

Winmostar™ チュートリアル

MOPAC

基礎編

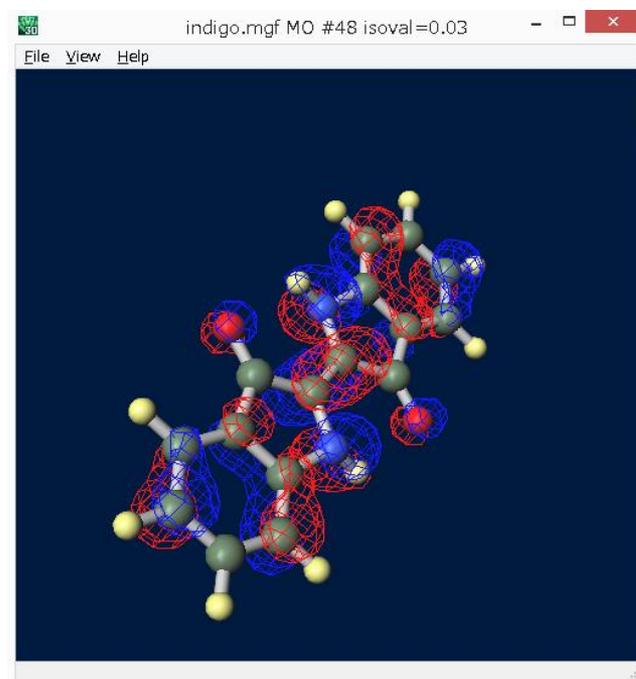
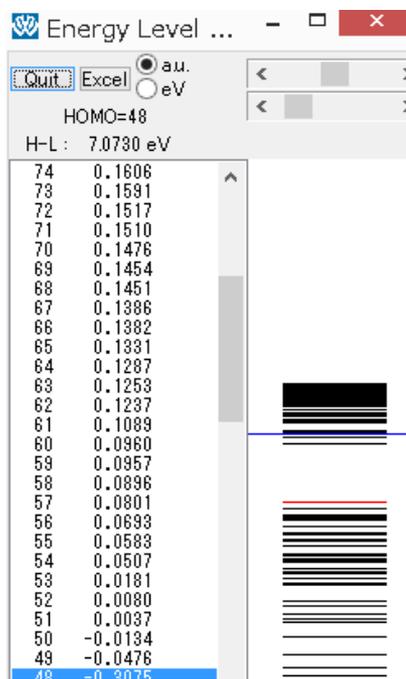
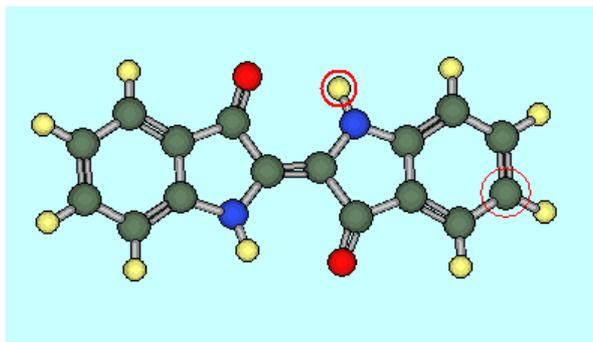
V8.023

