

Winmostar™ チュートリアル

MOPAC

基礎編

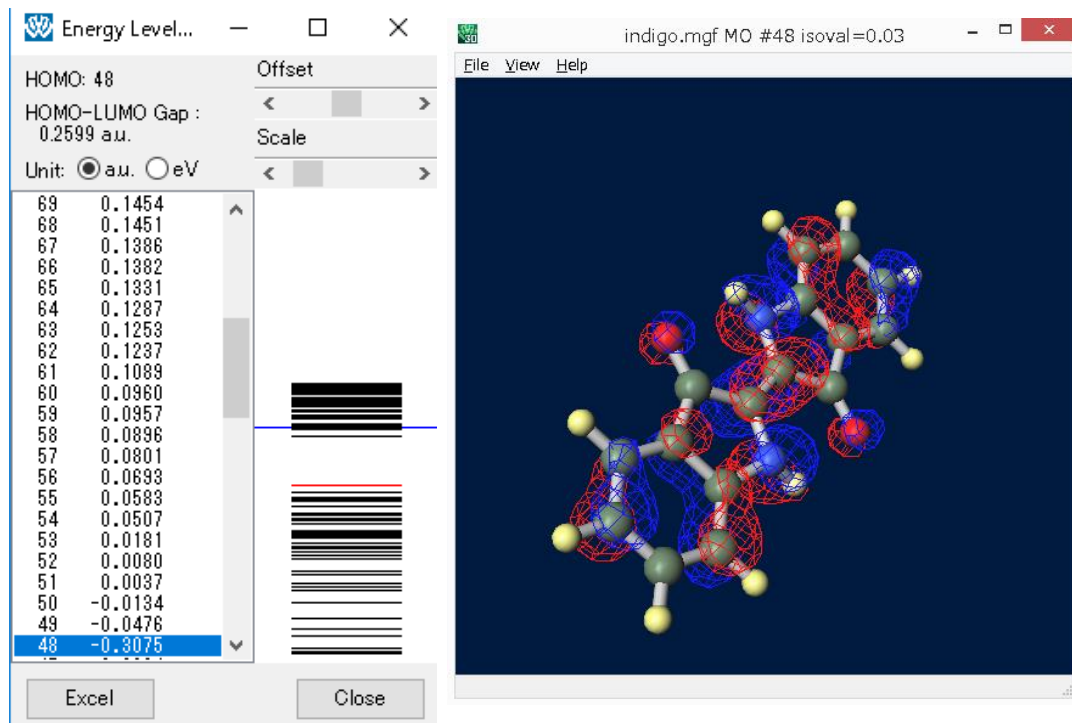
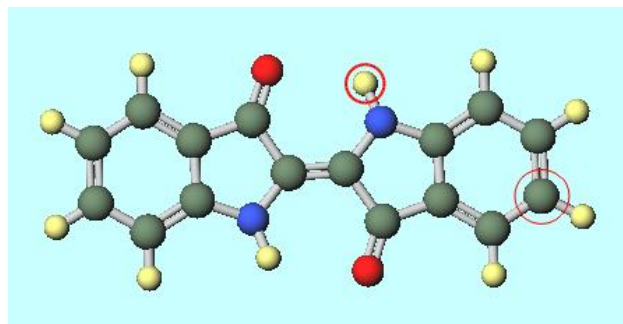
V9.0.0

株式会社クロスアビリティ

2019年1月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。



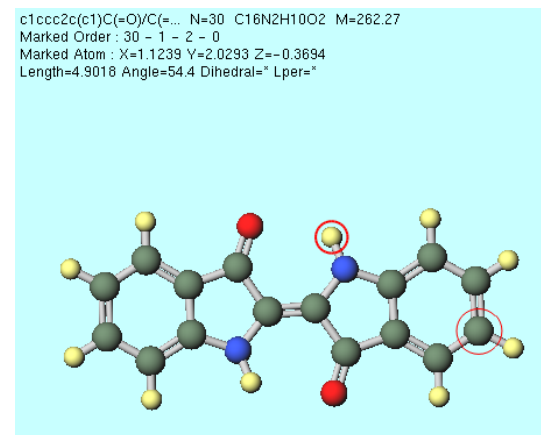
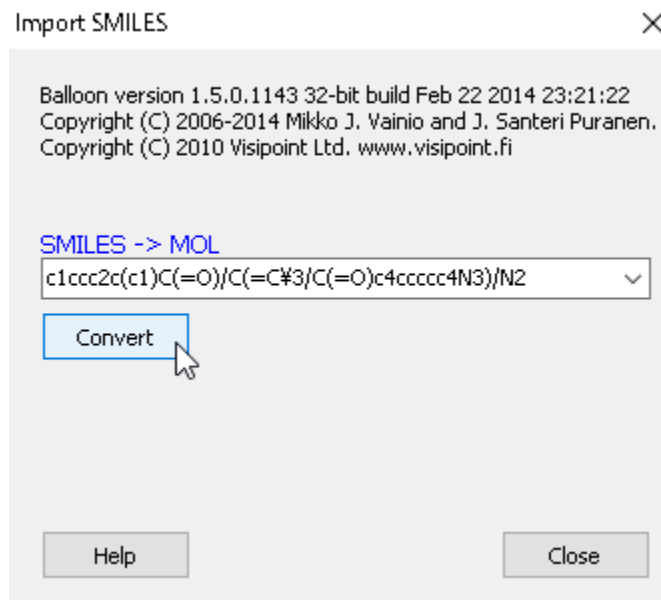
I. モデルの作成

