



Title	半経験的分子軌道法プログラム, MOPACの移植と, 関連プログラムの開発
Author(s)	高木, 達也; 松村, 謙一; 小野澤, 学寿 他
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1992, 86, p. 1-27
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65975
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

半経験的分子軌道法プログラム、MOPACの移植と、関連プログラムの開発

大阪大学薬学部／大阪大学大学院薬学研究科

高木達也、松村謙一、小野澤学寿、野田昭宏、藤原英明

§0. 序論

私達の研究室で移植、改良した、半経験的分子軌道計算プログラム、MNDOA、MNDOC、及びNMRスペクトル解析プログラム、LAOCN5に関し、その使用法等に関して記事を書いたのは、もう、5-7年前のことになる[1]。その際、筆者（高木）が末尾に書いた文章を、今一度採録してみる[1c]。

「・・・そもそも大学における研究というのは、公開されることが原則のはずである。そのうえ、開発に要した計算機使用料のほとんどは、国民の税金でまかなわれているのである。」
「ソフトウェアのプライオリティを前提として、かなり多くの、公開されるべきプログラムが埋もれているのではないだろうか。この文章を読んで、同意して下さった方があれば、\$BBSコマンド等を利用して、有益なプログラムの公開を行って頂くよう、願います。それが、計算科学の発展に、直接の影響を持つと考えるからである。」

この頃からであろうか。日本でも急速に、フリーソフト（無償のソフトウェア）、シェアウェアソフト（ソフトを継続的に使用する場合は、自主的に、使用料を払うもの）、PDS（著作権を放棄したソフト）が一般に流通し始め、現在では、UNIXワークステーションやMSDOSパーソナルコンピュータは、もはやこれらのソフト抜きでは、考えられなくなった。化学の世界でも、以前に比べれば、多くのソフトウェアが流通するようになってきた。JCPE（日本化学プログラム交換機構）の設立も、それに大きな貢献をしているものと思われる。しかし、他の分野に比べれば、まだまだ輸入超過の大貿易赤字項目であると受け取っているのは、筆者だけであろうか。

計算化学が、日本でその地位を確立するためには、和製ソフトの流通が、大きなポイントを握っていると、筆者は考える。とりわけ、GAUSSIANやこのMOPAC等、ユーザーインターフェースをよく考慮した、素人にも使いやすかつ、豊富な機能を有するソフトウェアの出現が待ち望まれる。MOPACは、中でも、最もユーザーインターフェースが考慮された化学ソフトウェアの1つであると思われ、素人でも容易に、量子化学の世界に入って行ける仕組みになっている。

今回、大阪大学大型計算機センターの研究開発計画の一環として、半経験的分子軌道法プログラム、MOPAC ver.6 を、スーパーコンピュータSX-2Nに移植、出力結果の描画ソフト、GLCAOと共に公開する機会を与えて頂いたので、以下に、その使用法等を略述する。

§ 1 . M O P A C ver.6.02 の機能

M O P A C は極めて豊富な機能を有しており、ここにそのすべてを詳述することは不可能である。そこで、以下に、比較的使用頻度が多いと思われる機能を記してみた。より進んだ使い方を望まれる向きは、参考書が出版されているので、そちらを参照して頂きたい[2,3]。以下に指定されたオプションは、入力データの 1 - 2 行目に記述する（後述）。

計算可能な分子軌道法

M I N D O 3	M I N D O / 3 法[4]
M N D O (default)	M N D O 法[5]
A M 1	A M 1 法[6]
P M 3	M N D O / P M 3 法[7]

データ入力に関する指定

S Y M M E T R Y	対称性データを入力する。
X Y Z	分子構造を、直行座標系座標値で入力する。
E X T E R N A L	外部からパラメーターを読み込む。
G E O - O K	異常に接近した原子対がある場合でも、無視して計算を続行する

