

 winmostar チュートリアル

CNDO/S

基礎編

V11.1.0

2022年4月21日 株式会社クロスアビリティ

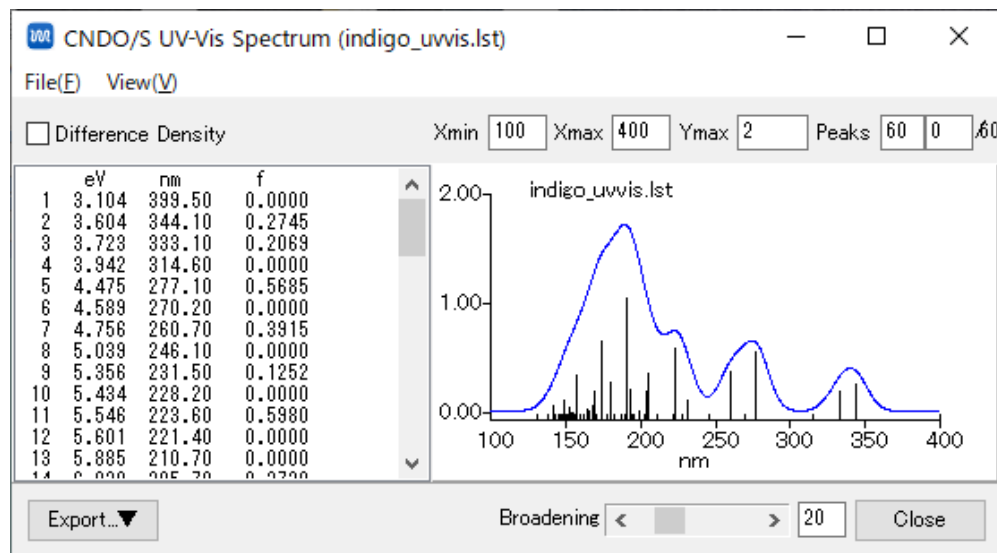
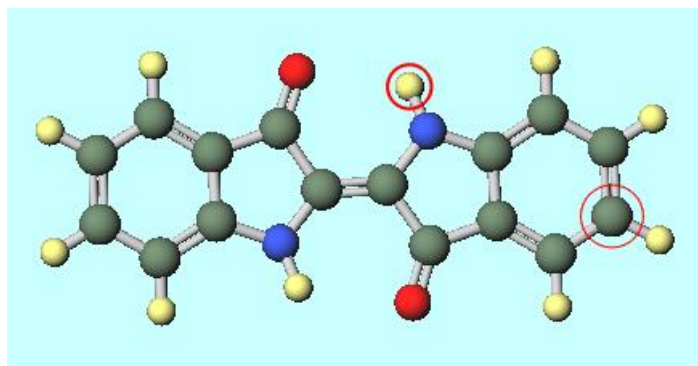
注：本書の一部操作はV10で作成されています。
V11に完全対応したチュートリアルを現在準備中です。
V10からV11の変更点は[移行ガイド](#)および[更新履歴](#)を参照してください。

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

- インディゴ分子をMOPACで構造最適化した後、CNDO/Sを用いてUV-Visスペクトルを計算します。



注意点：

- Hartree-Fock法に近似を導入した半経験的分子軌道法は高速に計算できますが、定量的、場合によっては定性的にも実験値とずれることがあります。
- より高い精度で計算を行いたい場合は、GAMESS/Gaussian/NWChem基礎編チュートリアルをご覧ください。

I. モデルの作成

Winmostarを起動し、インディゴ分子を作成する。


1. SMILES文字列で作成する場合は**ファイル | インポート | SMILES...**をクリックし、**Import SMILES**ウインドウの入力欄に以下の文字列を入力し、**Import**ボタンをクリックする。

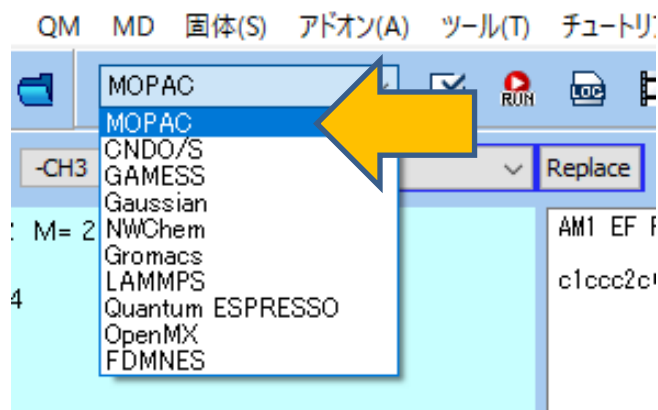
c1ccc2c(c1)C(=O)/C(=C#3/C(=O)c4ccccc4N3)/N2

2. 黒い画面が出現し数秒後にメインウインドウにインディゴ分子が表示され、「処理が正常に終了しました。」とメッセージウインドウが出現する。
3. **OK**ボタンを押してメッセージウインドウと**Import SMILES**ウインドウを閉じる。