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)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。



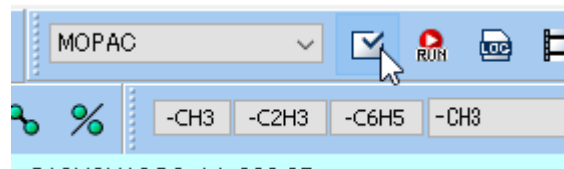
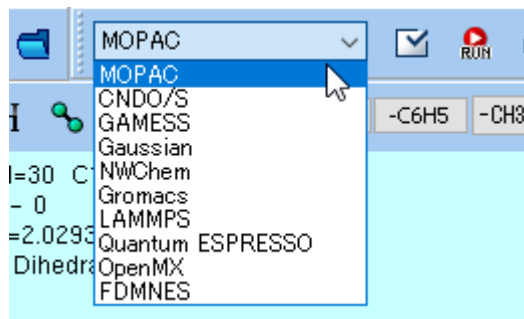
I. モデルの作成

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	1 129.8955 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	1.08743	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	1.01294	1 125.8955 1 24.3466 1 20 4 3
30	H	1.013342	125.8955 24.3466 20 4 3
		1	1 1

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]ウィンドウが開く。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。

The image shows the MOPAC Setup window with the following settings:

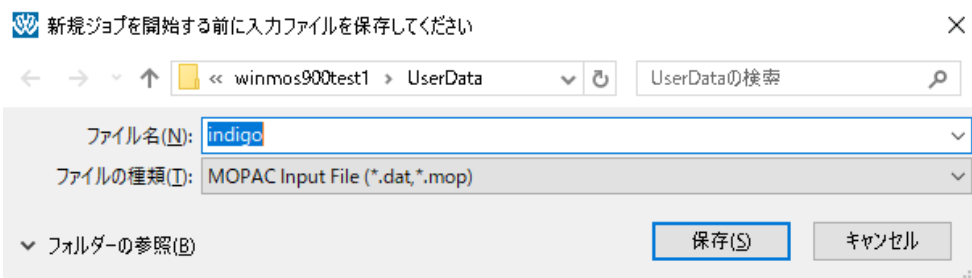
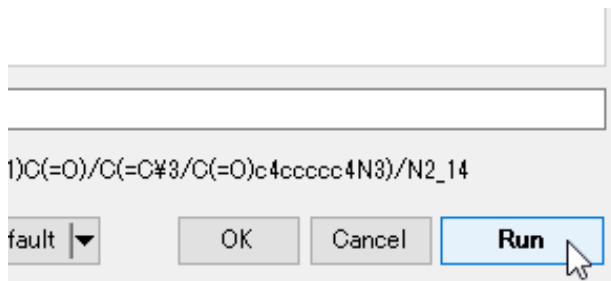
- Hamiltonian: AM1
- Method: EF
- Charge: []
- Mult.: []
- OPEN: []
- MM: MMOK
- GNORM: 0.05
- LARGE: []
- GRAPH: GRAPHF
- EXTERNAL: []
- STEP: []
- POINT: []
- T: []
- STEP1: [] 2 []
- POINT1: [] 2 []
- AUX ALLVECS BONDS ENPART ESP
- EXCITED GEO-OK MOZYME NOINTER
- OLDFPC POLAR PRECISE SYMMETRY
- UHF VECTORS

The warning dialog box contains the text: 警告 変更を破棄してリセットしますか? (Warning: Do you want to discard changes and reset?).

