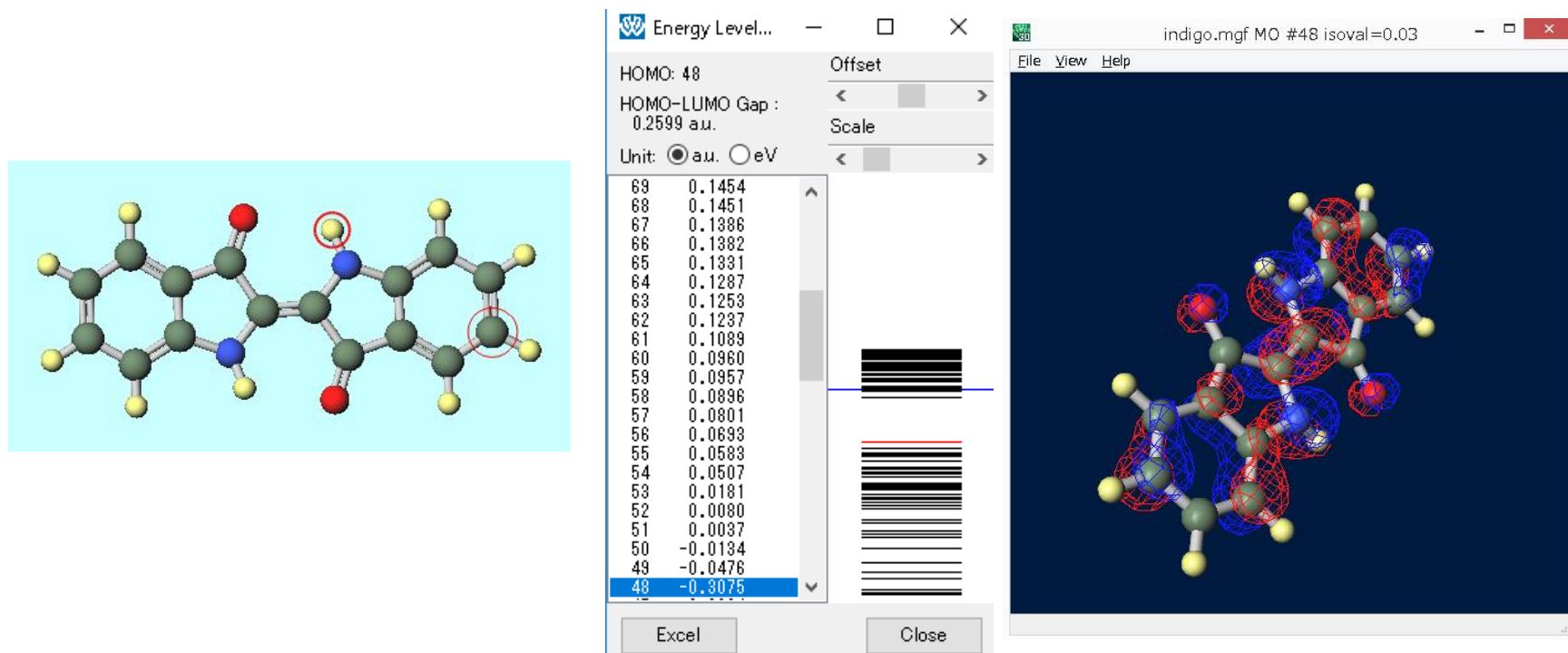


Winmostar™ チュートリアル  
MOPAC  
基礎編  
V9.0.0

株式会社クロスアビリティ  
2019月1日15日

# 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。

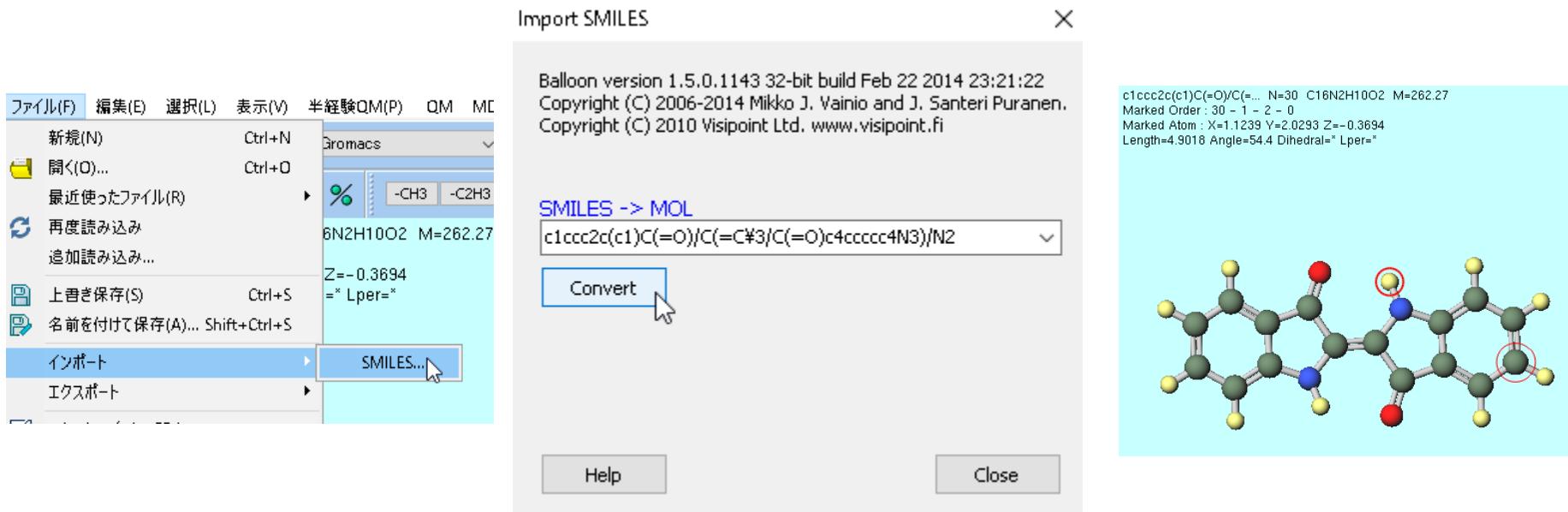


# I. モデルの作成

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)c4cccc4N3)/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する。  
その後[Close]ボタンを押して[Import SMILES]ウインドウを閉じる。



