

 winmostar チュートリアル

MOPAC

基礎編

V10.0.5

2020年4月8日

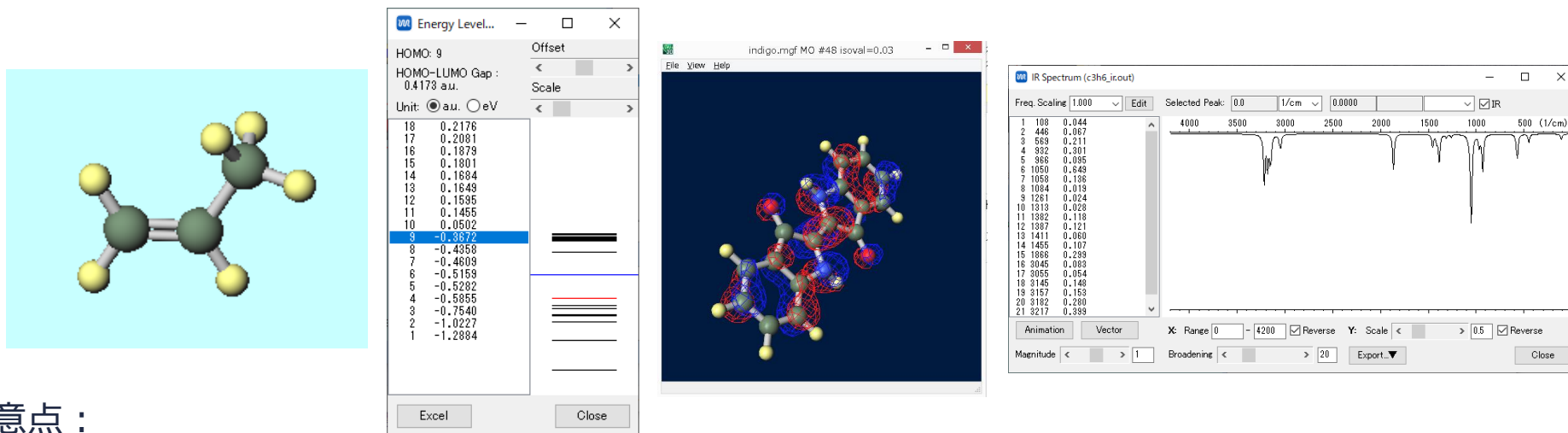
株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)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

- プロピレン分子の半経験的方法による量子化学計算をMOPACを用いて実行します。
- 構造最適化計算を行って、安定な構造、その分子軌道のエネルギーと形状を確認します。その後、最適化構造でIRスペクトル計算をします。



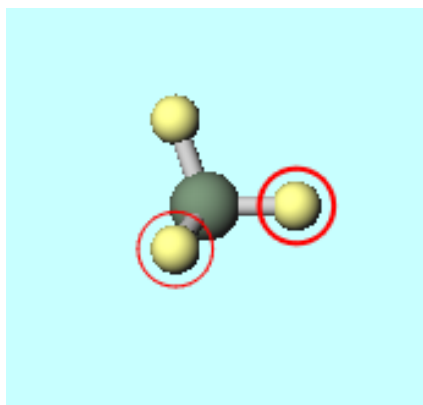
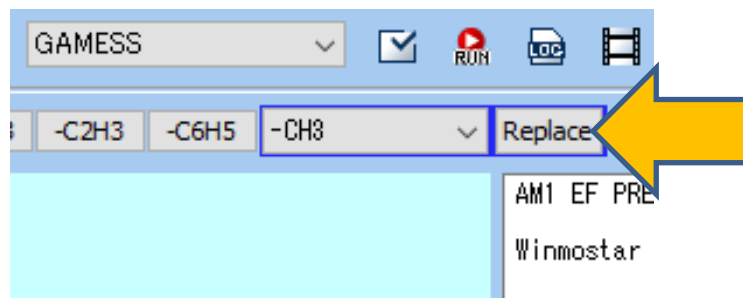
注意点：

- 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。

謝辞：本資料作成にあたり元富山大学の木原寛氏の資料を参考にしました。

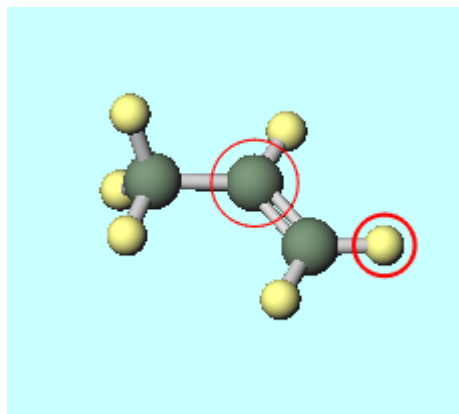
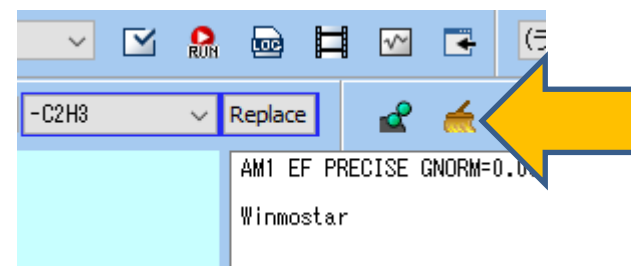
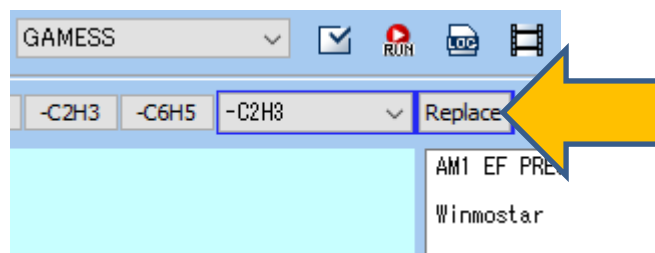
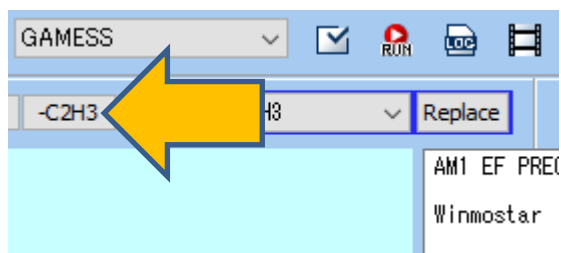
I. 分子を作成

