

Winmostar™ チュートリアル

CNDO/S

基礎編

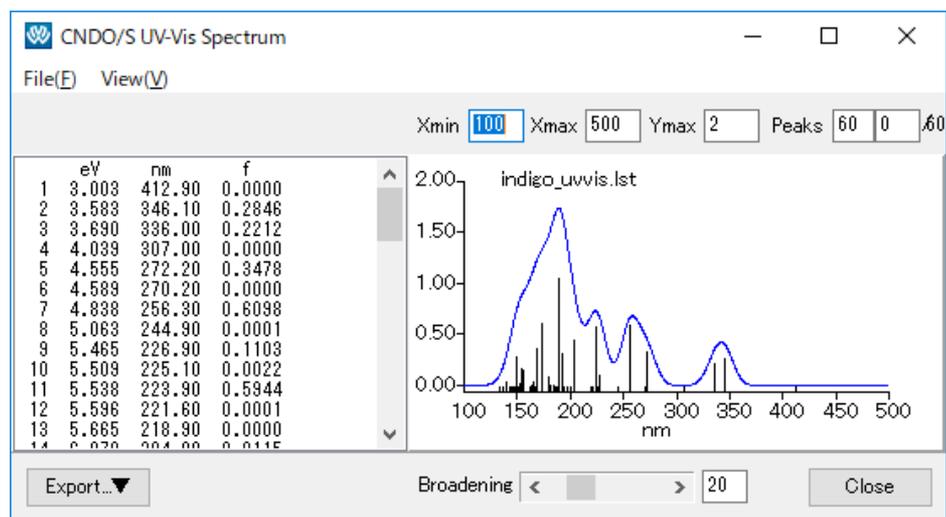
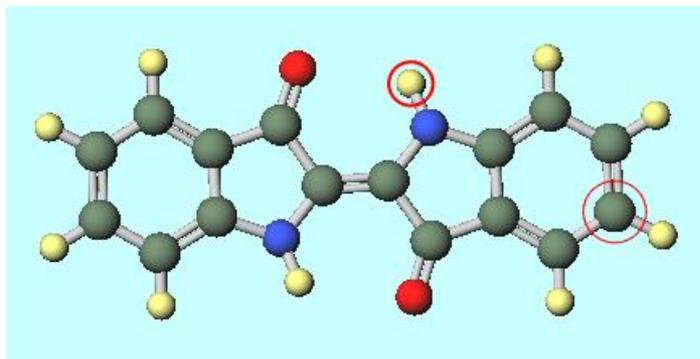
V9.0.0