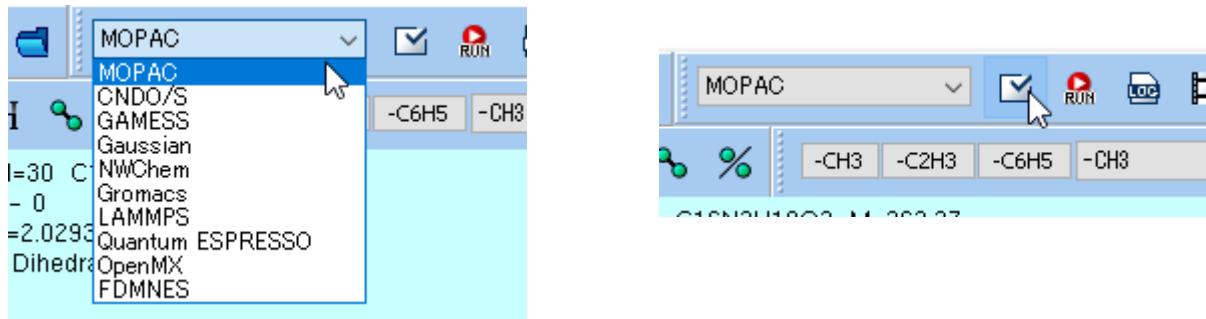
# I. モデルの作成

座標表示エリア上部タブで「Z-Matrix」を選択する。すると、座標表示エリアにインディゴ分子の座標がZ-Matrix形式で出現する。

Z-Matrix										XYZ		
12	O	1.21522	1	128.2361	1	5.7210	1	11	10	9		
13	C	1.47399	1	104.5112	1	-174.7013	1	11	10	9		
14	C	1.38025	1	129.8355	1	179.9093	1	13	11	10		
15	C	1.39478	1	116.7284	1	178.8874	1	14	13	11		
16	C	1.40965	1	120.7142	1	-0.3580	1	15	14	13		
17	C	1.40208	1	121.2389	1	0.2567	1	16	15	14		
18	C	1.40387	1	106.7388	1	-0.2756	1	13	11	10		
19	N	1.38011	1	131.7965	1	2.3464	1	10	9	7		
20	N	1.38921	1	128.4668	1	175.5715	1	4	3	2		
21	H	1.08750	1	119.5294	1	-179.6340	1	1	2	3		
22	H	1.08787	1	119.4460	1	179.3262	1	2	1	3		
23	H	1.08465	1	120.6791	1	178.5154	1	3	2	1		
24	H	1.08401	1	121.9047	1	-179.1180	1	6	1	2		
25	H	1.08410	1	121.3612	1	-0.6018	1	14	13	11		
26	H	1.08748	1	119.6833	1	-179.6835	1	15	14	13		
27	H	1.08821	1	119.3278	1	-179.0616	1	16	15	14		
28	H	1.08459	1	120.5582	1	-178.5701	1	17	16	15		
29	H	1.01290	1	120.3269	1	13.8809	1	19	10	9		
30	H	1.013342	1	125.8955	1	24.3466	1	20	4	3		

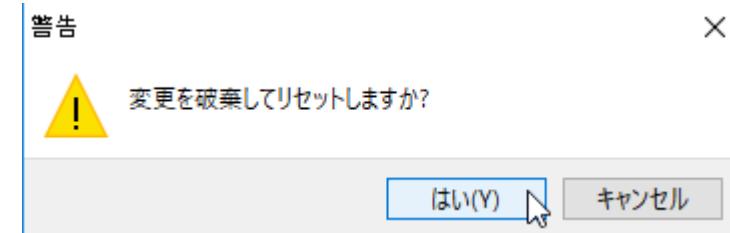
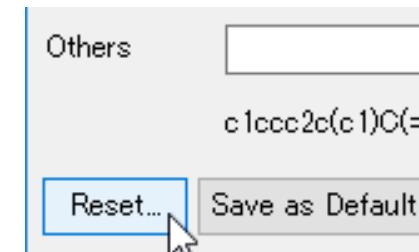
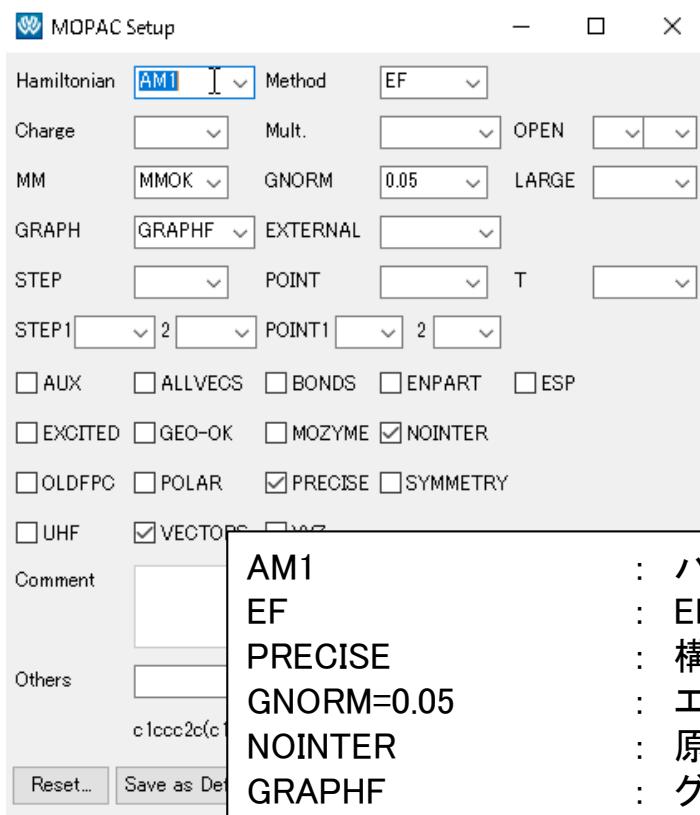
## II. キーワード設定

メインウインドウ上部の[ソルバーを選択]メニューで[MOPAC]を選択する。  
次に、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