1. ファイルメニュー | 新規をクリックする。
2. Replaceボタンをクリックすると、メタン分子が作成される。



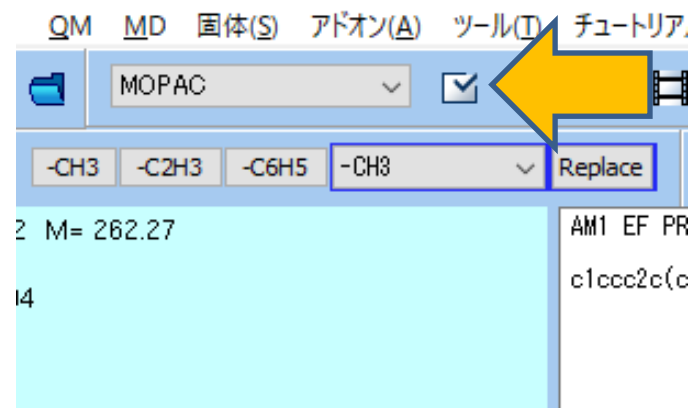
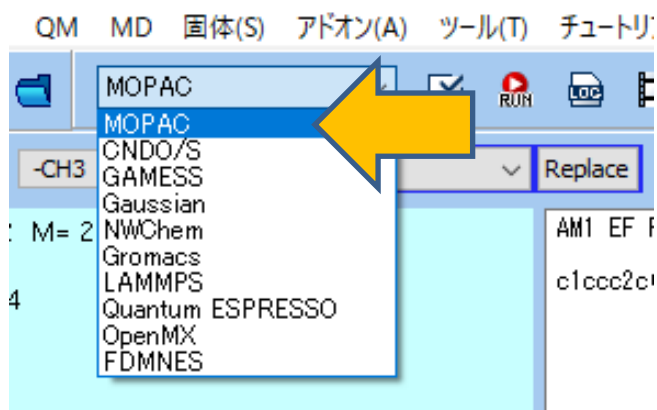
I. 分子を作成

1. ツールバーの**-C2H3**ボタンをクリックする。
2. 再度**Replace**ボタンをクリックするとプロピレン分子が作成される
3. 🗑️ (簡易構造最適化)ボタンをクリックして、力場パラメータを使った簡易的な構造最適化をする。



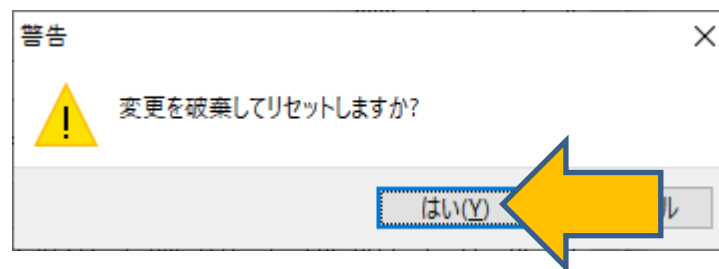
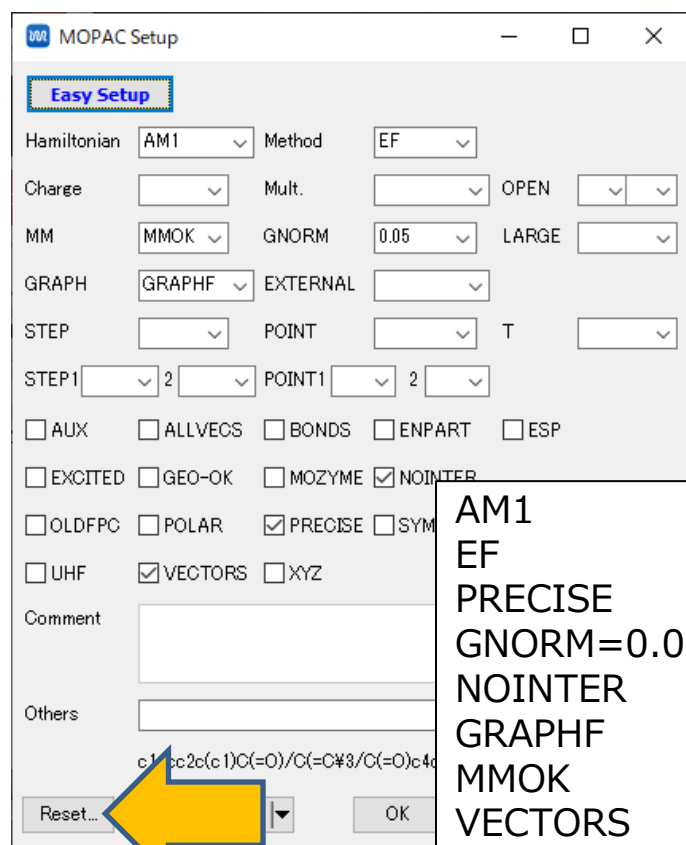
II. キーワード設定