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]ウインドウで[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イ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: 43.82854
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.: 53.650 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: 39.07891
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(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)もメインウインドウ上で開かれる。

The screenshot shows the MOPAC software interface. On the left, a 3D ball-and-stick model of a chemical structure is displayed. The model consists of a benzene ring with a nitrogen atom and a carbonyl group attached. The atoms are color-coded: carbon (grey), oxygen (red), nitrogen (blue), and hydrogen (white). A coordinate system (X, Y, Z) is shown at the bottom left of the model. Below the model, the text "Charges Avail: Mulliken" is visible.

On the right, a terminal window titled "indigo.out - メモ帳" displays the output of the MOPAC calculation. The output includes the following information:

```

[MOPAC] Ver.6 ;                by Dr. James J.P. Stewart,  **
FRANK J. SEILER RES. LAB., U.S. AIR FORCE ACADEMY, COLO. SPG:
MOPAC6.03 ON Windows95,NT,XP ;    by N.Senda(Tencube) 20C
*****

AM1 CALCULATION RESULTS

c1ccc2c(c1)C(=O)/C(=C#3/C(=O)c4ccccc4N3)/N2_14

*****
* MOPAC: VERSION 6.03          CALC'D. 18-Dec-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
* NOINTER - INTERATOMIC DISTANCES NOT TO BE PRINTED
* GNORM= - EXIT WHEN GRADIENT NORM DROPS BELOW .500E-0:
*****
0
-----
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK

c1ccc2c(c1)C(=O)/C(=C#3/C(=O)c4ccccc4N3)/N2_14
  
```


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	

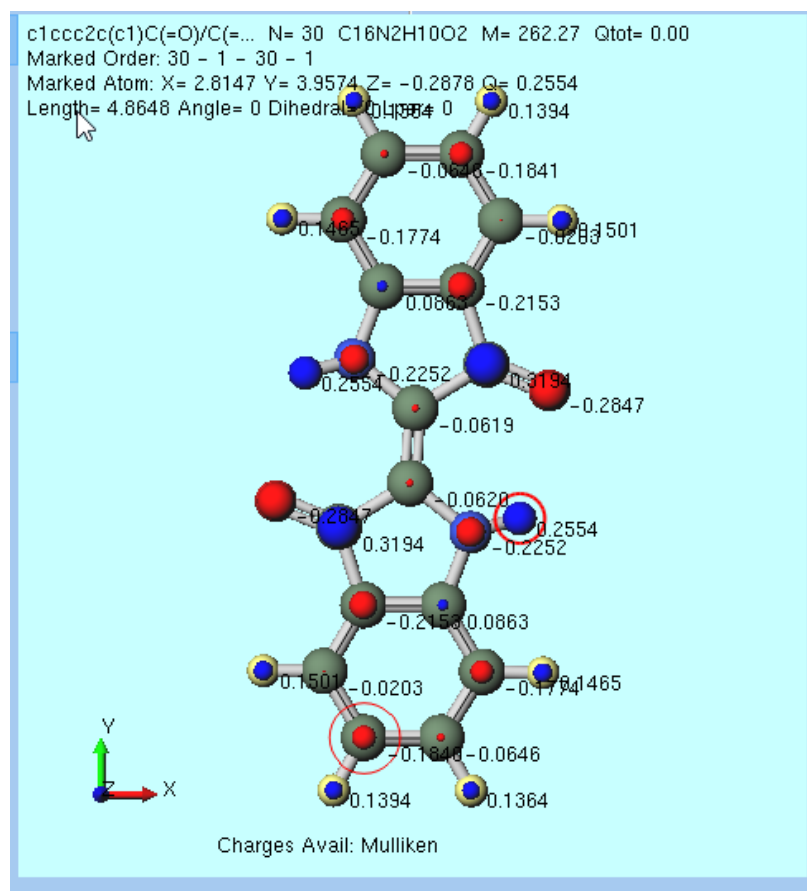
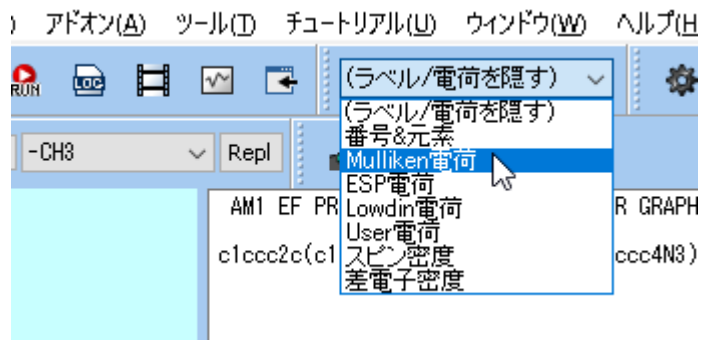
原子軌道 各係数