株式会社クロスアビリティ

2019年1月15日

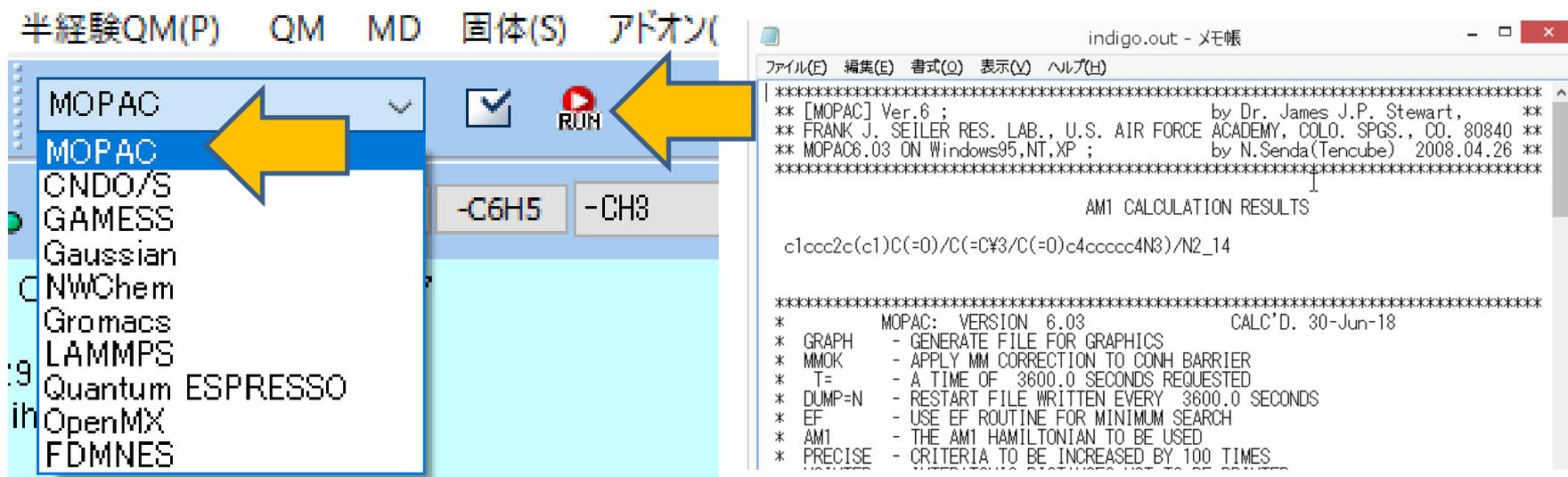
概要

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。



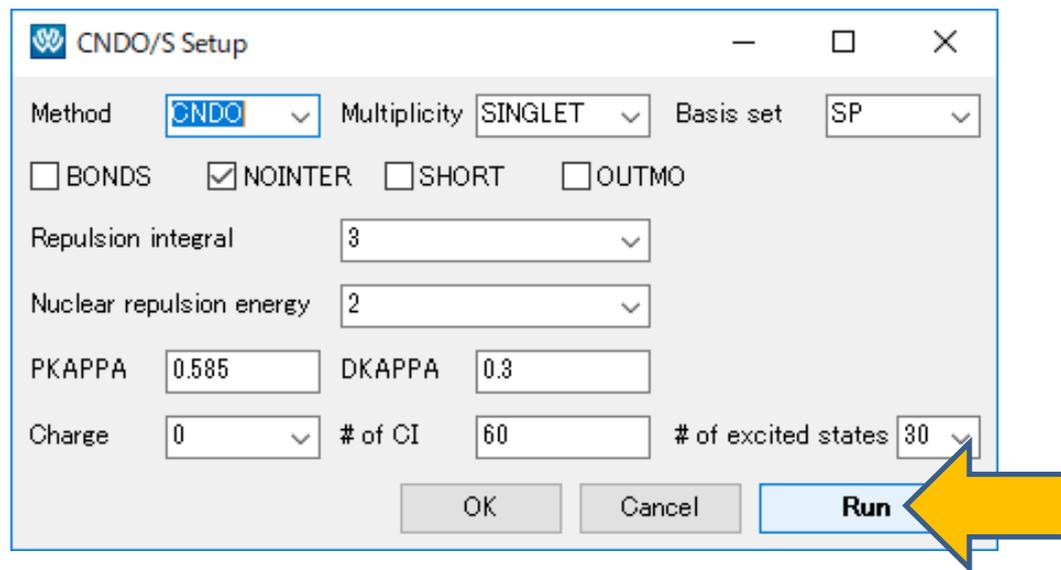
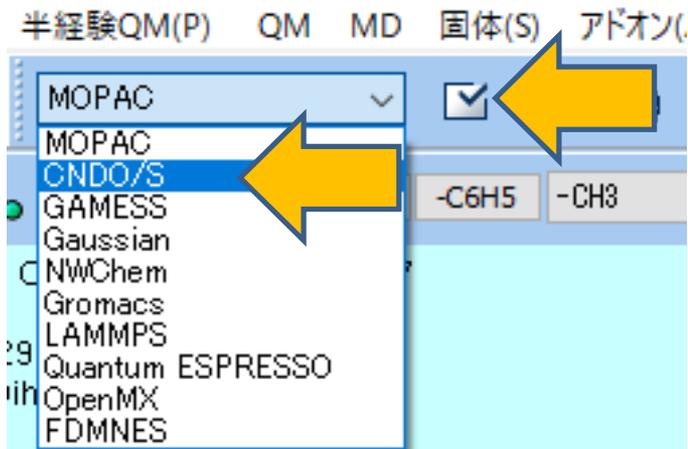
II. MOPACによる構造最適化計算の実行

1. ソルバー一覧から **MOPAC**を選択し、 (実行ボタン)をクリックする。
2. ファイル名に**indigo.dat**と入力して保存する。
3. 数秒後に計算が終了しログファイルが開く。
このとき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。