出力に関する指定

N O I N T E R	原子間距離を印字しない
N O X Y Z	直行座標値を印字しない
S P I N	U H F 計算における最終スピン行列を印字する
T I M E S	各計算課程に要した計算機時間を印字する
V E C T O R S	正準分子軌道を印字する

計算テクニックの指定

0 S C F	分子軌道計算をせず、分子構造のみを出力して終わる。 入力データのチェックに使う。
1 S C F	構造最適化せず、入力データの構造のみで、分子軌道計算する。
(default)	構造最適化を行う

ENPART	エネルギー分割を行う
ESR	RHF計算における不対電子密度を計算する。
LOCALIZE	局在化軌道を出力する
MULLIK	Mulliken 近似による electron population の解析を行う。
PI	density matrix を、 σ 、 π に分離する。
POLAR	1～3 次の分子分極率を計算する
ANALYT	エネルギー勾配の計算に解析的微分を用いる
DRC	動的反応座標の計算を行う
FORCE	規準振動解析を行う
IRC	固有反応座標の計算を行う
ROT= σ	対称性のエントロピーを計算するために、対称数 σ を与える
SADDLE	遷移状態の構造最適化を行う。
THERMO	熱力学諸量を印字する。
TRANS	規準振動解析等のために、系が遷移状態にあることを知らせる
C. I. = n	配置間相互作用法を使用する。n は、励起電子配置の作成に用いる軌道数で、MICROS オプションを使用しなければ、HOMO, LUMO から順に採られる。例えば、n = 2 では、HOMO, LUMO。CAS法を用いていることに注意。
EXCITED	第 1 励起状態の構造最適化計算を行う。
FILL = n	励起状態の RHF 計算を行う場合、第 n 番目の MO に電子を充填する。
ROOT = n	第 n 励起状態の構造最適化を行う。下記、スピン多重度の指定が必須。
MECI	配置間相互作用計算結果の出力
MICROS	配置間相互作用計算に用いる軌道の細かな指定。
OPEN (n, m)	開殻系 RHF 計算の指定。n は開殻電子数、m は開殻軌道数。
UHF	非制限 HF 法の計算を行う
SINGLET	
DOUBLET	それぞれのスピン多重度状態の構造最適化計算を行う。
TRIPLET	
QUARTET	
QUINTET	

これら以外にも、多くのオプションが用意されている。例えば、ポリアデニン等、高分子の計算や、C b (キャップドボンド) を使用した、3次元結晶の計算 (例えば、ダイヤモンド等)、静電ポテンシャルの計算などであるが、詳細は、成書に譲る [2,3]。

なお、計算可能な原子種は、以下のようである。

MNDO	H、Li、B、C、N、O、F、(Na)、Al、Si、P、 S、Cl、(K)、Cr、Zn、Ge、Br、Sn、I、 Hg、Pb
AM1	H、B、C、N、O、F、Al、P、S、Cl、Br、I、
MNDO/PM3	H、Be、C、N、O、F、Mg、Al、Si、P、S、 Cl、Zn、Ga、Ge、As、Se、Br、Cd、In、 Sn、Sb、Te、I、Hg、Tl、Pb、Bi

§ 2. 入力データの作成方法

入力データの基本的な部分は、MNDO A [1a]、MNDO C [1b] に同じで、通常は、Z 一行列法で作成するのが簡単である。以下に、 $\text{H}_2\text{Ge}=\text{GeH}_2$ の場合の入力例を示す。まず、各原子に番号をつける (図 1)。番号の付け方は任意だが、できるだけ、中央部の、軸となる原子から順に番号をつける方が、後々 (結果を見るときなど) のためである。又、環状分子では、図 2 a のような番号の付け方をすると、てこ効果で、最適化がうまく行かない可能性がある。できれば、図 2 b の様な付け方をの方が好ましい。