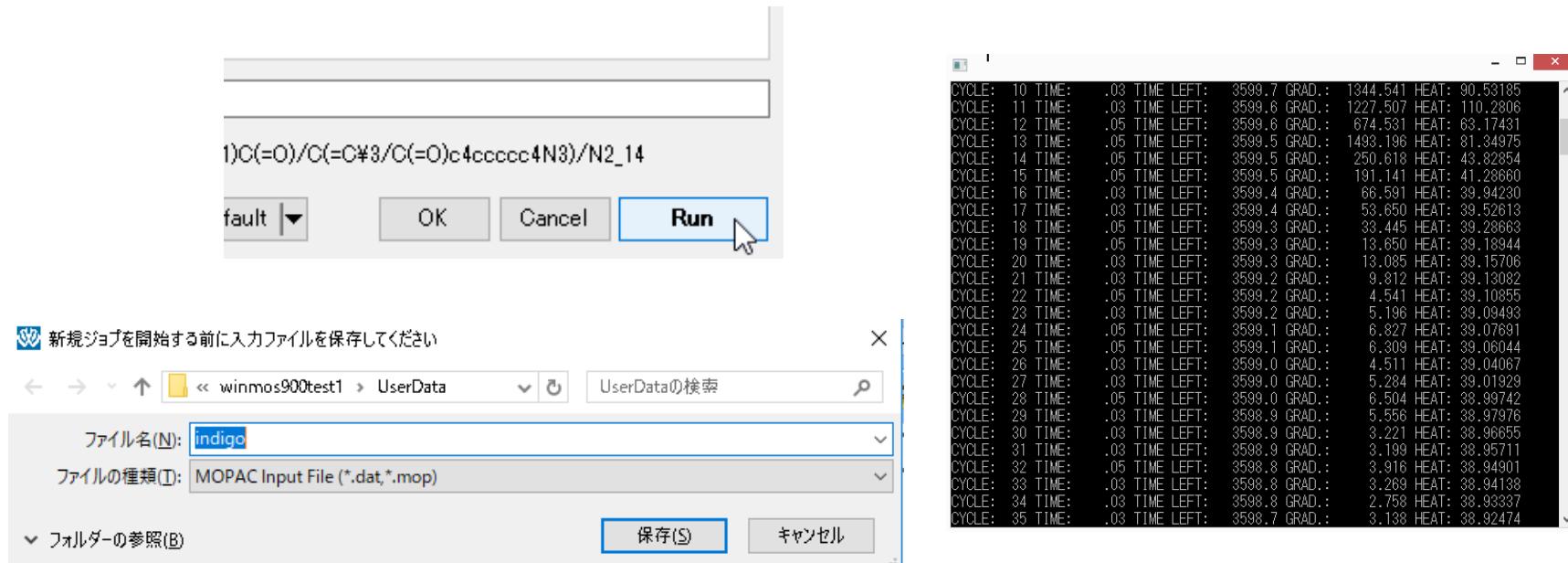
MOPACの計算条件を指定するための[MOPAC Setup]ウインドウが開く。左下の[Reset]ボタンをクリックし、警告ダイアログで[はい]をクリックする。リセット後に設定されるデフォルトの各キーワードの意味を以下に示す。



AM1	: ハミルトンアンは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
VECTORS	: 軌道係数を出力する。