The screenshot shows the Winmostar (PREMIUM) V10.3.5 interface. The 'ファイル(F)' menu is open, and the 'インポート(I)' option is selected, which has opened the 'Import SMILES' dialog box. The dialog box contains the text 'Enter SMILES: c1ccc2c(c1)C(=O)/C(=C#3/C(=O)c4ccccc4N3)/N2' and two radio buttons: 'Use OpenBabel' (selected) and 'Use Balloon'. The 'Import' button is at the bottom right of the dialog. To the right of the dialog, a 3D ball-and-stick model of the Indigo molecule is shown, with red circles highlighting the nitrogen atoms. Yellow arrows point from the 'インポート(I)' menu item, the SMILES input field, and the 'Import' button to the corresponding parts of the dialog box.

II. MOPACによる構造最適化計算の実行

1. ソルバー一覧から **MOPAC** を選択し、 (キーワード設定ボタン) をクリックする。
2. **MOPAC Setup** ウィンドウ右下の  (Runボタン) をクリックする。
3. ファイル名に **indigo.dat** と入力して保存する。
4. 数秒後に計算が終了しログファイルが開く。
構造最適化後の構造が自動で読み込まれ、メインウィンドウにその構造が表示される。



```
indigo.out - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
*****
** [MOPAC] Ver.6 ;                               by Dr. James J.P. Stewart, **
** FRANK J. SEILER RES. LAB., U.S. AIR FORCE ACADEMY, COLO. SPGS., CO. 80840 **
** MOPAC6.03 ON Windows95,NT,XP ;                 by N.Senda(Tencube) 2008.04.26 **
*****

AM1 CALCULATION RESULTS

c1ccc2c(c1)C(=O)/C(=C#3/C(=O)c4ccccc4N3)/N2_14

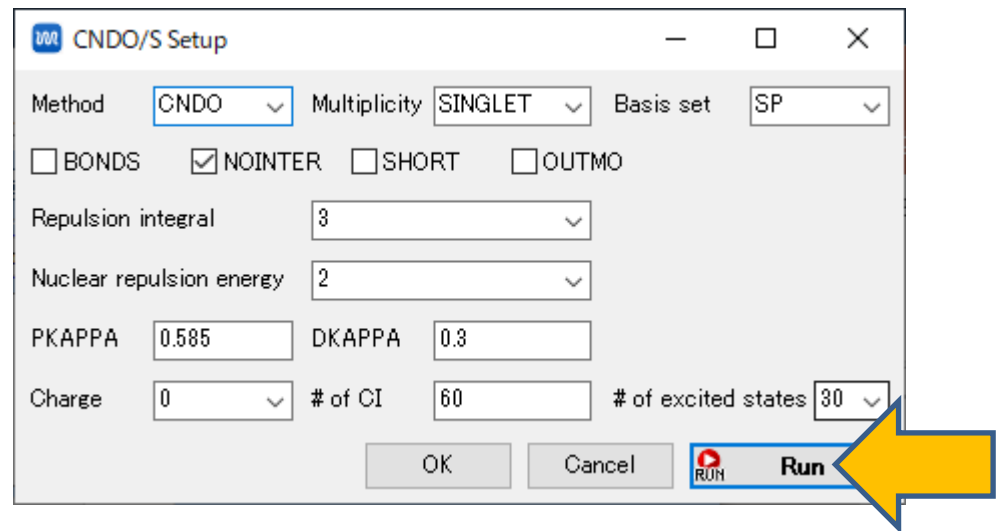
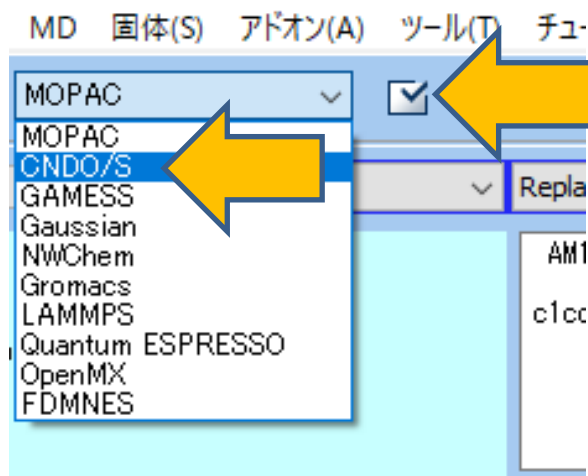
*****
* MOPAC: VERSION 6.03          CALC'D. 09-Jan-20
* VECTORS - FINAL EIGENVECTORS TO BE PRINTED
* GRAPH   - GENERATE FILE FOR GRAPHICS
* MMOK    - APPLY MM CORRECTION TO CONH BARRIER
* T=      - A TIME OF 3600.0 SECONDS REQUESTED
* DUMP=N  - RESTART FILE WRITTEN EVERY 3600.0 SECONDS
* EF      - USE EF ROUTINE FOR MINIMUM SEARCH
* AM1     - THE AM1 HAMILTONIAN TO BE USED
* PRECISE - CRITERIA TO BE INCREASED BY 100 TIMES
* NOINTER - INTERATOMIC DISTANCES NOT TO BE PRINTED
* GNORM=  - EXIT WHEN GRADIENT NORM DROPS BELOW .500E-01
*****070BY090
0
-----
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK

c1ccc2c(c1)C(=O)/C(=C#3/C(=O)c4ccccc4N3)/N2_14

ATOM  ELEMENT  BOND LENGTH  BOND ANGLE  TWIST ANGLE
-----
18行、58列  100% Windows (CRLF) UTF-8
```

