

Winmostar™ チュートリアル

CNDO/S

基礎編

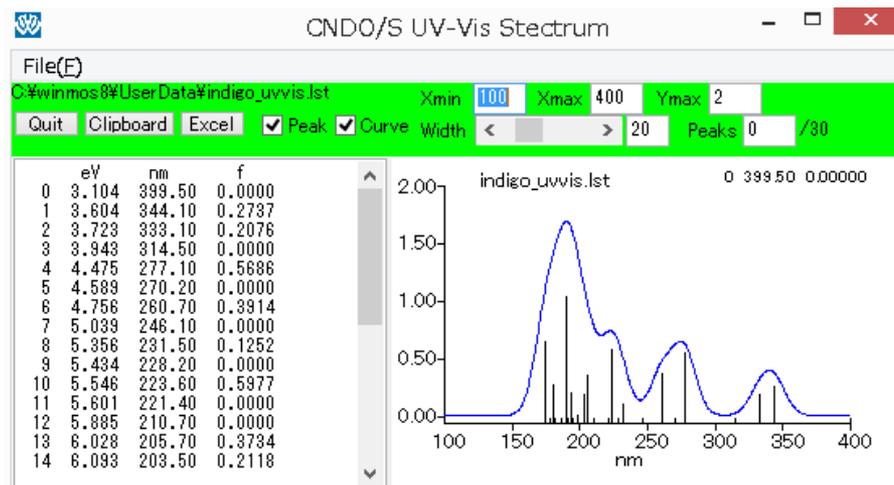
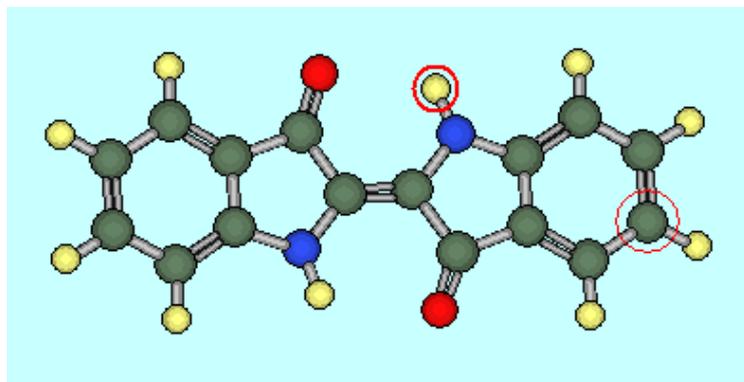
V8.023

株式会社クロスアビリティ

2018/07/02

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。

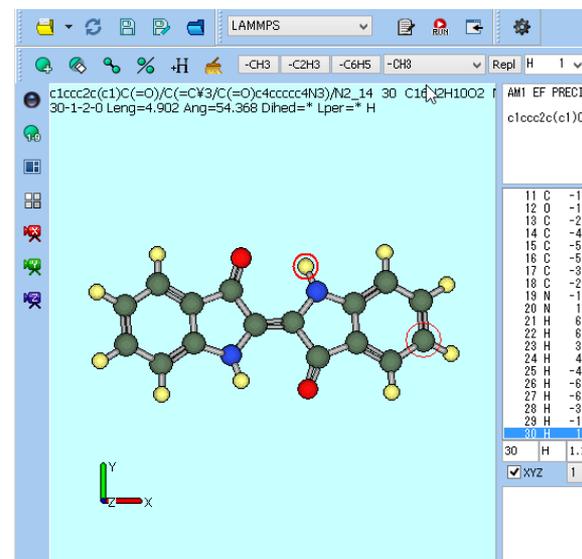
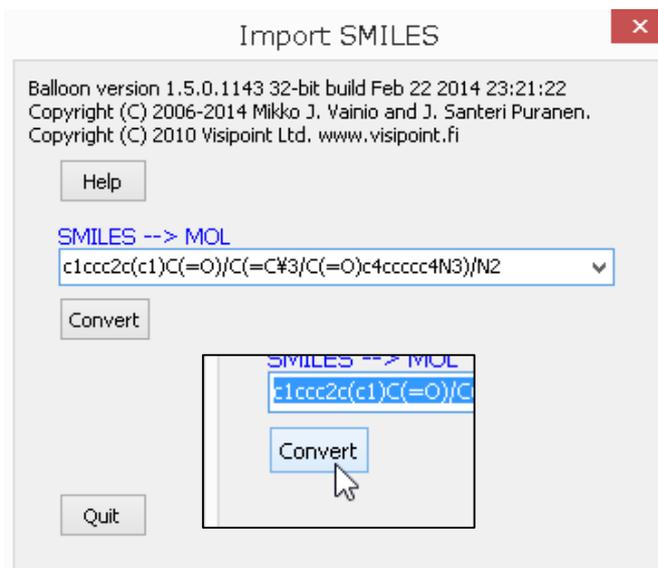