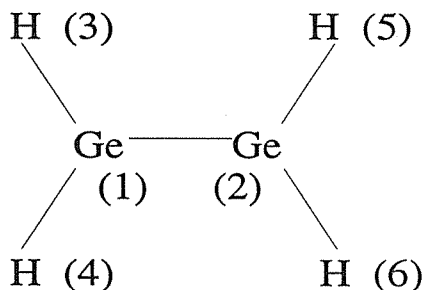


図 1 入力例に対応した Ge_2H_4 の原子の番号

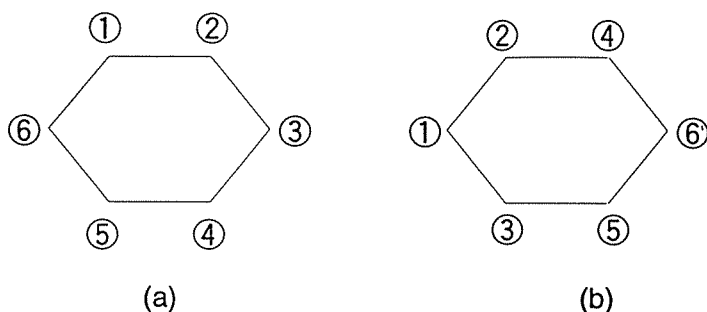


図2 環状化合物の番号の付け方

1) 第1行目

上記のオプションを指定する。オプションが多くて、1行に入りきらないときは、末尾に‘+’をつけて、次の行に記すことができる。

2-3) 第2～3行目

コメント行。自由にタイトル、その他を書き込むことができる。

4) 第4行目

ここから、分子の構造を、1番目の原子から順に入力する。1番目の原子は、自動的に、原点におかれることになるので、元素記号だけを指定すればいい。他の項目は、すべて0にしておく。

5) 第5行目

2番目の原子を指定する。2番目の原子は、X軸上に置かれることになるので、この原子の市を指定するには、原子間距離だけを指定すればいい。この場合、1番目の原子との原子間距離が1.78 Åであるので、第2項に、1.78を指定し、第8項に、「1番目の原子との距離である」事を示すために、1を指定する。また、この構造パラメータを最適化したい場合は、第2項のフラグを、1にしておく。

6) 第6行目

3番目の原子の位置を指定する。3番目の原子はXY平面上に置かれるので、原子間距離と、原子間角度だけを指定すればいい。第1項に、2番目の原子との原子間距離、1.20を指定し、この構造パラメータを最適化するために、第2項は、1にしておく。また、 $\angle 3, 2, 1$ の値として 120° を指定する。この角度が、 $\angle 3, 2, 1$ のものである事を示すために、第8項に2、第9項に1を指定する。これで、原子間距離は、この原子の番号である3と第8項に指定された2とで、原子、3、2の間のものである事となり、角度は、3、2と、第9項に指定された1とで、 $\angle 3, 2, 1$ のものである事がわかる。

7) 第7行目

4番目の原子の位置を指定する。ここからは、原子間距離に加えて、二面角（ねじれ角、dihedral angle, twist angle）の指定が必要になる。この例では、この原子につけられた番号である4と、第8項目、第9項目で指定されている2、1の3つの原子で決定される平面と、第8、9、10項目で指定されている2、1、3の3つの原子で決定される平面とがなす角度である。こう書くとややこしいが、ニューマン投影図を書けば、分かりやすい（図3）。この例では、第8項目に指定された原子、2から、第9項目に指定された原子、1を見るニューマン投影図を書いて、原子4（この行で指定される原子）と、第10項目で指定されている原子、3とがなす角度である。通常、時計回りが正の値をとると覚えて頂きたい。この場合は、180度である。

8-9) 第8-9行目

同様に、8、9番目の原子の位置を指定する。

10) 第10行目

データの終わりを示すために、すべての項目を0にした行をはさんでおく。

11) 第11行目

第1行目のオプションに、SYMMETRY が指定されている場合は、ここから、対称性データを入力する。この例の分子は、D_{2h}対称性を有しているので、様々な角度、原子間距離が、等しくなるはずである。11行目では、まず、水素-ゲルマニウム間の原子間距離が、すべて等しいことを指定している。左端の第a項目では、基準となる原子の番号を指定している。この例では、3番目の原子の入力行で指定した原子間距離（水素-ゲルマニウム間原子間距離、第1項目の数字）が、基準となることを示している。第b項目が、関数の指定で、この例では、第a項目の番号の原子の入力行で指定している原子間距離と、第c-e項目の番号の原子の入力部分で指定している原子間距離とが等しいことを示している。ここで指定された対称性は、構造最適化の間中、保たれる。第b項目には、

