optimization - Mopac	9/25/2024 4:05	Complete	0.1 sec	
<input type="checkbox"/>	781	F	Molecular Energy - Mopac	9/25/2024 3:52	Complete	0.0 sec	
<input type="checkbox"/>	780	F	Molecular Energy - Mopac	9/25/2024 3:51	Complete	0.0 sec	

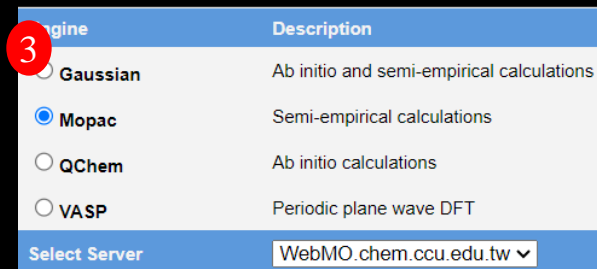
找到計算好的最佳化結構並點選

圖二十一、選擇完成最佳化計算的結構



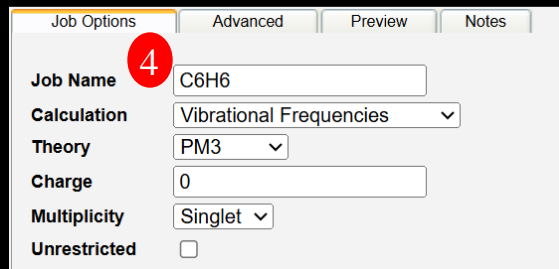
圖二十二、進行接續計算

點擊右下角箭頭會再次進入編輯頁面



Engine	Description
<input type="radio"/> Gaussian	Ab initio and semi-empirical calculations
<input checked="" type="radio"/> Mopac	Semi-empirical calculations
<input type="radio"/> QChem	Ab initio calculations
<input type="radio"/> VASP	Periodic plane wave DFT

Select Server: WebMO.chem.ccu.edu.tw



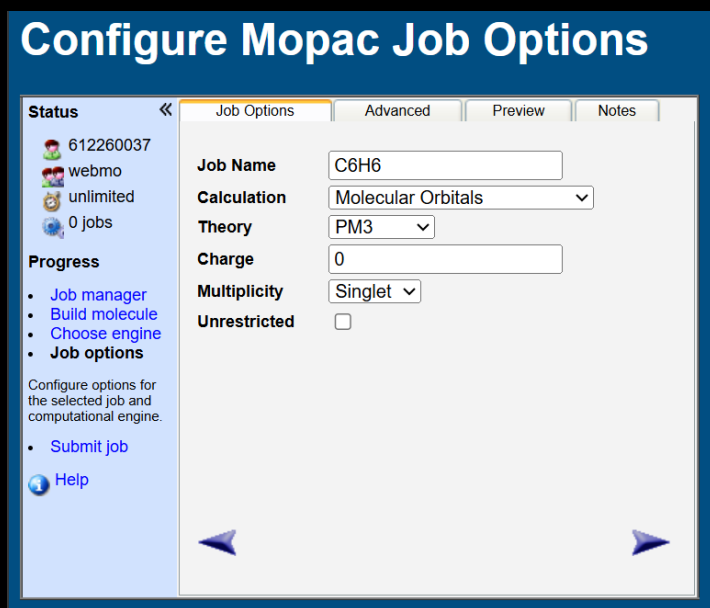
Job Options	Advanced	Preview	Notes
Job Name	C6H6		
Calculation	Vibrational Frequencies		
Theory	PM3		
Charge	0		
Multiplicity	Singlet		
Unrestricted	<input type="checkbox"/>		

Engine 選擇 Mopac，  
Calculation 選擇  
Vibrational Frequencies

圖二十三、選擇計算任務及計算引擎

# 分子軌域計算

- 選擇已計算完的結構 Calculation → Molecular Orbitals  
使用 PM3 理論，可與未進行量化計算結果相比較



圖二十四、設定計算分子軌域

Orbital	Symmetry	Occupancy	Spin	Energy (eV)	Actions
7	B1U	2	-	-16.286	
8	B2U	2	-	-15.151	
9	E1U	2	-	-14.637	
10	E1U	2	-	-14.637	
11	A2U	2	-	-13.235	
12	E2G	2	-	-12.376	
13	E2G	2	-	-12.375	
14	E1G	2	-	-9.751	
15	E1G	2	-	-9.751	
16	E2U	0	-	0.396	
17	E2U	0	-	0.396	
18	B1G	0	-	2.866	
19	B2U	0	-	3.273	
20	E2G	0	-	3.499	
21	E2G	0	-	3.499	
22	A1G	0	-	3.629	
Electron density					
Electrostatic potential					
Electrophilic (HOMO) frontier density					
Nucleophilic (LUMO) frontier density					
Radical frontier density					

圖二十五、量化計算後的分子軌域資訊

# 其他計算結果

- Overview
- Partial Charges
- Bond Order

Overview	
Quantity	Value
Route	PM3 BONDS CHARGE=0 SINGLET PRECISE GNORM=0.0
Method	
Symmetry	D6H
PM3 Heat of Formation	23.46288 kcal/mol
Dipole Moment	0.000 Debye
Server	WebMO.chem.ccu.edu.tw (0)
CPU time	0.09 sec

圖二十六、  
計算結果摘要

Bond Order													
Atom	Symbol	1 C	2 C	3 C	4 C	5 C	6 C	7 H	8 H	9 H	10 H	11 H	12 H
1	C	4.245040											
2	C	1.424000	4.245018										
3	C	0.003517	1.424206	4.245049									
4	C	0.116820	0.003518	1.424012	4.245035								
5	C	0.003517	0.116837	0.003517	1.424216	4.245028							
6	C	1.424229	0.003517	0.116828	0.003516	1.423993	4.245045						
7	H	0.005367	0.004922	0.000084	0.004920	0.005368	0.966441	0.806225					
8	H	0.004919	0.000084	0.004921	0.005368	0.966437	0.005369	0.000778	0.806188				
9	H	0.000084	0.004920	0.005368	0.966440	0.005368	0.004921	0.000427	0.000779	0.806217			
10	H	0.004921	0.005368	0.966440	0.005368	0.004920	0.000084	0.000062	0.000427	0.000778	0.806216		
11	H	0.005369	0.966437	0.005369	0.004920	0.000084	0.004919	0.000427	0.000062	0.000427	0.000778	0.806193	
12	H	0.966439	0.005368	0.004920	0.000084	0.004921	0.005367	0.000779	0.000427	0.000062	0.000427	0.000778	0.806212

Partial Charges		
Atom	Symbol	Charge
1	C	-0.1021
2	C	-0.1021
3	C	-0.1021
4	C	-0.1021
5	C	-0.1021
6	C	-0.1021
7	H	0.1021
8	H	0.1021
9	H	0.1021
10	H	0.1021
11	H	0.1021
12	H	0.1021

圖二十七、原子電荷分佈

圖二十八、原子間的鍵級數

# 國立中正大學化學暨生物化學系

教材製作：周冠毅 助教

教材編修：周冠毅 助教

指導老師：于淑君 教授

胡維平 教授

製作日期：113.11.04