

CNDO/S

〒564 吹田市岸部中1-18-13

大阪府立産業技術総合研究所・皮革試験所

汐崎 久芳

TEL 06-389-2632, FAX 06-337-6436

このプログラムは、福山大学・薬学部の小野行雄氏がCNDO/2を基にして開発し、汐崎が改良を加えたものである。DEC3000ワークステーションを対象として書かれているが、日付に関する部分を変更すれば、他社のワークステーションでも実行可能である。NEC-EWS4800, IBM-RS6000で実行確認済みである。パソコンでも、計算可能原子数等を減らせば実行可能である。計算可能原子数は、CNDO/Sプログラム本体であるcndos.fの中に、パラメータ文として次のように指定されています。

MAXATOM=200	200原子まで計算可
MAXORB=501	501軌道まで計算可
MAXCI=501	CI個数の上限500

1. 構成

cndos.f プログラム本体

fileconv.f データファイルを読んで文字の前後に'を挿入したファイルをFOOR005の名前で作成する

cnrun プログラム実行用のバッチファイル

h2co.dat テストデータ

h2co.lst テストデータ出力結果

thiophen.dat テストデータ

thiophen.lst テストデータ出力結果

sibenzen.dat & .lst

clbenzen.dat & .lst

phenphos.dat & .lst

2. 言語

FORTRAN77

3. PDSとする。ただし、バグの通知を期待する。

このプログラムを使って得られた結果を雑誌等に発表される場合は、次の文献を引用して下さい。

S. Tanaka, Y. Ono, and Y. Ueda, Chem. Pharm. Bull., 33, 3077 (1985).

4. 入力用ファイル

チオフェンを例とする入力用ファイルは以下のようになります。フォーマットはフリーフォーマットです。

```
THIOPHEN
CNDO      SINGLET    BONDS      SPD  NOINTER SHORT
   3      2    0.585    0.3
   9  0    60    1
1   S    0.000000 -1.228722  0.000000
2   C    1.228466 -0.026580  0.000000
3   C    0.726886  1.228721  0.000000
4   C   -0.726886  1.228721  0.000000
5   C   -1.228466 -0.026580  0.000000
6   H    2.288113 -0.250272  0.000000
7   H    1.334213  2.125405  0.000000
8   H   -1.334213  2.125405  0.000000
9   H   -2.288113 -0.250272  0.000000
```

1行目 : タイトル行 80文字まで

2行目 : オプション行

オプションの指定を行います。大文字でも小文字でもかまいません。 オプションの個数や順番も自由です。オプションの種類は以下の通り。

CNDO (INDO)	CNDO (or INDO) 計算を行います。
sp (sp d)	sp (or sp d) 基底セットを用いて計算します。
BONDS	これを指定すると結合次数を出力します。
NOINTER	これを指定すると原子間距離を出力しません。

S I N G L E T	一重項励起のみ計算します。
T R I P L E T	一重項励起と三重項励起を計算します。
S H O R T	これを指定すると省略出力します。
O U T M O	これを指定すると JCPE P008 MOLMOL2 用の出力ファイルが作成される。

3 行目 : 近似式を選択を行います

反発積分式、核間反発エネルギー式、PKAPPA, DKAPPA

反発積分式 = 1 : P a r i s e r の式

2 : 大野の式

3 : 西本-又賀の式

4 : 理論式

核間反発エネルギー式 = 1 : $Z_a * Z_b / 1$

2 : $Z_a * Z_b * \gamma_{a b}$

PKAPPA = 0. 5 8 5

DKAPPA = 0. 3

PKAPPA, DKAPPAは、共鳴積分補正用の値。

$I_{rs} = 1/2 K S_{rs} (\beta_A + \beta_B)$

を評価する際、 σ 電子について $K = 1. 0$ 、 π 電子について $K = 0. 5 8 5$ 、 d 電子について $K = 0. 3$ としている。 d 電子については、上記の文献を参照 して下さい。

4 行目 : 化合物情報

原子数、荷電、C I 個数、励起状態の結合次数出力する個数

注) C I の個数の上限は、使用できるメモリおよびコンパイル時に指定した個数に依存します。添付したプログラムでは、5 0 0 個を上限 としていきます (MAXCI = 5 0 1)。

5 ~ 1 3 行目 : 番号、元素、座標

各原子につけた番号、元素記号、x y z 座標

5. プログラムの実行方法

フロッピィに入っている cndos.f, fileconv.f, cnrun, h2co.dat をWSに送り、

f77 cndos.f -o cndos.exe

f77 fileconv.f -o fileconv.exe

で実行ファイルを作り、cnrun の中で、codos.exe と fileconv.exe のディレクトリを指定

している部分を変更し、`chmod` で実行可能ファイルにした後、

```
cnrun h2co.dat
```

とすると、計算が実行され、結果は `h2co.lst` として得られます。

5. パラメータ表

Atom	Core integral			gamma	beta
	s	p	d		
H	7.175			12.85	-12.0
C	14.960	5.805		10.93	-17.5
N	20.485	8.480		11.88	-26.0
O	27.255	10.965		15.13	-30.0
Si	10.033	4.133	0.337	9.866	-8.5
P	14.033	5.464	0.500	8.668	-15.0
S	17.650	6.989	0.713	6.604	-17.0
Cl	21.591	8.708	0.977	7.428	-20.0