原子間距離が等しい場合	:	1
原子間角度が等しい場合	:	2
二面角が等しい場合	:	3

の値を指定する。

12) 第12行目

同様に、∠3、2、1と、∠4、2、1、∠5、1、2、∠6、1、2が等しいことを示している。3番目の原子の入力行で指定された原子間角度と、4-6番目の原子の入力行で指定された原子間角度が、等しいという意味である。

項	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
行										
1	VECTORS LOCALIZE SYMMETRY PM3									
2	KAORU,MIHO,MAKOTO,NAOKI,MASAAKI,H2GeGeH2									
3										
4	Ge	0.00	0	0.00	0	0.00	0	0	0	0
5	Ge	1.78	1	0.00	0	0.00	0	1	0	0
6	H	1.20	1	120.0	1	0.00	0	2	1	0
7	H	1.20	0	120.0	0	180.0	0	2	1	3
8	H	1.20	0	120.0	0	0.00	0	1	2	3
9	H	1.20	0	120.0	0	180.0	0	1	2	3
10	0	0.00	0	0.00	0	0.00	0	0	0	0
11	3, 1, 4, 5, 6,									
12	3, 2, 4, 5, 6,									
13	0, 0, 0,									
項	a	b	c	d	e					

図3 Ge₂H₄の標準的な入力例

13) 第13行目

対称性データ入力の終わりを示すため、すべて0の値を指定した行を挿入する。

これで、典型的な入力データの作成が終了した。末尾には、このデータに対応した出力例を記したので、参考にして頂きたい。また、非平面分子であるヒスタミンの入力例も、あげておいた。

§3. いくつかの注意事項

このプログラムに固有の問題ではないが、「半経験的」と言われる手法は、精度は高いとは言え、あくまでも、経験的パラメータによっている計算方法であるため、計算結果に100%の信頼を置くことは禁物である。しかし、おおよそのところ、「通常の」分子の、「標準的な」計算には、かなりの(100%に近い)信頼性をおいていいものと思われる。少なくとも、薬学、生物学で興味もたれるような規模の分子で、これほど容易に計算でき、ある程度の信頼性がおける方法は、他に類を見ない。一連の計算方法の信頼性については、現在も多くの研究が行われている。詳しくは、成書に当たられたい。

また、細かいが重要と思われる注意事項を、以下に挙げておく。

1) MNDO法で、例えば、ニトロベンゼンの構造最適化を行うと、ニトロ基がベンゼン環に垂直になってしまう。こうした場合は、平面であることがあらかじめわかっているものは、平面として構造最適化を行うか、または、AM1法では、これらの欠点は改善されているので、そちらを使用する。

2) スルホン、スルフォキサイド、過塩素酸イオンなど、超原子価状態の分子では、MNDO法、AM1法は、ろくな結果を与えない。これらの場合は、必ず、MNDO/PM3法を使用すること。

3) 微妙な差や、特殊な状況の計算を行う場合は、やはり、*ab initio* MO方の使用をお勧めする。特に多種類の元素の存在する無機化合物では、信頼性の検定は、不十分と思われる。