1. メインウィンドウ上部のソルバーを選択メニューで**MOPAC**を選択する。
2. その横の (キーワード設定ボタン)をクリックする。



II. キーワード設定

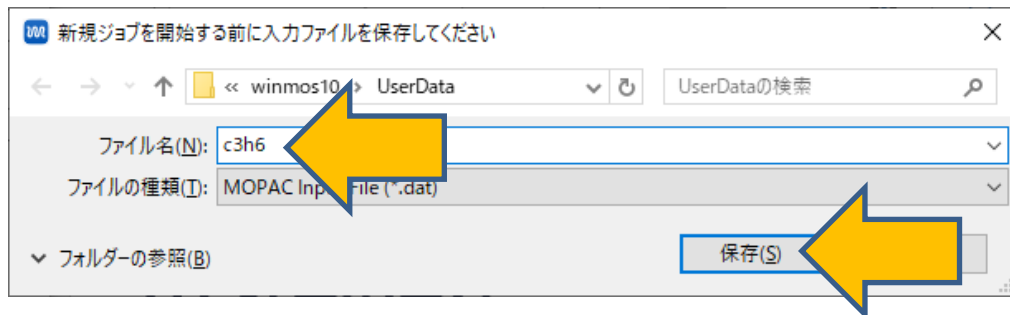
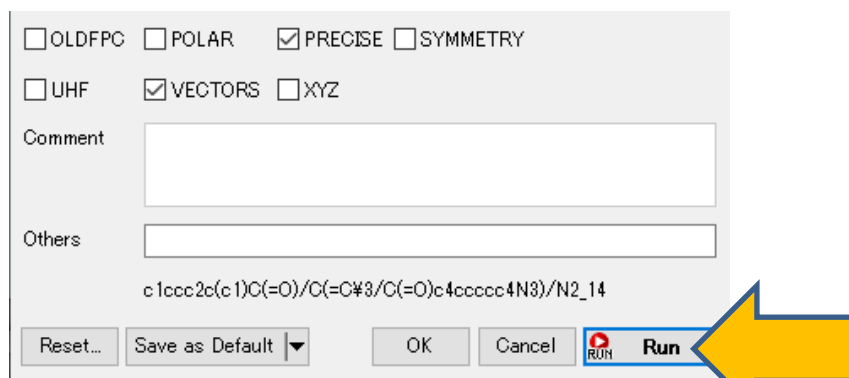
1. MOPACの計算条件を指定するための**MOPAC Setup**ウィンドウが開く。
2. デフォルトの計算条件に戻す場合は、左下の**Reset**ボタンをクリックし、警告ダイアログでは**はい**をクリックする。リセット後に設定されるデフォルトの各キーワードの意味を以下に示す。



AM1	:	ハミルトニアンはAM1にする
EF	:	EF法で構造最適化計算を行う
PRECISE	:	構造最適化の際の閾値を小さくする (=高精度にする)
GNORM=0.05	:	エネルギー勾配ノルムが0.05以下になったら収束したとみなす
NOINTER	:	原子間距離を出力しない
GRAPHF	:	グラフィックス用ファイルを発生させる
MMOK	:	CONH結合に分子力学補正を加える
VECTORS	:	軌道係数を出力する。

III. 構造最適化計算の実行

1. **MOPAC Setup** ウィンドウで **Run** ボタンを押すと、「新規ジョブを開始する前に入力ファイルを保存してください」というメッセージとともに、MOPACの入力ファイルを保存する先を聞かれる。
2. ここでは「**c3h6**」と入力し（拡張子は自動で現在選択されているものが補われる）、**保存** ボタンを押すと計算が開始され、自動で黒いコンソールウィンドウが数秒間出現する。



```
CYCLE: 10 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.7 GRAD.: 1344.541 HEAT: 90.53185
CYCLE: 11 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.6 GRAD.: 1227.507 HEAT: 110.2806
CYCLE: 12 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.6 GRAD.: 674.531 HEAT: 63.17431
CYCLE: 13 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 1493.196 HEAT: 81.34975
CYCLE: 14 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 250.618 HEAT: 43.32854
CYCLE: 15 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 191.141 HEAT: 41.28660
CYCLE: 16 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.4 GRAD.: 66.591 HEAT: 39.94230
CYCLE: 17 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.4 GRAD.: 53.650 HEAT: 39.52613
CYCLE: 18 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.3 GRAD.: 33.445 HEAT: 39.28663
CYCLE: 19 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.3 GRAD.: 13.650 HEAT: 39.18944
CYCLE: 20 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.3 GRAD.: 13.085 HEAT: 39.15706
CYCLE: 21 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.2 GRAD.: 9.812 HEAT: 39.13082
CYCLE: 22 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.2 GRAD.: 4.541 HEAT: 39.10855
CYCLE: 23 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.2 GRAD.: 5.196 HEAT: 39.09493
CYCLE: 24 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.1 GRAD.: 6.827 HEAT: 39.07691
CYCLE: 25 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.1 GRAD.: 6.309 HEAT: 39.06044
CYCLE: 26 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.0 GRAD.: 4.511 HEAT: 39.04067
CYCLE: 27 TIME: .03 TIME LEFT: 3599.0 GRAD.: 5.284 HEAT: 39.01929
CYCLE: 28 TIME: .05 TIME LEFT: 3599.0 GRAD.: 6.504 HEAT: 38.99742
CYCLE: 29 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.9 GRAD.: 5.556 HEAT: 38.97976
CYCLE: 30 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.9 GRAD.: 3.221 HEAT: 38.96855
CYCLE: 31 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.9 GRAD.: 3.199 HEAT: 38.95711
CYCLE: 32 TIME: .05 TIME LEFT: 3598.8 GRAD.: 3.916 HEAT: 38.94901
CYCLE: 33 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.8 GRAD.: 3.269 HEAT: 38.94138
CYCLE: 34 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.8 GRAD.: 2.758 HEAT: 38.93337
CYCLE: 35 TIME: .03 TIME LEFT: 3598.7 GRAD.: 3.138 HEAT: 38.92474
```


III. 計算の実行

- コンソール画面が出現している間にMOPACが実行される。
- MOPACの計算が終了するとコンソール画面は自動で閉じ、計算のログファイル (c3h6.out) がテキストエディタ上で開かれる。
- アーカイブファイル (c3h6.arc) もWinmostar上で自動的に読み込まれ、分子表示エリアに最適化構造が表示される。