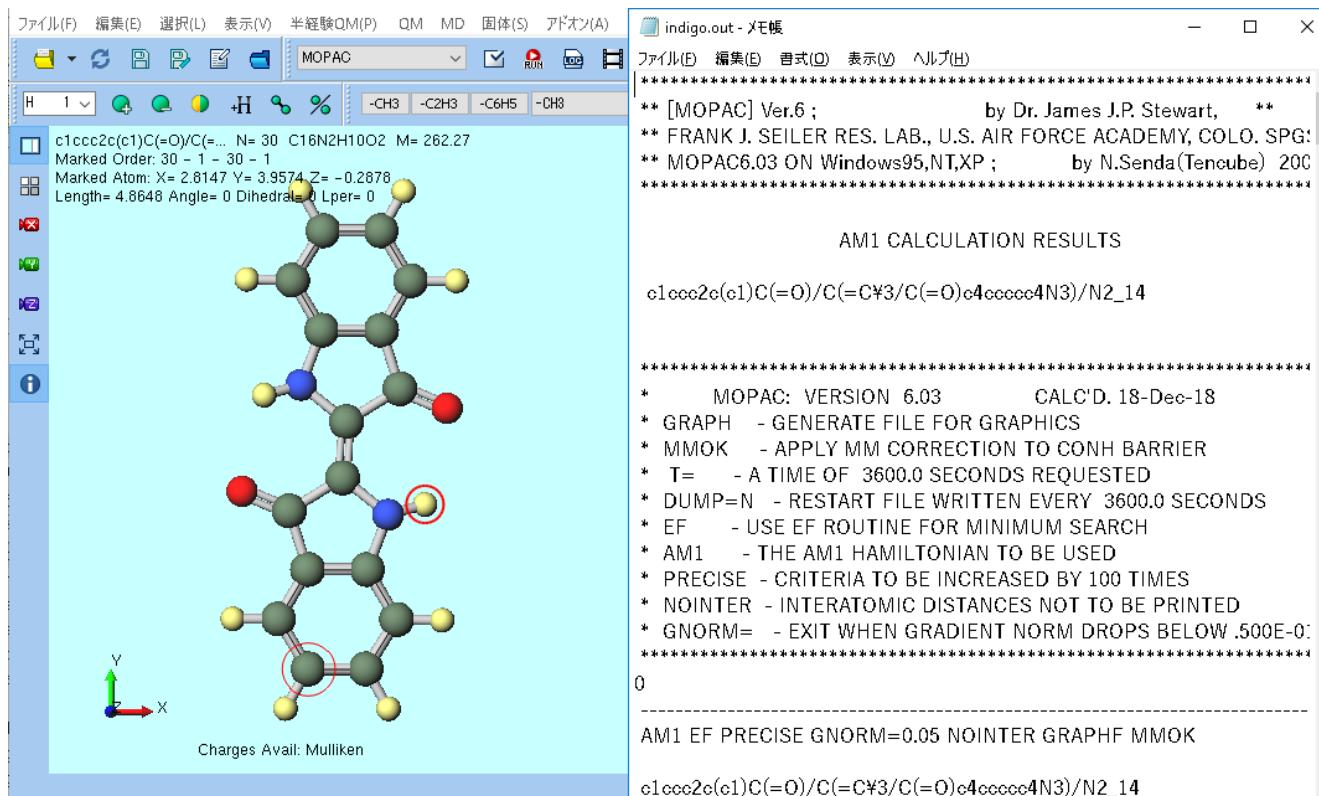
### III. 計算の実行

[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。仮に「indigo」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、自動で黒いコンソールウィンドウが数秒間出現する。



### 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(indigo.out)がテキストエディタ上で開かれる。また、アーカイブファイル(indigo.arc)もメインウィンドウ上で開かれる。