§ 4. 実行方法

今回は、SX-2N用のソフトウェアであるため、実行は、すべて、基本型のバッチJOBで行う。しかし、基本型のJCLに慣れておられない方も多いものと思われるので、簡単にバッチJOBを発生する簡易コマンドも用意したので、使用されたい。基本型のJCLを、以下に記す。

```
$      JOB      ,U
$      SX      TYPE=SX
$STEP      MAIN,FILE=LIB.MOPAC;
$ASSIGN      FF02,userid.filename,SHARE=READ;
$ASSIGN      FF01,X01,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF03,X03,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF04,X04,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF08,X08,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF09,X09,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF10,X10,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF11,X11,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF13,X13,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF14,X14,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF15,X15,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF16,X16,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF17,X17,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF20,X20,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF21,X21,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
```

```

$ASSIGN      FF22,X22,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF35,X35,FILESTAT=TEMP,RESIDENT;
$ASSIGN      FF12,DPR,FILESTAT=SYSOUT;
$DEFINE      FF12,DATAFORM=SSF;
$ENDSTEP;
$           ENDJOB

```

この JCL は、

```
LIBSOURCE/APPLIC/MOPAC/JCL
```

に保存されているので、

```
LIB LIBSOURCE/APPLIC/MOPAC/JCL,R
```

等として、使用されたい。なお、使用例を以下に掲げる。ユーザーは、斜体小文字の部分のみを（大文字にして）入力すればよい。ここでは作成した入力データを、/DATA/EX1 にセーブし、S X 側のファイルとして、A00000.DATA を使用するものとしている。

(入力データの作成)

```
*save /data/ex1
```

```
TCMD536 I データをファイル EX1 にセーブしました
```

```
*ssta ex1:'a00000.data':data
```

```
*old /jcl/mopac,r
```

```
*rvs:/userid.filename/:'a00000.data/'
```

```
$ASSIGN      FF02,A00000.DATA,SHARE=READ;
```

```
*run
```

```
CRJE001 R カード形式とディスポジション?s
```

```
CRJE002 R タブ文字と位置?
```

```
CRJE350 I S NUMB 名 # I412T
```

```
*jmon *
```

```
CRJE452 I I412T はジョブ転送中です @ 23:25:39
```

```
CRJE450 I I412T はステータス DF です @ 23:25:50
```

```
CRJE447 I デマンドファイル内の I412T は出力待ちです @ 23:26:00
```

```
CRJE600 I NORMAL TERMINATION
```

```
*jout *
```

CRJE012 R ファンクション?list all

ACTI#	RC	LINE	HOLD	CLASS
-------	----	------	------	-------

-- \$\$ -- -- I

001 74 288 YES I

001 24 42 YES I

CRJE012 R ファンクション? epri 74

**** When you publish your studies containing the results obtained with this ****

** program, you should write the following descriptions therein as a **

reference. **

•

•

4

•

1

S	H	3	0.73921	0.04042	0.03275	0.00226	-0.04095	0.00000
---	---	---	---------	---------	---------	---------	----------	---------

S	H	4	0.04042	0.73921	-0.00226	-0.03275	-0.04095	0.00000
---	---	---	---------	---------	----------	----------	----------	---------

S	H	5	-0.00226	0.03275	0.04042	-0.73921	-0.04095	0.00000
---	---	---	----------	---------	---------	----------	----------	---------

S	H	6	0.03275	-0.00226	0.73921	-0.04042	-0.04095	0.00000
---	---	---	---------	----------	---------	----------	----------	---------

TOTAL CPU TIME: 0.58 SECONDS

== MOPAC DONE ==

CRJE317 I レポート 74 の終了です

CRJE012 R ファンクション?rele

尚、簡易コマンドは2種類用意されていて、初めてこの大型センターでMOPACを使用される方は MOP1 を、2度目以降の方は MOP2 を使用されるようになっている。又、結果の出力のためのコマンド、MOP0 も用意されている。

(MOP 1 の例)