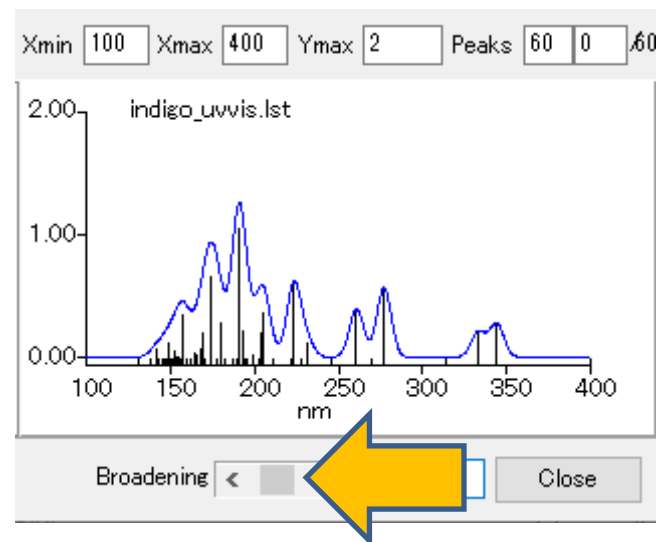
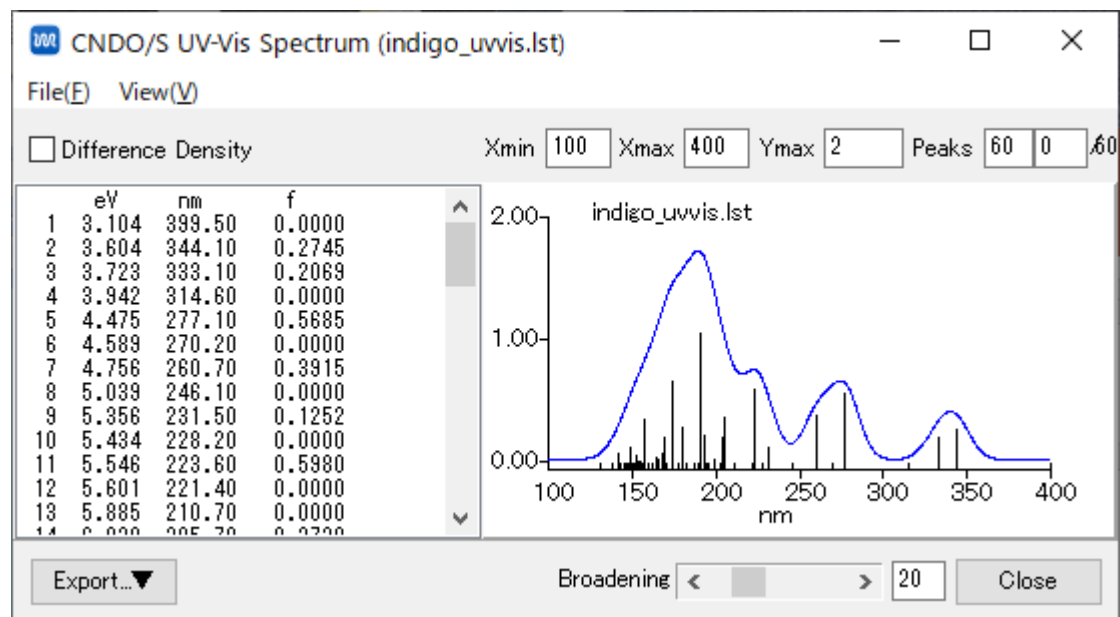
III.CNDO/SによるUV-Vis計算

1. ソルバー一覧から**CNDO/S**を選択し、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **CNDO/S Setup**ウィンドウでは特に設定を変更せず**Run**ボタンをクリックする。
3. ファイル名に**indigo_uvvis.cnd**と入力して保存すると計算が開始される。



IV. UV-Visスペクトルの表示

1. CNDO/S計算の終了後、自動で**CNDO/S UV-Vis Spectrum**ウィンドウなどが表示される。**CNDO/S UV-Vis Spectrum**ウィンドウ左の欄に、各ピークの励起エネルギー(eV)、波長(nm)、および振動子強度(f)が表示される。
 - **Broadening**のスクロールバーを動かすことで青線のスペクトルの幅を変更できる。



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