株式会社クロスアビリティ

2018/07/02

概要

インディゴ分子の半経験的量子化学計算をMOPACを用いて実行します。
実行後に、分子軌道のエネルギーと形状を確認します。

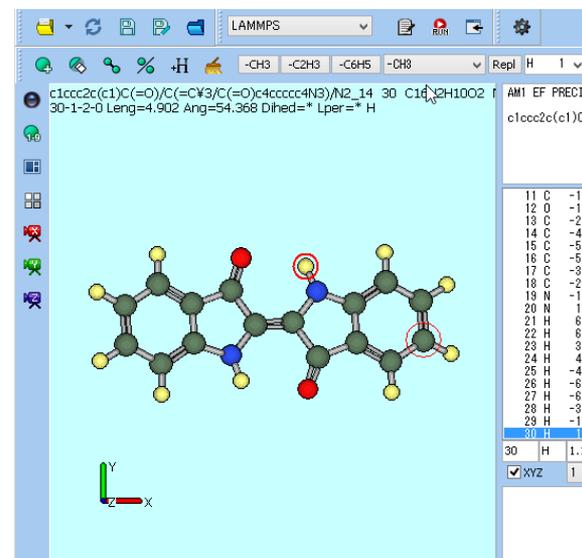


I. モデルの作成

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

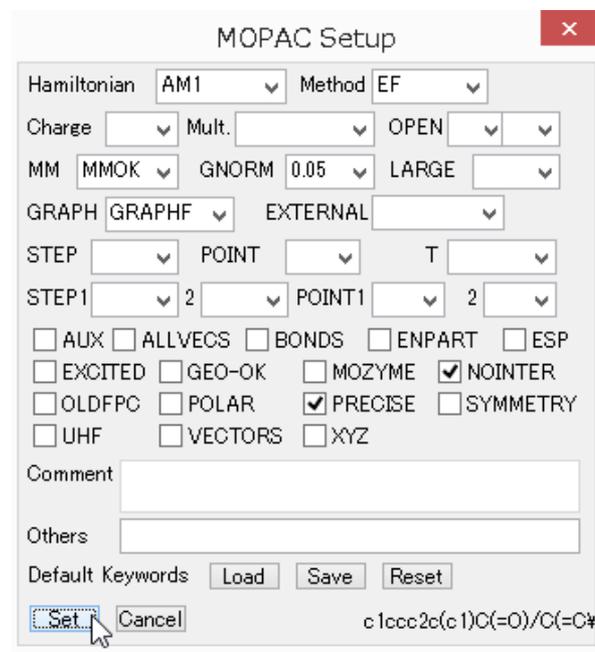
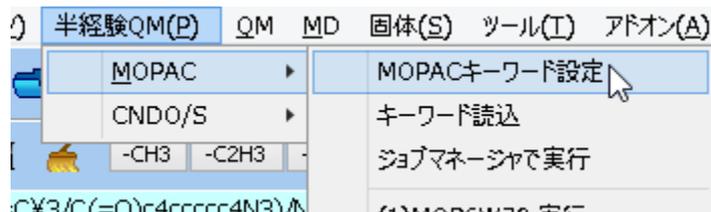
黒い画面が出現し数秒後にメインウインドウにインディゴ分子が出現したら[Import SMILES]ウインドウは閉じる。



II. キーワード設定

(この操作は今回の計算では省略可能である)

[半経験QM]-[MOPAC]-[MOPACキーワード設定]をクリックすると [MOPAC Setup] ウィンドウが出現する。各キーワードにカーソルを合わせると説明が表示される。今回はキーワードを特に変更せずに左下の[Set]ボタンをクリックする。



II. キーワード設定

メインウインドウ右上に、MOPAC計算のキーワードが記入されているのを確認する。
各キーワードの意味は以下の通り。

```
1002 AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
      c1ccc2c(c1)C(=O)/C(=C#3/C(=O)c4ccccc4N3)/N2_14
      11 C   -1.5199  1   1.1805  1  -0.0075  1
      12 O   -1.1854  1   2.3330  1  -0.1588  1
```

- AM1 : ハミルトニアンはAM1にする
- EF : 構造最適化にEF法を使う
- PRECISE : 構造最適化の際の閾値を低くする(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