**mop1*

*** MOPAC ver.6.02 batch job start ***

ENTER DATA FILE NAME -- /data/ex1

*CREA SRC,100

TCMD522 I ファイル SRC を作成しました

*CPY *;SRC

TCMD540 I 1 L L I N K コピーしました

*CARD NEW

*OLD /data/ex1,R

*OLD A62245/PUBLIC/JCL/MOPAC,R

*SXTS

SX MODE RON = X00044635

*PREA TEMP.SIN RECFORM=VB SIZE=10 UNIT=BLOCK BLOCKSZ=4096 RECSIZE=508

A00000.TEMP.SIN

=== ALLOCATED ===

*DONE

*-RVS:/userid.filename/;/A00000.TEMP.SIN/

\$ASSIGN FF02,A00000.TEMP.SIN,SHARE=READ;

*SSTA /data/ex1,R:'A00000.TEMP.SIN':DATA

*RUN

CRJE001 R カード形式とディスポジション?S,STAT

CRJE002 R タブ文字と位置?

CRJE350 I S NUMB 名 # I421T

*OLD SRC

*REMO SRC

**jmon **

CRJE453 I I421T はジョブ転送が完了しました @ 23:48:23

CRJE450 I I421T はステータス DF です @ 23:48:34

CRJE447 I デマンドファイル内の I421T は出力待ちです @ 23:48:44

CRJE600 I NORMAL TERMINATION

**mopo*

*** MOPAC ver.6.02 batch job start ***

ENTER JOB NUMBER -- *i421t*

*JOUT I421T

CRJE012 R ファンクション?EPRI 74

** When you publish your studies containing the results obtained with this **
** program, you should write the following descriptions therein as a **
** reference. **

:
:
:
(結果の出力が続く)
:
:
:

S	H	3	0.73921	0.04042	0.03275	0.00226	-0.04095	0.00000
S	H	4	0.04042	0.73921	-0.00226	-0.03275	-0.04095	0.00000
S	H	5	-0.00226	0.03275	0.04042	-0.73921	-0.04095	0.00000
S	H	6	0.03275	-0.00226	0.73921	-0.04042	-0.04095	0.00000

TOTAL CPU TIME: 0.58 SECONDS

== MOPAC DONE ==

CRJE317 I レポート 74 の終了です

CRJE012 R ファンクション?HOLD

(MOP2の使用例)

**mop2*

*** MOPAC ver.6.02 batch job start ***

```

ENTER DATA FILE NAME -- /data/ex1
*CREA SRC,100
TCMD522 I ファイル SRC を作成しました
*CPY *;SRC
TCMD540 I 1 L L I N Kコピーしました
*CARD NEW
*OLD /data/ex1,R
*OLD A62245/PUBLIC/JCL/MOPAC,R
*-RVS:/userid.filename/;/a00000.TEMP.SIN/
$ASSIGN          FF02,a00000.TEMP.SIN,SHARE=READ;

*SSTA /data/ex1,R:'a00000.TEMP.SIN':DATA
*RUN
CRJE001 R カード形式とディスポジション?S,STAT
CRJE002 R タブ文字と位置?
CRJE350 I  S NUMB 名 # I423T
*OLD SRC
*REMO SRC
*jmon *
CRJE453 I I423T はジョブ転送が完了しました @ 23:51:08
CRJE450 I I423T はステータス DF です @ 23:51:19
CRJE447 I デマンドファイル内の I423T は出力待ちです @ 23:51:29
CRJE600 I NORMAL TERMINATION

```

**mopo*

```

*** MOPAC ver.6.02  batch job start ***

```

```

ENTER JOB NUMBER -- i423t
*JOUT i423t
CRJE012 R ファンクション?EPRI 74

```

```

*****
** When you publish your studies containing the results obtained with this **
**      program, you should write the following descriptions therein as a   **
**      reference.                                                            **

```

:
 (結果の出力が続く)
 :
 :
 :

S	H	3	0.73921	0.04042	0.03275	0.00226	-0.04095	0.00000
S	H	4	0.04042	0.73921	-0.00226	-0.03275	-0.04095	0.00000
S	H	5	-0.00226	0.03275	0.04042	-0.73921	-0.04095	0.00000
S	H	6	0.03275	-0.00226	0.73921	-0.04042	-0.04095	0.00000