## 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の一部を以下に示す。

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。

## IV. 出力ファイルの確認

indigo.outの軌道係数に関する部分を以下に示す。

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	

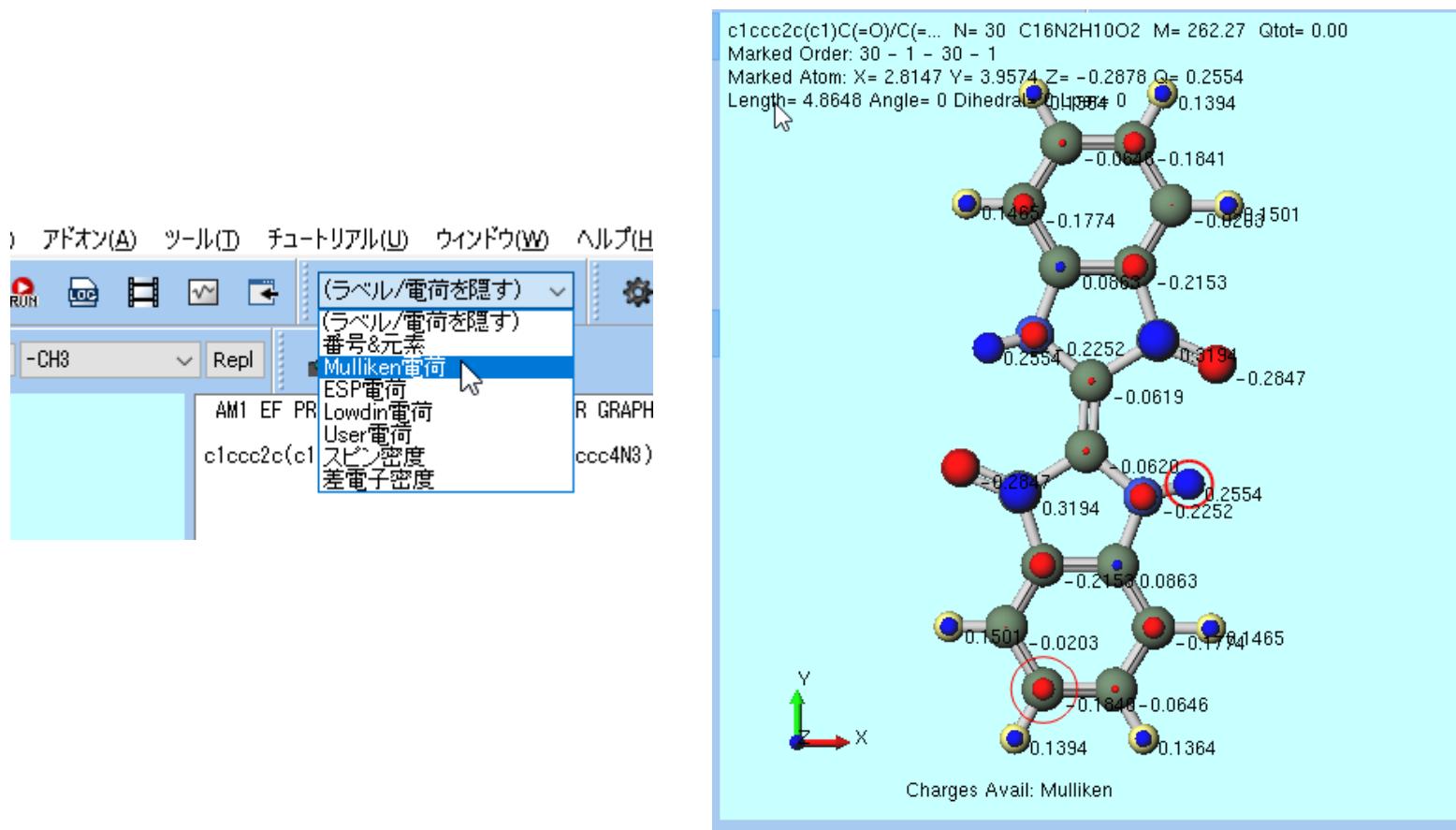
原子軌道 各係数

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。

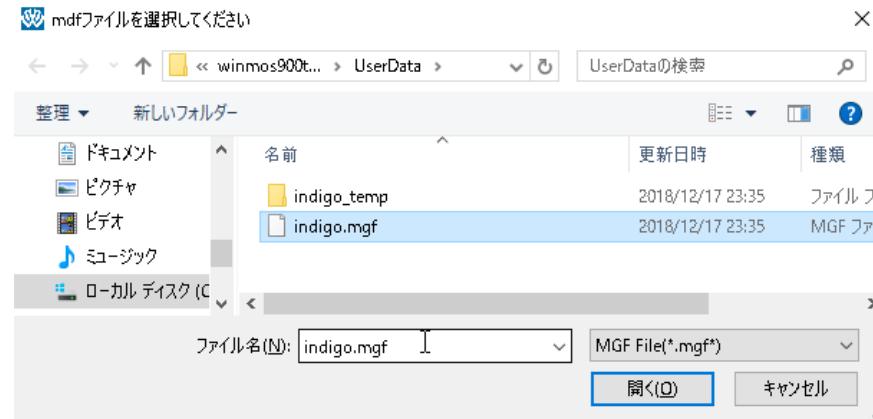
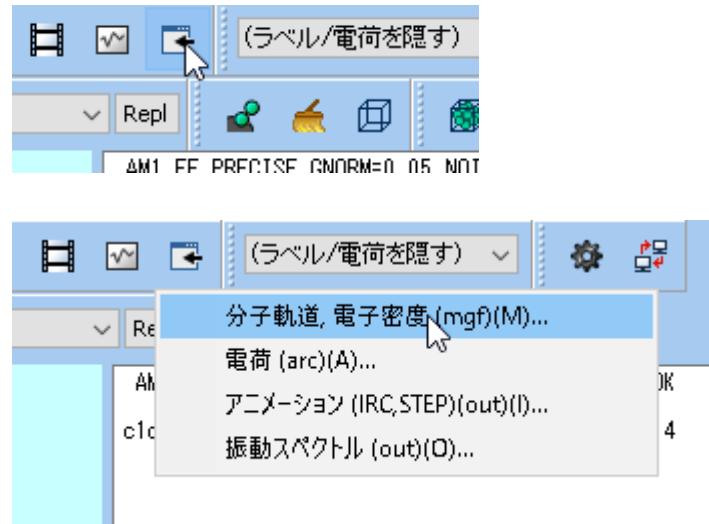
## V. Mulliken電荷の表示