II. キーワード設定

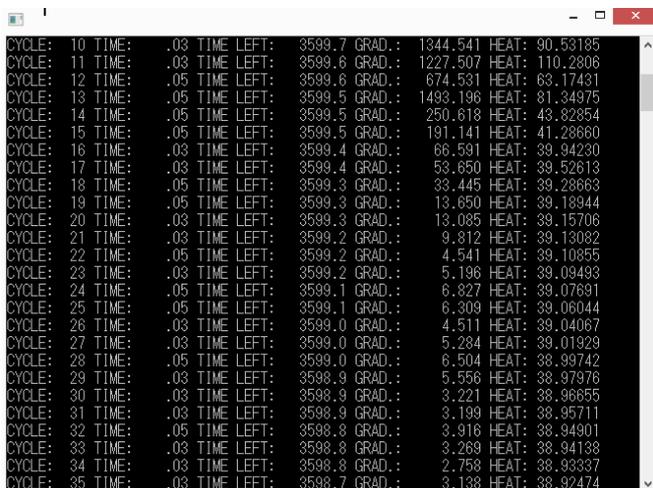
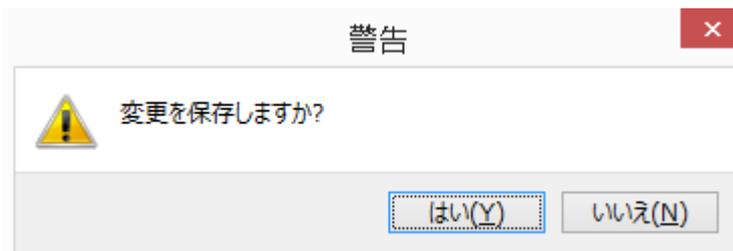
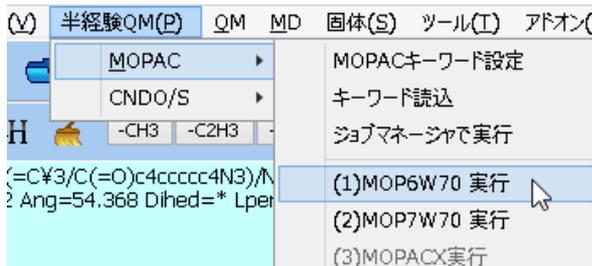
メインウインドウ右中央に、インディゴ分子の座標がZ-Matrix形式で表示されているのを確認する。

1	C	5.2564	1	-0.6067	1	-0.4061	1
2	C	5.1776	1	0.7982	1	-0.4924	1
3	C	3.9465	1	1.4625	1	-0.4136	1
4	C	2.8073	1	0.7009	1	-0.2744	1
5	C	2.9071	1	-0.6947	1	-0.1622	1
6	C	4.1053	1	-1.3762	1	-0.2326	1
7	C	1.5358	1	-1.2038	1	0.0298	1
8	O	1.1942	1	-2.3605	1	0.1746	1
9	C	0.6668	1	0.0312	1	0.0029	1
10	C	-0.6639	1	-0.0636	1	0.0307	1
11	C	-1.5199	1	1.1805	1	-0.0075	1
12	O	-1.1654	1	2.3330	1	-0.1586	1
13	C	-2.8973	1	0.6867	1	0.1702	1
14	C	-4.0874	1	1.3842	1	0.2177	1
15	C	-5.2504	1	0.6305	1	0.3751	1
16	C	-5.1903	1	-0.7746	1	0.4710	1
17	C	-3.9658	1	-1.4554	1	0.4169	1
18	C	-2.8140	1	-0.7096	1	0.2896	1
19	N	-1.5067	1	-1.1523	1	0.1262	1
20	N	1.4983	1	1.1292	1	-0.0928	1
21	H	6.2270	1	-1.0937	1	-0.4646	1
22	H	6.0899	1	1.3787	1	-0.6115	1
23	H	3.8981	1	2.5452	1	-0.4570	1
24	H	4.1453	1	-2.4563	1	-0.1498	1
25	H	-4.1123	1	2.4643	1	0.1280	1
26	H	-6.2152	1	1.1307	1	0.4134	1
27	H	-6.1130	1	-1.3415	1	0.5780	1
28	H	-3.9342	1	-2.5383	1	0.4686	1
29	H	-1.1438	1	-2.0576	1	0.3995	1
30	H	1.1239	1	2.0293	1	-0.3694	1

30	H	1.1239	2.0293	-0.3694
<input checked="" type="checkbox"/>	XYZ	1	1	1

III. 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(indigo.out)が開く。



IV. 出力ファイルの確認

indigo.datを保存したディレクトリに次の3つのファイルが生成される。

indigo.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。

indigo.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、軌道エネルギーや各軌道の電子占有数などが出力されている。