TOTAL CPU TIME: 0.58 SECONDS

== MOPAC DONE ==

CRJE317 I レポート 74 の終了です

CRJE012 R ファンクション?HOLD

§ 5. 簡易分子軌道描画プログラム、GLCAO

先の入力例の場合のように、平面分子や、そうでなくとも小規模の分子の場合には、少し分子軌道計算に慣れた方なら、分子軌道のおおよその広がりや、位相、形などが、ひいては、その分子の分子物性や化学反応性がわかるだろう。しかし、ペプチドだ、フラレンだとなると、そう簡単に把握するわけにはいくまい。ましてや、あまり、分子軌道計算、量子化学になじみの無い方には、得られた分子軌道の解析は、困難を極める可能性が高い。しかし、生成熱や、形式荷電だけの情報だけしか活用しないのでは、せっかくの大量の出力が生かされない。

そこで、正準分子軌道のおおよその形と広がりを、PC 9801 上のカラーグラフィックスとして表すことにより視覚的に把握する目的で、簡易分子軌道描画プログラム、GLCAOを作成した。このプログラムの特徴は、大規模な分子でも使用可能なこと、及び、MOPACの標準出力をそのまま入力データとして使用するので、特別な工夫が不必要なこと、マウスを使った、GUI 的インターフェースにより、非常に使いやすく工夫されていることにある。使用方法は、以下のようなものである。

1) 先述の方法により、分子軌道計算を行う。入力データのオプションには、必ず、VECTORSを指定する。

2) レポートコード74の内容を、PC9801のフロッピーにコピーする。例えば、ASTERを使用していている場合は、Bドライブの、D74.OUT という名のファイルに格納するとして、

```
FUNCTION?copy 74;d74
*old d74
*^dtsave b:d74.out
```

又、その他のターミナルプログラムを使用されている場合は、

```
*jout i472t
```

←ここで、受信開始

```
FUNCTION?epri 74
```

3) 今、AドライブにGLCAOのプログラムディスクが、Bドライブに出力結果が格納されたディスクがあるとすると、

```
A>glcao
```

と入力すれば、後は、会話的に使用できるようになっている。詳しくは、パッケージ内のREADME ファイルを参照されたい。

以上のようにすれば、簡単に、各分子軌道の状況を把握することができる。

なお、GLCAOは、ロードモジュール、ソース、テストデータ等を含む、Ish + LHa 形式のファイルとして、

```
LIBSOURCE/APPLIC/MOPAC/GLCAO
```

に保存されている。

§ 6. 使用に関する条件等

1) MOPAC

MOPACは、フリーソフトではあるが、計算結果を公表する場合には、以下の記述を参考文献として引用することが義務づけられている。

MOPAC ver.6 coded by James J.P.Stewart, *QCPE Bull.*, 1989, vol.9, pp.10.
Revised as ver.6.01 by Yoshihisa Inoue, for FACOM machine,
JCPE Newsletter, 1991, vol.3(1), pp.49.
Revised as ver.6.02 by Tatsuya Takagi, Ken-ichi Matsumura, Akihiro Noda,
Norihiisa Onozawa, and Hideaki Fujiwara, for NEC SX-2N machine,
Bulletin of Computation Center Osaka University, 1992, 22(2), pp.1.

又、ソースプログラムを改変して使用したときは、改変者の名前を、0.01 だけ増大させた version No. とともに、つけ加える。例えば、

MOPAC ver.6 coded by James J.P.Stewart, *QCPE Bull.*, 1989, vol.9, pp.10.
Revised as ver.6.01 by Yoshihisa Inoue, for FACOM machine,
JCPE Newsletter, 1991, vol.3(1), pp.49.
Revised as ver.6.02 by Tatsuya Takagi, Ken-ichi Matsumura, Akihiro Noda,
Norihiisa Onozawa, and Hideaki Fujiwara, for NEC SX-2N machine,
Bulletin of Computation Center Osaka University, 1992, 22(2), pp.1.
Revised as ver.6.03 by Karl Vondringer, for NEC SX-3R machine.