The screenshot shows the Winmostar interface with a 3D ball-and-stick model of a C₃H₆ molecule. The terminal window displays the following text:

```
*****  
** [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  
  
Winmostar  
  
*****  
* MOPAC: VERSION 6.03 CALC'D. 25-Mar-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  
  
Winmostar  
  
ATOM CHEMICAL BOND LENGTH BOND ANGLE TWIST ANGLE  
NUMBER SYMBOL (ANGSTROMS) (DEGREES) (DEGREES)  
(I) NA: I NB:NA: I NC:NB:NA: I NA NB NC  
1行、1列 100% Windows (CRLF) UTF-8
```

IV. 出力ファイルの確認

入力ファイル (c3h6.dat) を保存したディレクトリ (デフォルトでは **C:¥winmos10¥UserData**) に次の3つのファイルが生成される。

- c3h6.arc :
アーカイブファイルで、出力結果の中の主なものが書かれている。
- c3h6.out :
出力結果の全てが書かれている。アーカイブファイルには書かれていない、軌道エネルギーや軌道係数、各原子の電荷などが出力されている。
- c3h6.mgf :
キーワード GRAPHを指定したことによって作成されたファイルであり、軌道の描画などに使う情報が収められている。

IV.出力ファイルの確認

- c3h6.outの主要な情報を以下に示す。

FINAL HEAT OF FORMATION =	6.57054	KCAL	MOPAC定義の生成熱(この値の足し引きで化学反応における生成熱や遷移エネルギーを求める)
TOTAL ENERGY =	-466.32794	EV	電子エネルギーと核間反発エネルギーの和
ELECTRONIC ENERGY =	-1385.43029	EV	電子エネルギー
CORE-CORE REPULSION =	919.10235	EV	核間反発エネルギー
IONIZATION POTENTIAL =	9.99175		イオン化ポテンシャル
NO. OF FILLED LEVELS =	9		HOMOの番号
MOLECULAR WEIGHT =	42.080		分子量

- MOPACにおける生成熱の定義は $\Delta H_f = E_{elec} + E_{nuc} - E_{isol} + E_{atom} + E_{bits}$ となっている。
 E_{elec} : 電子エネルギー、 E_{nuc} : 核間反発エネルギー、
 E_{isol} : 全原子から全価電子を取り除くために必要なエネルギー
 E_{atom} : 全原子の原子化エネルギー
 E_{bits} : 水素結合と分散力エネルギー
- この情報の後に、構造最適化後の結合距離、結合角、および2面体角が出力されている。

IV.出力ファイルの確認

- c3h6.outの軌道係数に関する部分を以下に示す。
- 「S C 1」、「PX C 1」はそれぞれ、1番目の炭素原子の2s軌道、2px軌道を意味する。

(直訳は固有ベクトルだが、ここでは軌道係数の意味)

分子軌道の番号 EIGENVECTORS

	ROOT NO.	1	2	3	4	5	6	
		-35.05995	-27.82884	-20.51727	-15.93105	-14.37302	-14.03943	軌道エネルギー(eV)
S	C	1	-.45078	.58589	-.22951	-.04450	.03291	-.00003
PX	C	1	-.12910	-.04001	.27269	.22975	-.40076	.00024
PY	C	1	.00767	.01792	.04421	-.16415	-.12751	.58288
PZ	C	1	-.01306	-.03046	-.07523	.27924	.21756	.34258
S	C	2	-.61083	-.07742	.47695	.06836	-.03274	.00002
PX	C	2	.02812	-.31347	.05643	-.23238	.42266	-.00024
PY	C	2	.05194	.08392	.12018	-.21328	-.13475	.29187
PZ	C	2	-.08836	-.14277	-.20443	.36277	.22956	.17140
S	H	3	-.14863	.24386	-.12957	-.19439	.03387	.44178
S	H	4	-.14862	.24387	-.12950	-.19470	.03320	-.44149

原子軌道 軌道係数

IV.出力ファイルの確認

- c3h6.outの各原子の電荷と系全体の双極子モーメントに関する部分を以下に示す。

NET ATOMIC CHARGES AND DIPOLE CONTRIBUTIONS

ATOM NO.	TYPE	CHARGE	ATOM	ELECTRON DENSITY
1	C	-.1894	4.1894	
2	C	-.1619	4.1619	
3	H	.0816	.9184	
4	H	.0816	.9184	
5	H	.0772	.9228	
6	C	-.2259	4.2259	
7	H	.1165	.8835	
8	H	.1100	.8900	
9	H	.1103	.8897	

DIPOLE POINT-CHG. X
HYBRID .027
SUM -.196

各原子のMulliken電荷

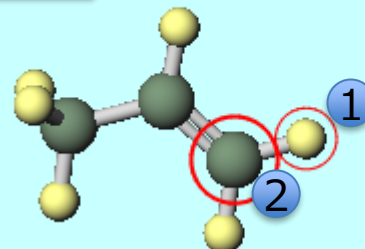
.006	-.010	.029
.061	-.103	.230

系全体の双極子モーメント(Debye)

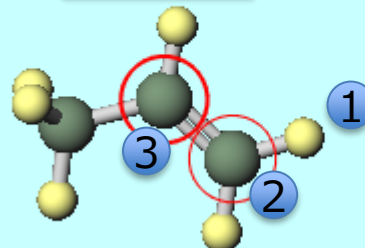
V. 最適化構造の確認

- 原子間距離は、2つの原子を続けてクリックすると Length(Å)に表示される。
- 結合角は、3つの原子を続けてクリックすると Angle(degree)に表示される。
- 二面角は、4つの原子を続けてクリックすると Dihedral(degree)に表示される。

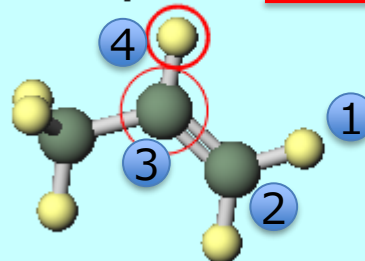
Marked Order: 6 - 9 - 7 - 2
Marked Atom: X= 2.2257 Y= -0.5616 Z= 0.9459
Length= 1.0975 Angle= 58.16 Dihedral= 0.017 Lper= 0.000