今回の計算条件では出力されないが、各軌道エネルギー、各軌道電子占有数の帰属先を知るための軌道係数も出力される。

indigo.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

indigo.arcの中身は以下に示す。

HEAT OF FORMATION	=	39.038467 KCAL	生成(MOPAC特有の出力値)
ELECTRONIC ENERGY	=	-20003.719751 EV	電子エネルギー
CORE-CORE REPULSION	=	16765.256981 EV	これと電子エネルギーとの合計が総エネルギーに相当
DIPOLE	=	1.63624 DEBYE	双極子モーメント
NO. OF FILLED LEVELS	=	48	HOMOの番号
IONIZATION POTENTIAL	=	8.321671 EV	イオン化ポテンシャル
MOLECULAR WEIGHT	=	262.267	分子量
SCF CALCULATIONS	=	75	収束までに要した反復回数
COMPUTATION TIME	=	2.172 SECONDS	全部の処理が終わるまでにかかった時間

「FINAL GEOMETRY OBTAINED」の下に、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。

また、右端のCHARGE欄には各原子の正味の電荷(net charge)が出力されている。

V. 分子軌道の描画

[半経験QM]-[MOPAC]-[インポート]-[MO(mgf)]をクリックし、デフォルトで選択される indigo.mgfを開く。[Energy Level Diagram]ウインドウと[Mopac MO Plot]ウインドウが表示される。[Energy Level Diagram]には計算された各分子軌道のエネルギーが表示されている。

The screenshot shows the software interface with the 'Import' menu open, highlighting 'MO(mgf)'. Below are two windows:

Energy Level Diagram

MO Index	Energy (eV)
74	0.1606
73	0.1591
72	0.1517
71	0.1510
70	0.1476
69	0.1454
68	0.1451
67	0.1386
66	0.1382
65	0.1331
64	0.1287
63	0.1253
62	0.1237
61	0.1089
60	0.0960
59	0.0957
58	0.0896
57	0.0801
56	0.0633
55	0.0583
54	0.0507
53	0.0181
52	0.0080
51	0.0037
50	-0.0134
49	-0.0476
48	-0.3075