I. モデルの作成

Winmostarを起動し、インディゴ分子を作成する。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、[Convert]ボタンをクリックする。

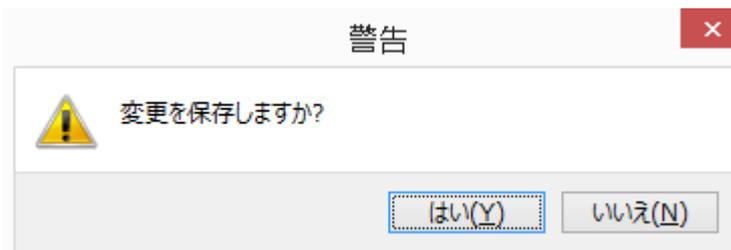
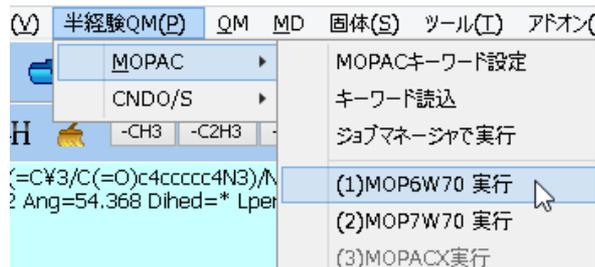
c1ccc2c(c1)C(=O)/C(=C#3/C(=O)c4ccccc4N3)/N2

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出現したら[Import SMILES]ウインドウは閉じる。



II. MOPACによる構造最適化計算の実行

[半経験QM]-[MOPAC]-[(1)MOP6W70実行]をクリックする。「変更を保存しますか？」と尋ねられたら[はい]をクリックし、ファイル名を入力(仮に「indigo.dat」とする)して保存すると黒いウィンドウが出現し計算が開始する。数秒後に計算が終了しログファイルが開く。メインウィンドウには、構造最適化後の構造が自動で読み込まれる。



```

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: 43.82854
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.: 53.850 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: 39.04087
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: 38.96655
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

```

```

*****
** [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

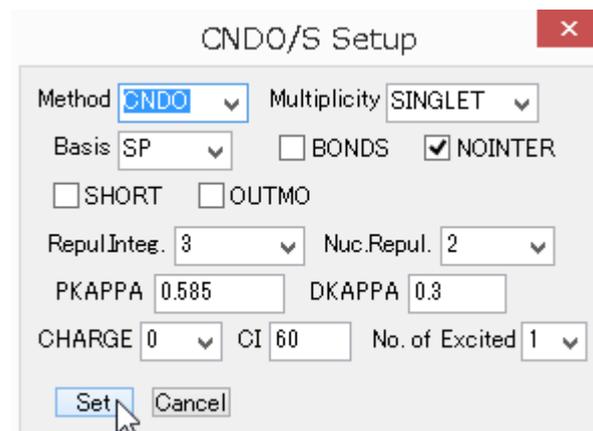
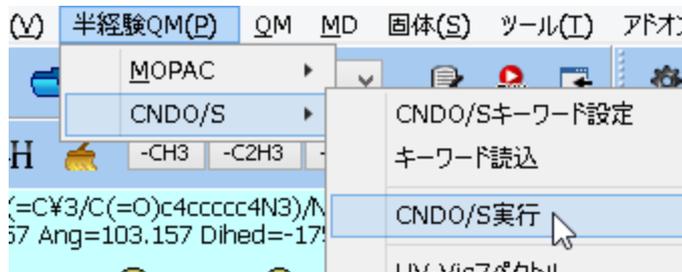
c1ccc2c(c1)C(=O)/C(=C)C3/C(=O)c4cccc4N3)/N2_14

*****
* MOPAC: VERSION 6.03 CALC'D. 30-Jun-18
* 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