Marked Order: 2 - 6 - 9 - 7
Marked Atom: X= 1.4764 Y= 0 Z= 0
Length= 1.331 Angle= 122.285 Dihedral= -0.014 Lper= 0.001

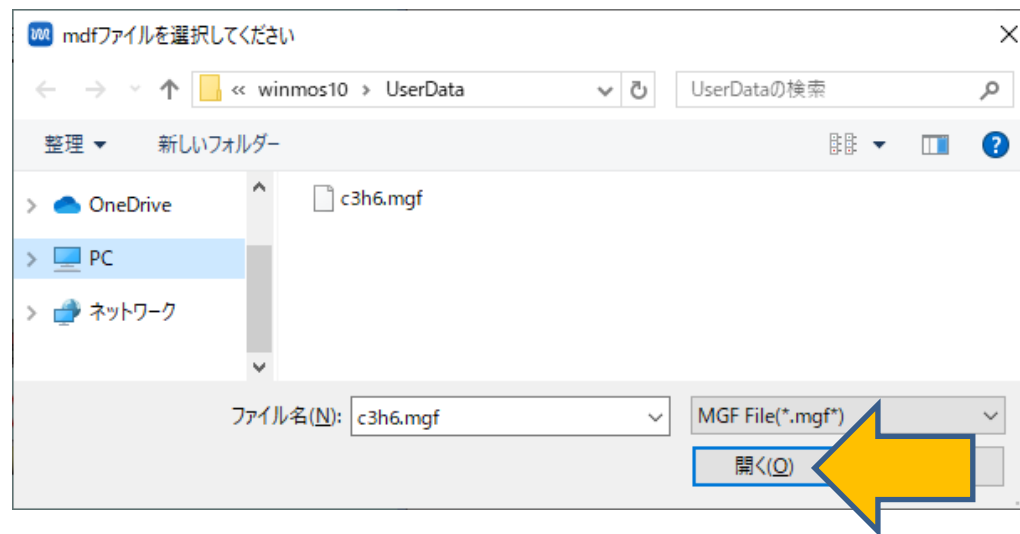
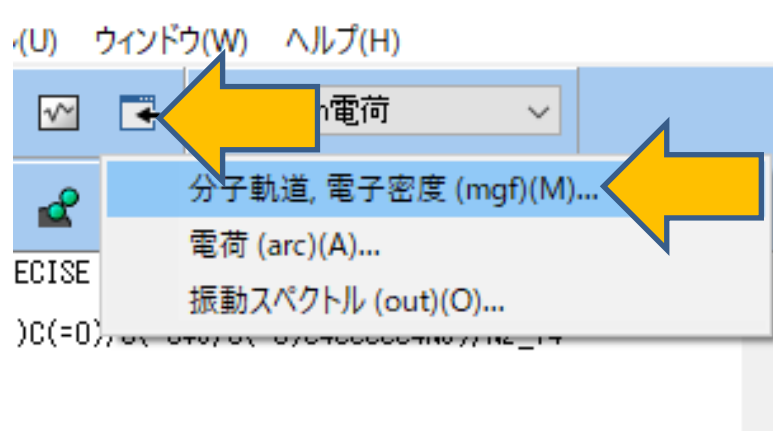


Marked Order: 7 - 2 - 6 - 9
Marked Atom: X= 1.9404 Y= 0.5108 Z= -0.861
Length= 1.1034 Angle= 120.871 Dihedral= 0.031 Lper= 0.001



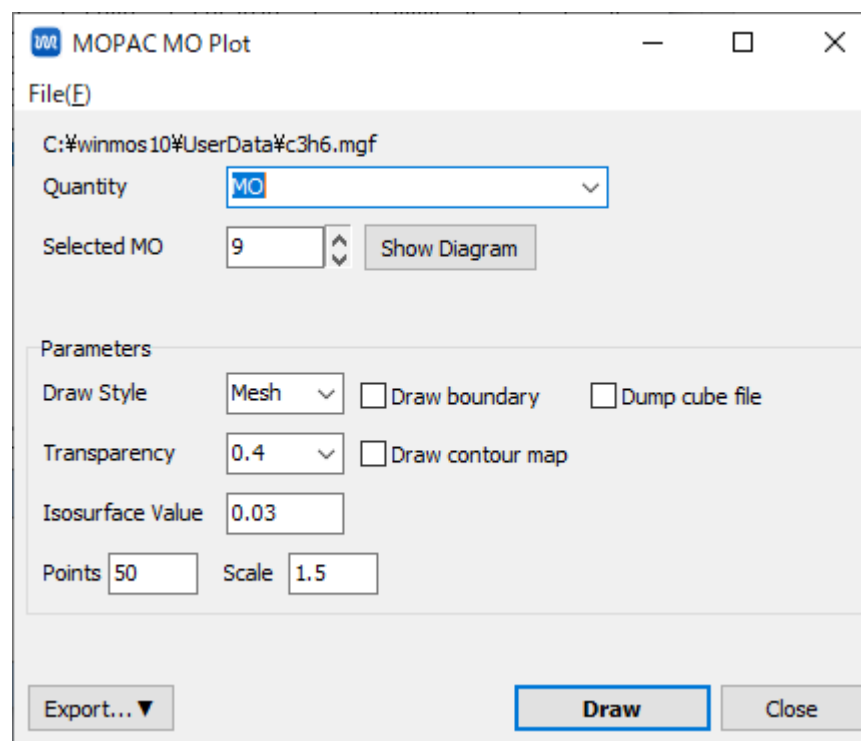
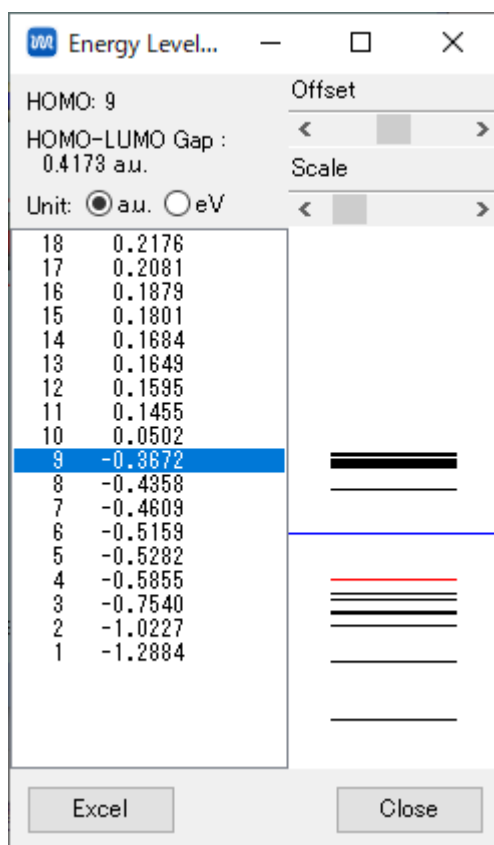
VI. 分子軌道の表示