Mopac MO Plot

File(E)
C:\winmos8\UserData\indigo.mgf

Save Cube Boundary

Mesh Contour Map

Trans 0.4

MO

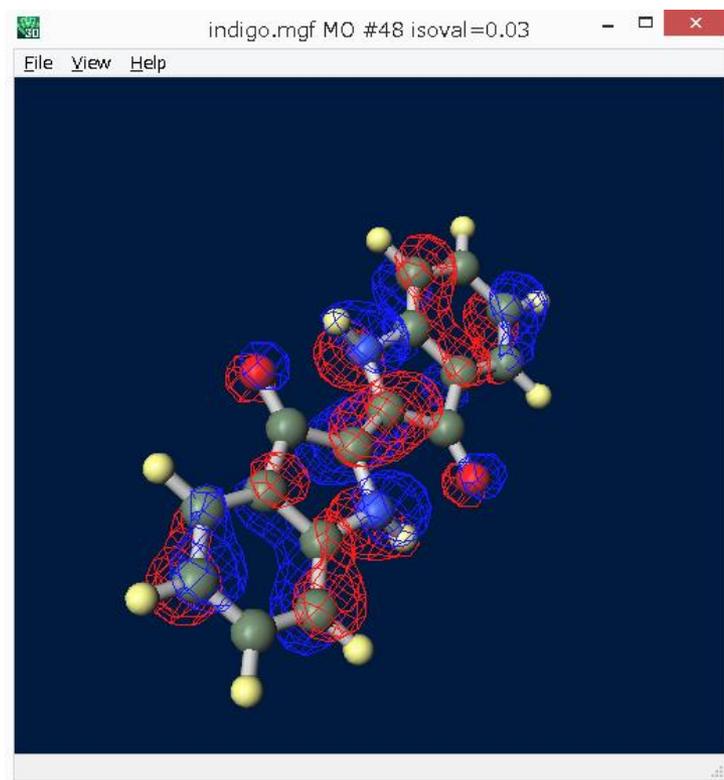
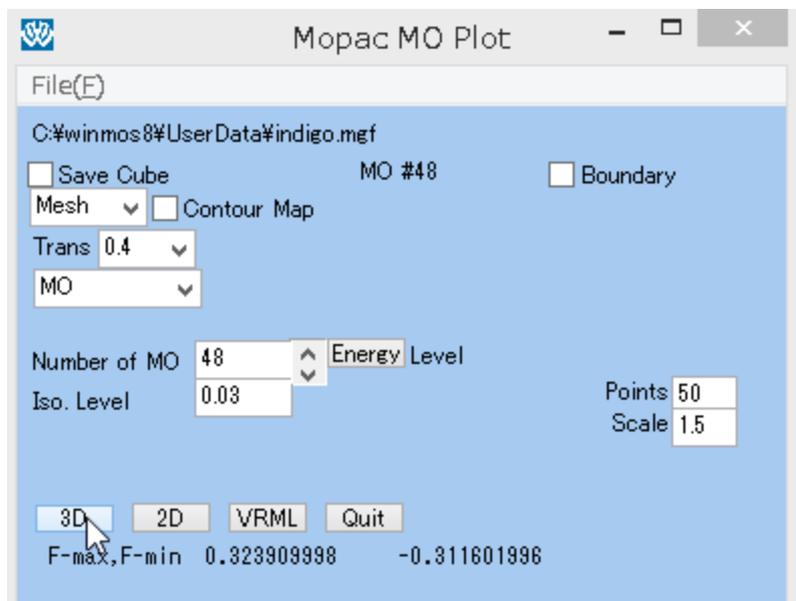
Number of MO 48 Energy Level

Iso. Level 0.03 Points 50 Scale 1.5

3D 2D VRML Quit

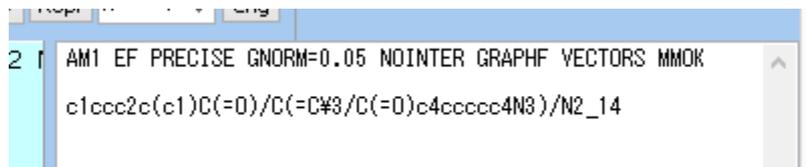
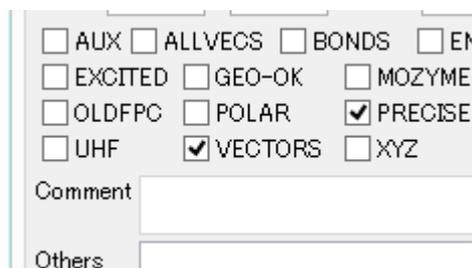
V. 分子軌道の描画

表示したい分子軌道を[Energy Level Diagram]で選択する。デフォルトではHOMOが選択されている。その後、[Mopac MO Plot]ウインドウで左下の[3D]ボタンをクリックすると、Winmostar 3Dが起動し、[Energy Level Diagram]で選択された分子軌道が表示される。



補足 軌道係数の出力

[MOPAC Setup]ウィンドウで[VECTORS]にチェックを入れ[Set]ボタンを押すと、キーワードにVECTORSが追加される。計算後のoutファイルの一部を下に示す。



EIGENVECTORS (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

ROOT NO.	1	2	3	4	5	6	軌道エネルギー(eV)
	-42.00306	-41.12779	-38.84993	-38.78648	-37.44630	-36.78071	

原子軌道

各係数

S C 1	.25674	-.29860	.13982	-.17900	-.05066	.09363
PX C 1	.03183	-.00875	-.00760	.05771	-.12443	.15928
PY C 1	-.04552	.04267	.01787	-.01569	.01279	-.03039
PZ C 1	-.00059	-.00107	-.00052	-.00270	.00591	-.00661

「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。

facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

👍 いいね!