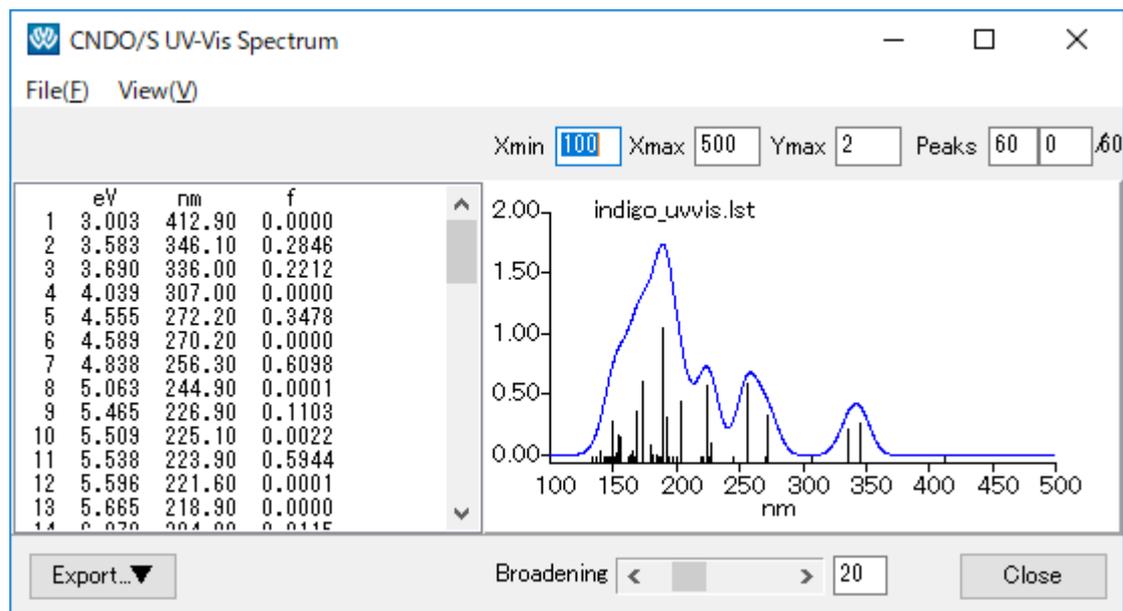


III. CNDO/SによるUV-Vis計算

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。

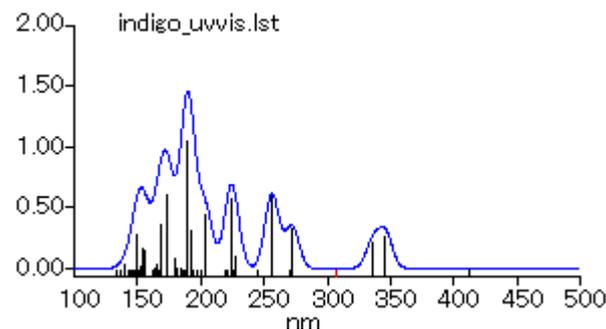
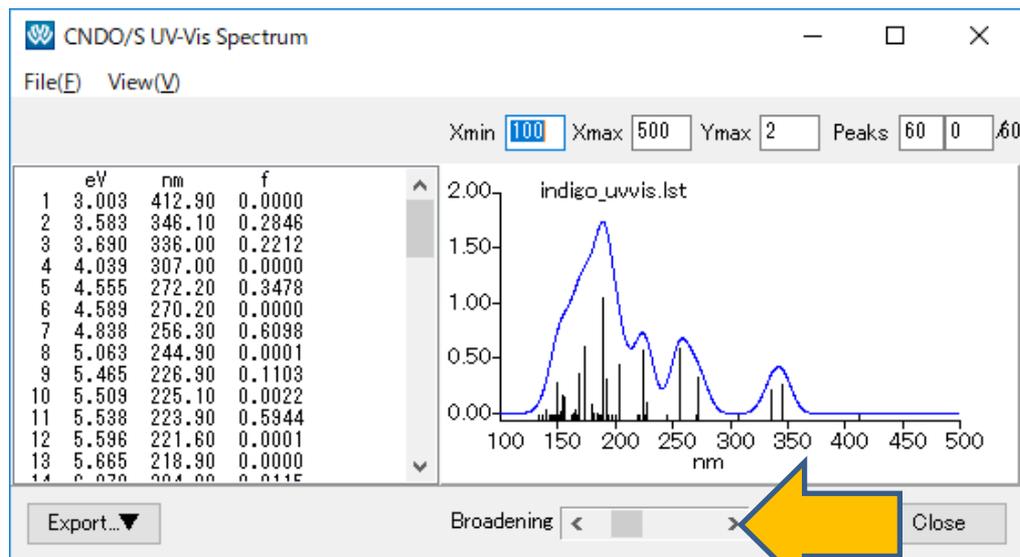


IV. UV-Visスペクトルの表示



IV. UV-Visスペクトルの表示

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。
 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を変更できる。



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 の値が非常に小さいため、よりfの値が大きい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。

<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友

アカウント登録 ログイン

X-Ability
クロスアビリティ

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! 138件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ユーザー投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30 · 公開

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_au_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 · 公開