1. メインウィンドウ上部の  (結果解析) ボタンをクリックし、分子軌道、電子密度 (mgf) をクリックする。
2. ファイルを選択するダイアログが「mdfファイルを選択してください」というメッセージとともに開くので、デフォルトで選ばれるc3h6.mgfを開く。



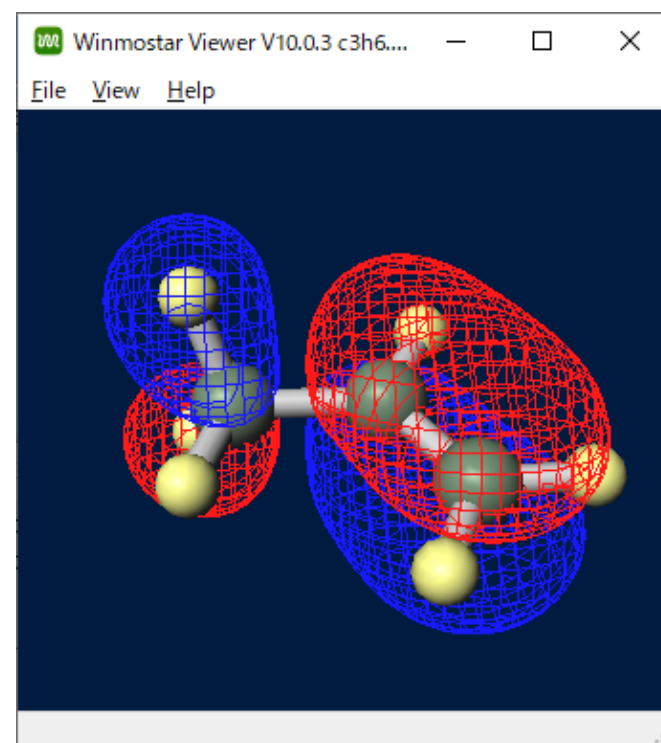
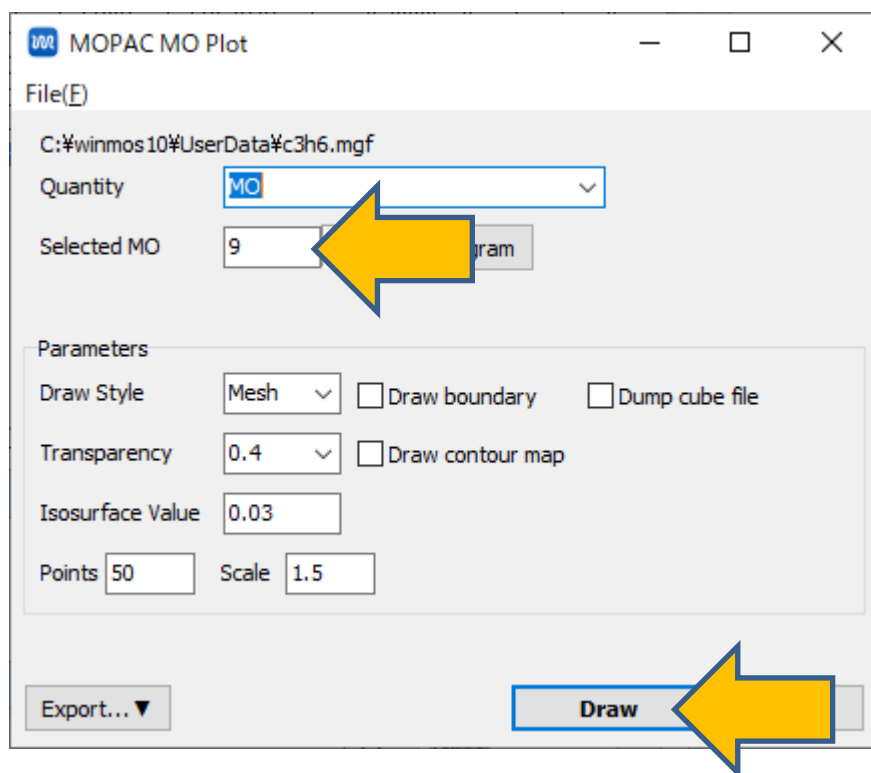
VI. 分子軌道の表示

1. Energy Level DiagramおよびMOPAC MO Plot ウィンドウが開く。
2. Energy Level DiagramウィンドウにはHOMOが9番目の軌道であること、HOMO-LUMOギャップが0.4173 a.u.であることや、各分子軌道の準位が表示される。