```

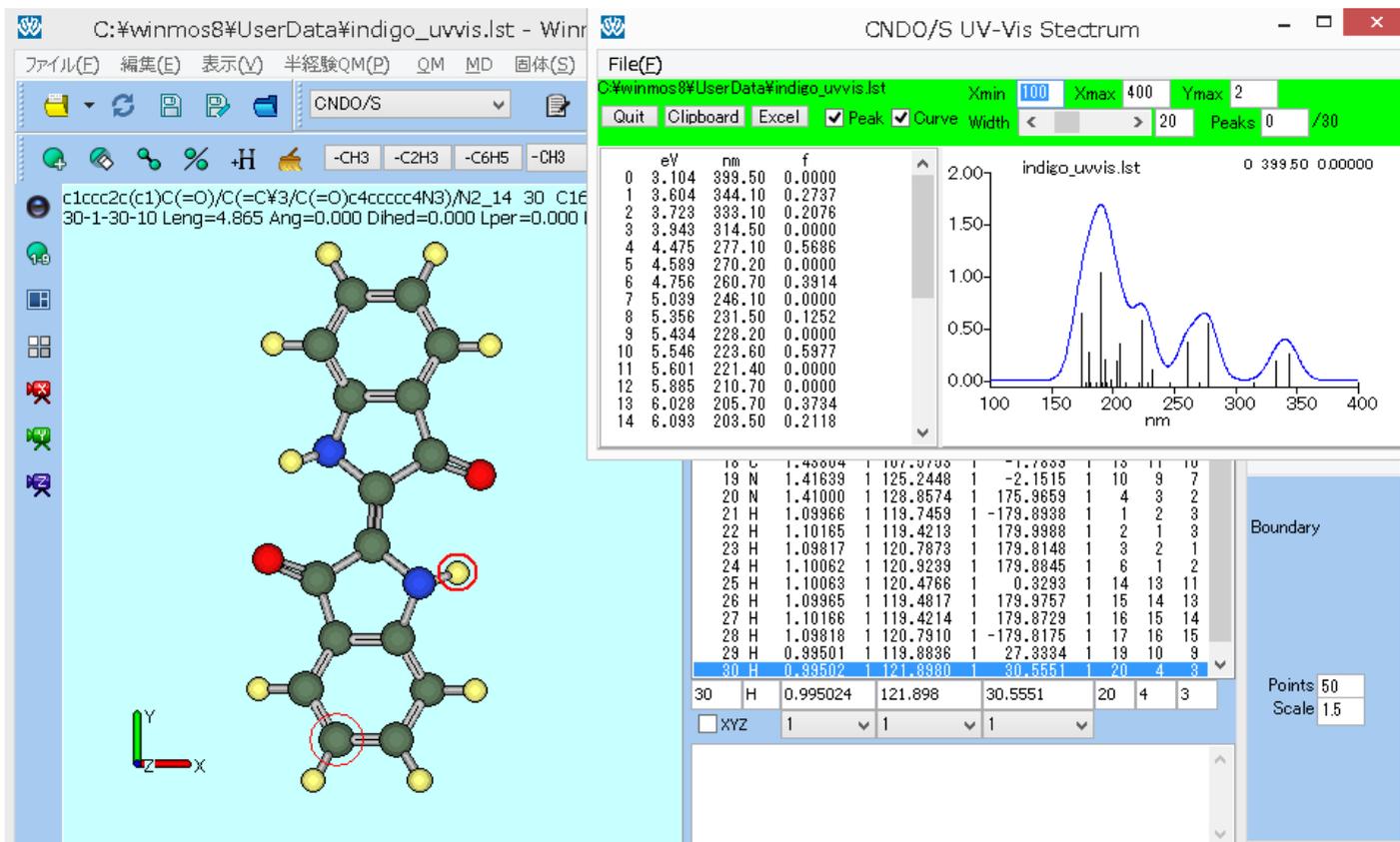
III. CNDO/SによるUV-Vis計算

[半経験QM]-[CNDO/S]-[CNDO/S実行]をクリックし、[CNDO/S Setup]ウィンドウでは特に設定を変更せず[Set]ボタンをクリックする。「変更を保存しますか?」と尋ねられたら[はい]をクリックし、ファイル名を入力して(仮に「indigo_uvvis.cnd」とする)保存したら計算が開始する。