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。

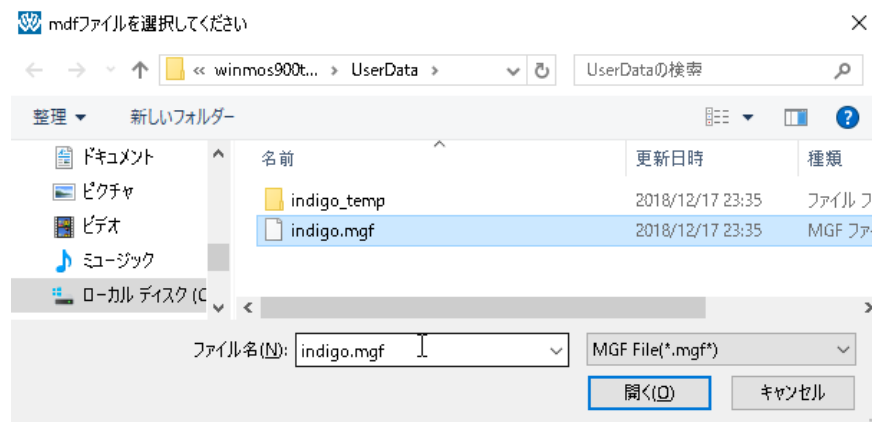
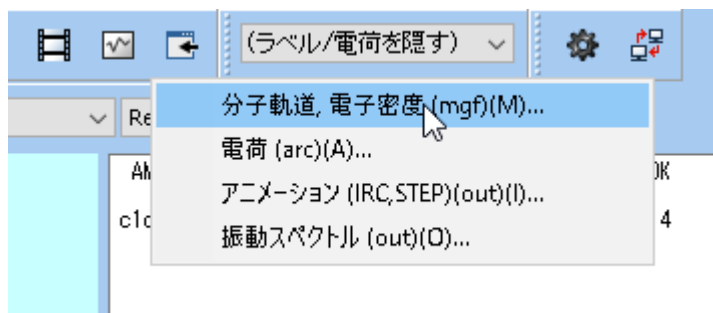
V. Mulliken電荷の表示