メインウインドウ上部の[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。



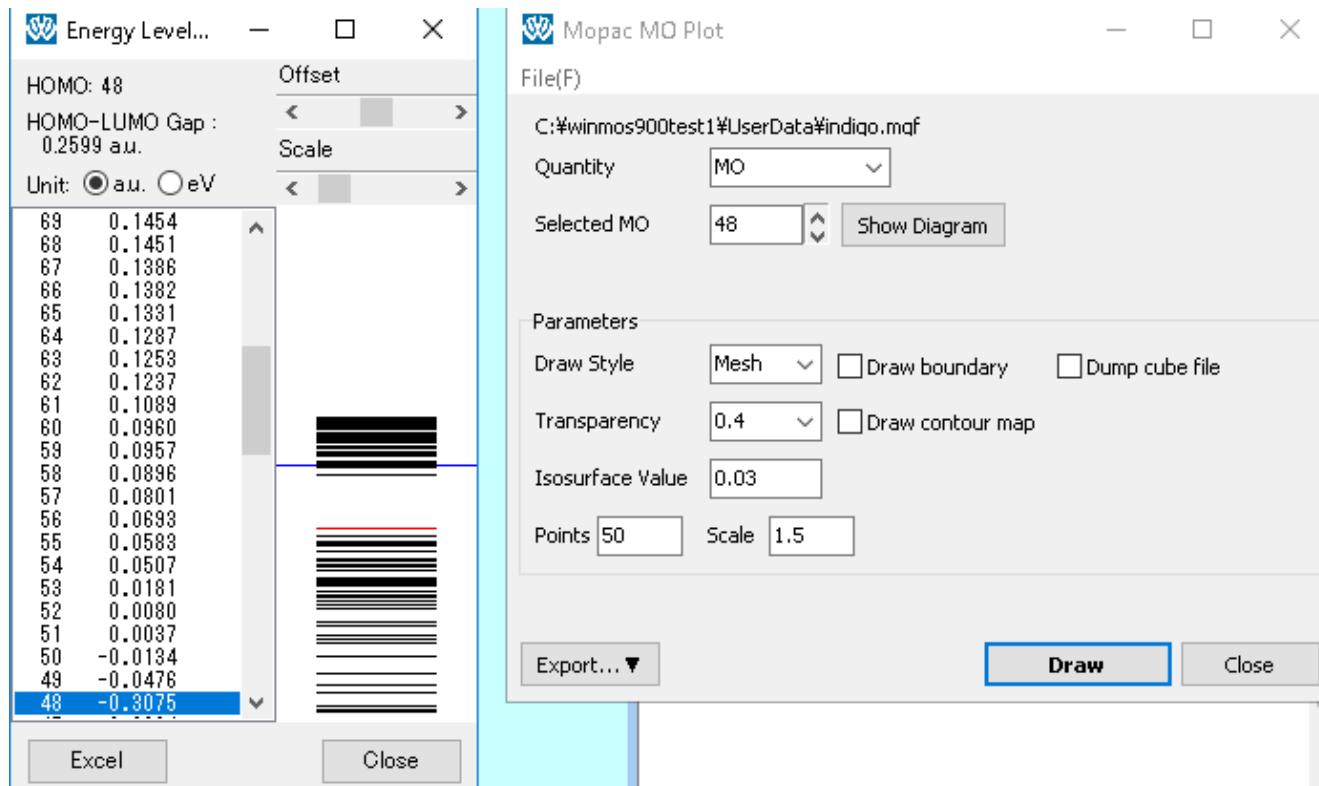
## VI. 分子軌道の表示

メインウインドウ上部の[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。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indigo.mgfを開く。