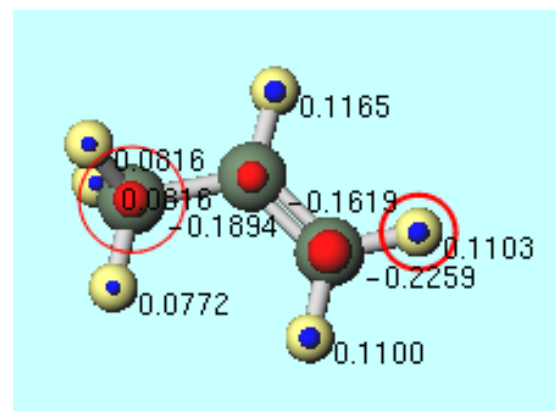
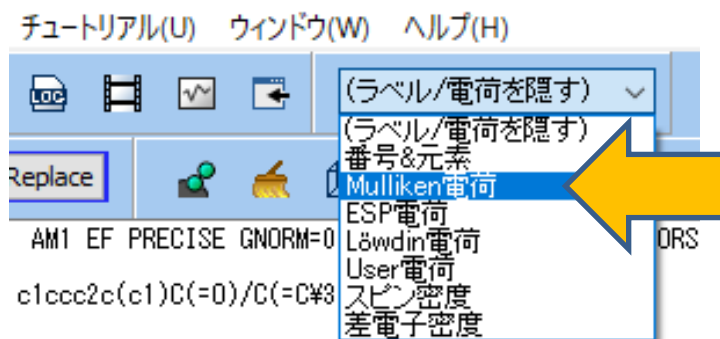
VI. 分子軌道の表示

1. 表示したい分子軌道の番号をSelected MOに入力する。デフォルトではHOMOが選択されている。
2. **MOPAC MO Plot**ウインドウ右下の**Draw**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動し、**Energy Level Diagram**で選択された分子軌道が表示される。



VII. Mulliken電荷の表示

1. メインウィンドウ上部のラベル/電荷プルダウンメニューでMulliken電荷を選択すると、分子表示エリアに、正電荷が青、負電荷が赤で表示される。



VIII.IRスペクトル計算

1. (キーワード設定ボタン)をクリックする。
2. MOPAC Setupウィンドウで、**Easy Setup**をクリックする。
3. MethodをIRに変更して、**OK**をクリックする。
4. SetupウィンドウでRunをクリックするとMOPACの入力ファイルを入力するウィンドウが表示されるので、「c3h6_ir」と入力し（拡張子は自動で現在選択されているものが補われる）、**保存**ボタンを押すと、計算が開始され黒いコンソールウィンドウが数秒間出現する。

The image displays the MOPAC software interface. On the left, a menu bar includes 'QM', 'MD', '固体(S)', 'アドオン(A)', 'ツール(T)', and 'チュートリアル'. Below it, a dropdown menu shows 'MOPAC' with a checkmark icon. A list of keywords includes '-CH3', '-C2H3', '-C6H5', and '-CH3', with a 'Replace' button. A console window shows '2 M= 262.27' and '14'. The main 'MOPAC Setup' window has 'Easy Setup' selected. The 'Method' is set to 'IR'. The 'Easy Setup' dialog box is open, showing 'Hamiltonian' as 'AM1', 'UHF' as unchecked, 'Charge' as a dropdown, 'Multiplicity' as a dropdown, 'Method' as 'IR', 'Scan' as unchecked, 'Bond' as '9-1-2-5', 'Nstep' as '10', and 'Step' as '-0.05'. The 'OK' button is highlighted. A yellow arrow points to the 'Easy Setup' button in the MOPAC Setup window, and another yellow arrow points to the 'OK' button in the Easy Setup dialog box.

VIII.IRスペクトル計算

1. C3h6_ir.outの主要な情報を以下に示す。

HEAT OF FORMATION = 6.570540 KCALS/MOLE


ZERO POINT ENERGY 50.175 KILOCALORIES PER MOLE 零点振動エネルギー(kcal/mol)

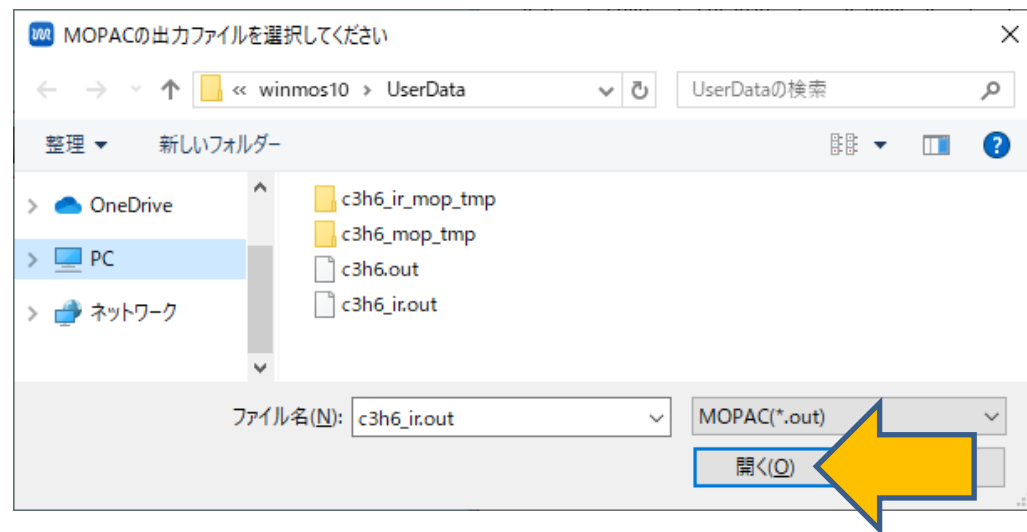
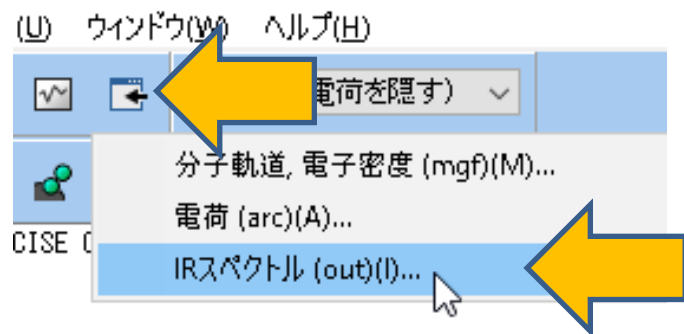
THE LAST 6 VIBRATIONS ARE THE TRANSLATION AND ROTATION MODES
THE FIRST THREE OF THESE BEING TRANSLATIONS IN X, Y, AND Z, RESPE