IV. UV-Visスペクトルの表示

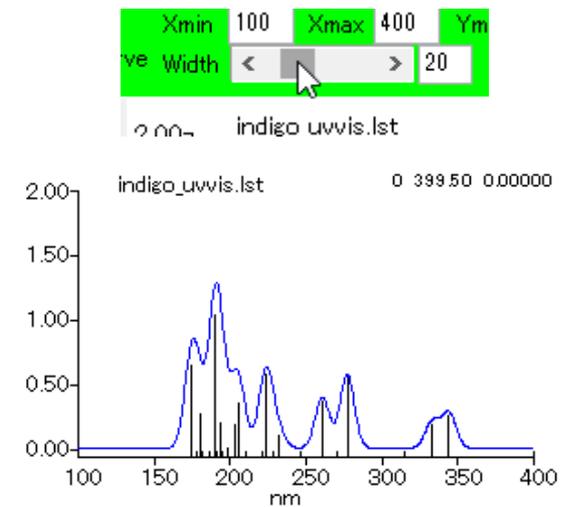
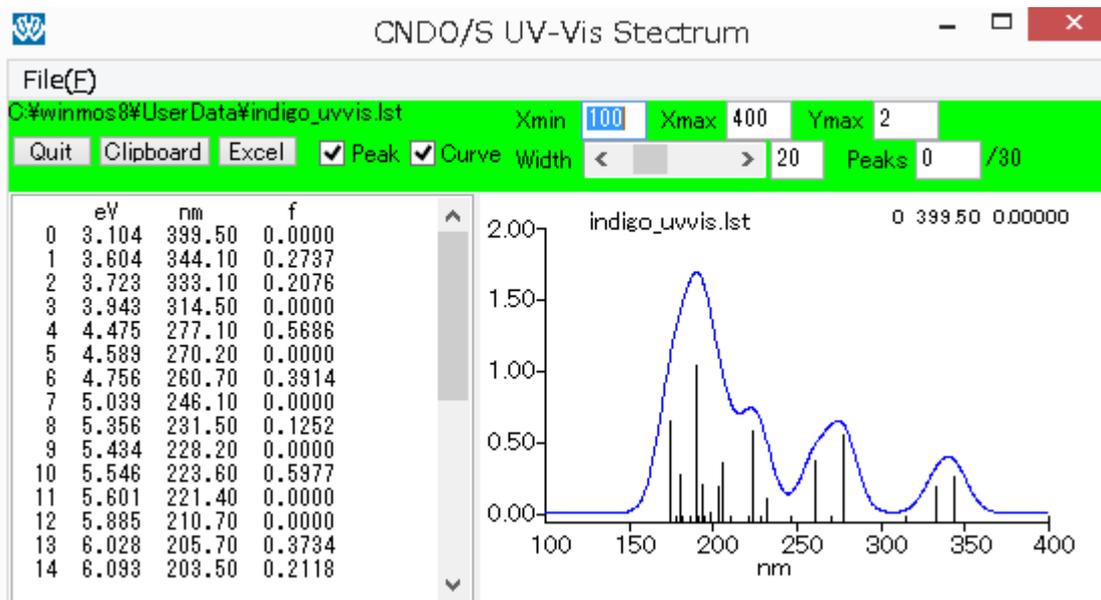
CNDO/S計算の実行後、自動で[CNDO/S UV-Vis Spectrum]ウィンドウなどが表示される。



IV. UV-Visスペクトルの表示

[CNDO/S UV-Vis Spectrum]ウインドウ左に、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)が列挙される。色素で重要な最大吸収波長は、波長だけから判断すると399.50 nmのピークであるが、このピークはfが非常に小さいため、fがそこそ大きい344.10 nmのピークが、実験で観測される最大吸収波長に相当すると予想される。

また、[Width]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が変化する。



👍 いいね!