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。



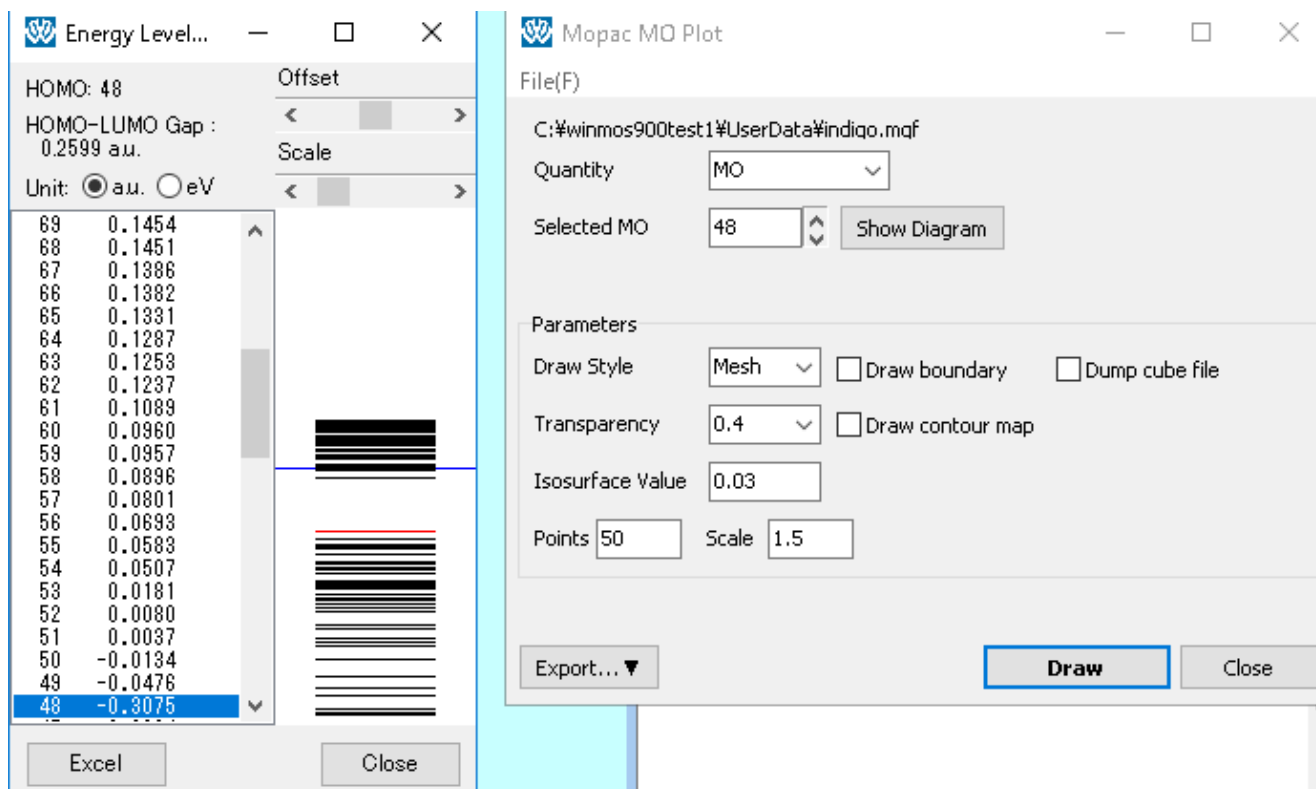
VI. 分子軌道の表示

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。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。



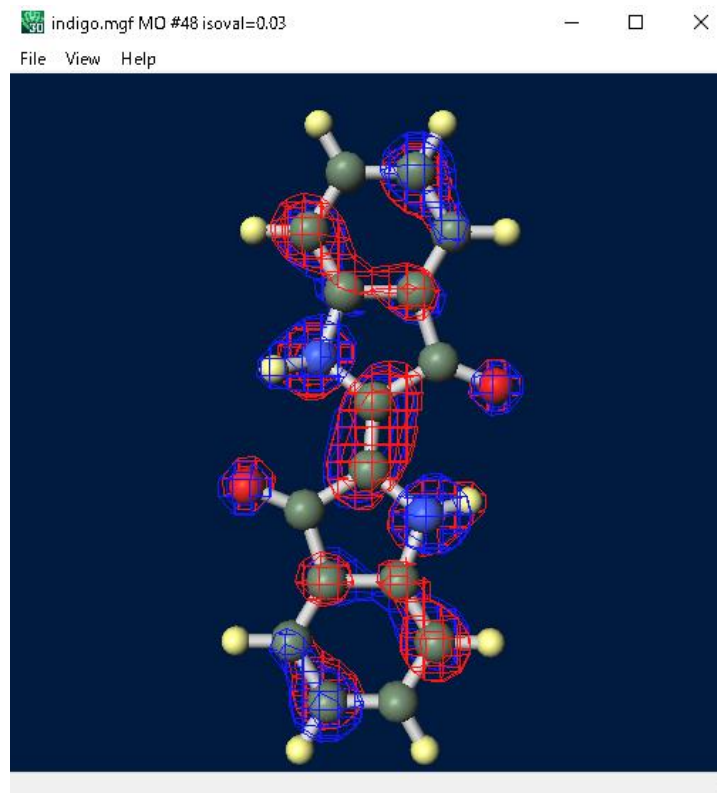
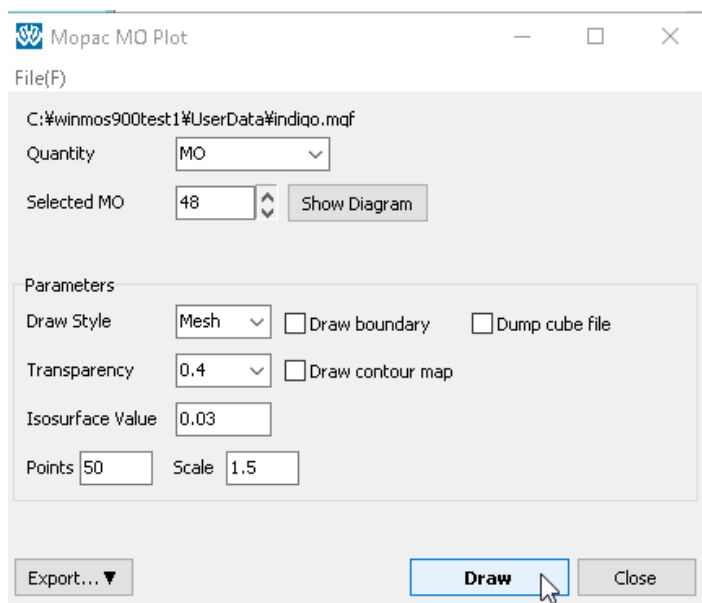
VI. 分子軌道の表示

[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。



<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! 38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