NORMAL COORDINATE ANALYSIS


ROOT NO.	1	2	3	4	5	
	107.70248	446.45168	569.56966	931.96389	965.92920	振動エネルギー(cm ⁻¹)
1	-.00003	-.05494	.00002	-.00003	.03098	
2	-.00632	.03747	.01318	.03383	.02078	
3	-.00375	-.06373	.00777	.01986	-.03535	
4	-.00003	-.05958	.00001	.00001	-.00523	
5	.05678	-.05730	-.07680	.04515	.00581	
6	.03345	.09733	-.04518	.02655	-.00984	
7	-.05550	.04206	.17732	-.22194	-.12137	振動モード
8	-.02790	.07610	.08480	-.05936	-.04251	
9	-.42155	-.13508	.03524	-.03127	.08104	
10	.05550	.04215	-.17719	.22154	-.12175	
11	-.38208	.08154	.07199	-.05619	-.05017	
12	.17993	-.13238	.05702	-.03662	.07655	

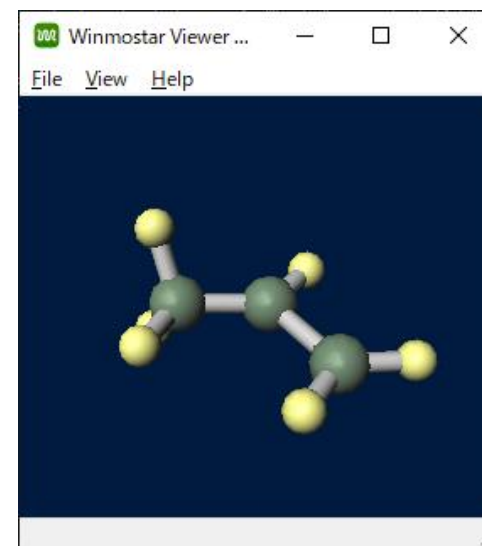
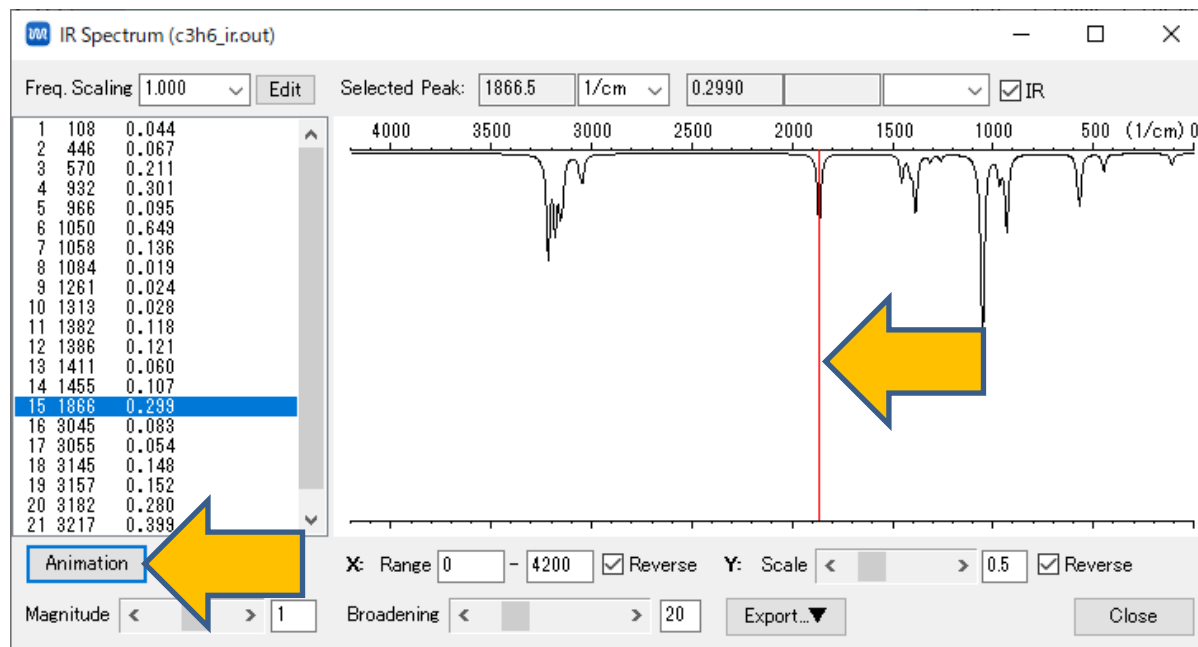
VIII.IRスペクトル計算

1. メインウィンドウ上部の  (結果解析) ボタンをクリックし、**IRスペクトル**をクリックする。
2. 「MOPACの出力ファイルを選択してください」というダイアログが開くので、デフォルトで選ばれる**c3h6_ir.out**を開く。



VIII.IRスペクトル計算

1. メインウィンドウ上部の  (結果解析) ボタンをクリックし、**振動スペクトル**をクリックする。
2. 「MOPACの出力ファイルを選択してください」というダイアログが開くので、デフォルトで選ばれる**c3h6_ir.out**を開く。
3. **IR Spectrum**ウィンドウ上で 1850cm^{-1} 付近をクリックすると、赤線でピークが選択される。
4. **Animation**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動し、この振動の原子の動き(C=Cの伸縮モード)が動画で確認できる。



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