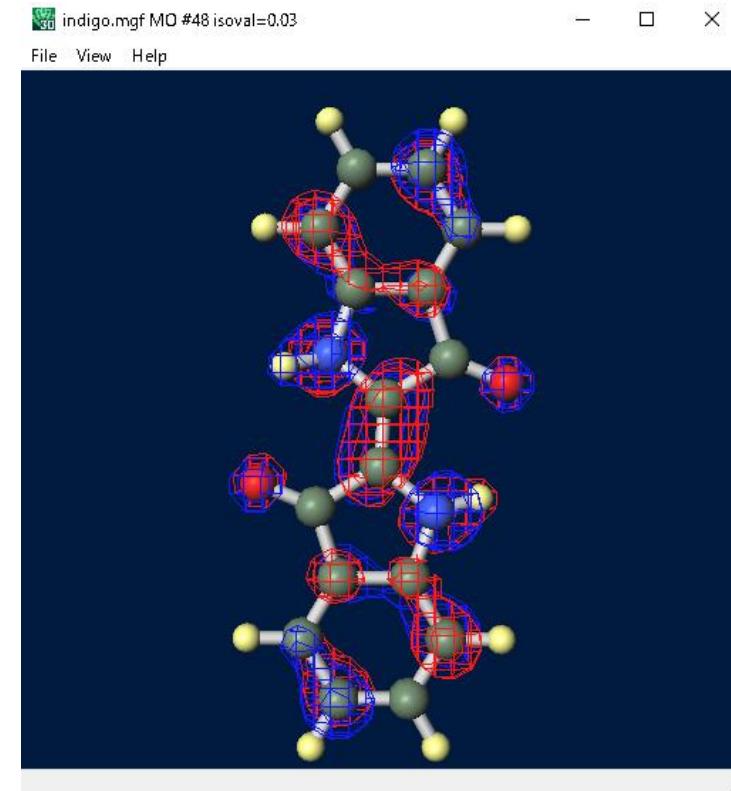
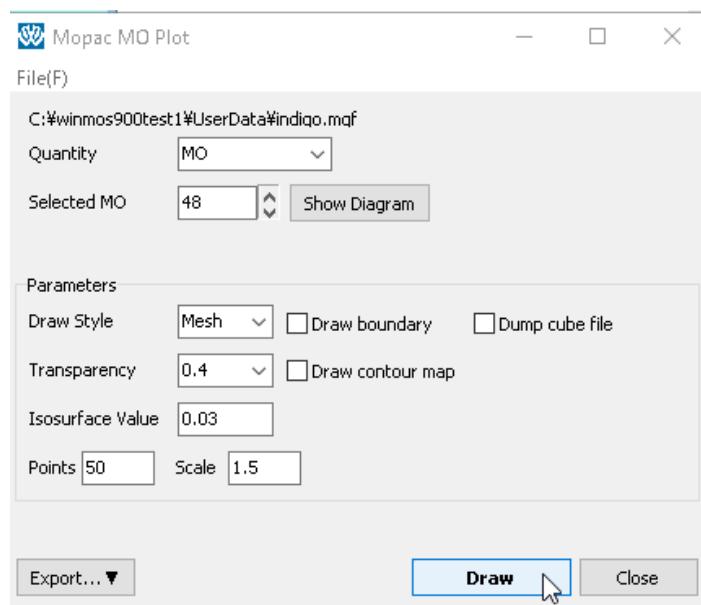
## VI. 分子軌道の表示

[Energy Level Diagram]および[MOPAC MO Plot] ウィンドウが開く。[Energy Level Diagram]ウィンドウにはHOMOが48番目の軌道であること、HOMO-LUMOギャップが0.2599 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

表示したい分子軌道の行を[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]ウィンドウ右下の[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。



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

The screenshot shows the Facebook profile of X-Ability Co.,Ltd. The profile picture is the company logo, and the name is "X-Ability Co.,Ltd. コンピュータ・テクノロジー". The cover photo features a large thumbs-up icon with the Japanese text "いいね！" (Like!). The timeline shows a post from November 14, 2018, at 20:30. The post content is:

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\\_000\\_s00...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_000_s00...)

The post includes a chemical diagram with molecular structures and the text "フロンティアオービタルによる新有機化学教程" and "AMAZON.CO.JP". Below the post are standard Facebook interaction buttons: "いいね!", "コメントする", and "シェア".