なお、ロードモジュールその他のファイルは、以下に保存されている。

ロードモジュール	'LIB.MOPAC'
ソースプログラム	LIBSOURCE/APPLIC/MOPAC/SRCV6.02 LIBSOURCE/APPLIC/MOPAC/ESPV6.02
INCLUDE ファイル	LIBSOURCE/APPLIC/MOPAC/SIZES
テストデータ	LIBSOURCE/APPLIC/MOPAC/TESTD1 LIBSOURCE/APPLIC/MOPAC/TESTD2
JCL 例	LIBSOURCE/APPLIC/MOPAC/JCL

2) GLCAO

GLCAOの使用条件等は、同梱の README ファイルに記述されているので参照して頂きたい。特に、GLCAOにより得られた画像を直接、研究成果等の形で公表する場合は、以下の記述を、参考文献として引用して頂きたい。口頭発表の場合は不要である。

GLCAO ver.1.00, T.Takagi, K.Matsumura, N.Onozawa, A.Noda, and H.Fujiwara,
Bulletin of Computation Center Osaka University, 1992, 22(2), pp.1.

§ 7. 謝辞

本プログラムの開発は、主として、大阪大学大型計算機センター研究開発計画として行われました。研究開発計画としてご承認頂きました、大阪大学大型計算機センター研究開発計画委員会並びに、プログラム・ライブラリ小委員会に、深謝いたします。又、GLCAOの開発に関しまして、種々ご助言頂きました、分子科学研究所相関第一の豊田二郎先生、元、大阪大学産業科学研究所技官、谷美香さん（当時、現姓松尾）、Nifty FCHEM のみなさん、特にButchさんに深謝いたします。

又、入力データ例は、薬学部3年次基礎実習として、江口郁、江本美帆、大坪良、大藪巨樹、笠松正昭氏の5人の3回生によって作成されたもの（Ge₂H₄）及び、先述の谷美香さんによって作成されたものです。データを作成して頂いた皆さんに深謝いたします。

連絡先

565 大阪府吹田市山田丘1-6
大阪大学薬学部 薬品分析化学教室
大阪大学大学院 薬学研究科
環境生物薬学専攻 環境解析学講座
高木 達也
tel:06-877-5111 ex.6134 fax:06-877-4489
JUNET:a62245a@center.osaka-u.ac.jp
MMAIL:OSAKA-U/CC/SATAN N1MAIL:A62245@OSAKA

§ 8. 出力例等

1) Ge₂H₄の計算結果

```
*****
** When you publish your studies containing the results obtained with this **
**      program, you should write the following descriptions therein as a   **
**      reference.                                                         **
**                                                                           **
** MOPAC ver.6 coded by James J.P.Stewart, QCPE Bull., 1989, vol.9, pp.10. **
** Revised as ver.6.01 by Yoshihisa Inoue, for FACOM machine,             **
**      JCPE Newsletter, 1991, vol.3(1), pp.49.                           **
** Revised as ver.6.02 by Tatsuya Takagi, Ken-ichi Matsumura, Akihiro Noda, **
**      Norihisa Onozawa, and Hideaki Fujiwara, for NEC SX-2N machine,     **
**      Bulletin of Computation Center Osaka University, 1992, 22(2), pp.1. **
*****
** MOPAC program package : Projected by Dr. James J.P.Stewart ;          **
** FRANK J. SEILER RES. LAB., U.S. AIR FORCE ACADEMY, COLO. SPGS., CO. 80840 **
*****
```

PM3 CALCULATION RESULTS

```
*****
*          MOPAC:  VERSION  6.02          CALC'D. 92-05-29  23:52:06
*  VECTORS  - FINAL EIGENVECTORS TO BE PRINTED
*  LOCALIZE - LOCALIZED ORBITALS TO BE PRINTED
*  SYMMETRY - SYMMETRY CONDITIONS TO BE IMPOSED
*  T=       - A TIME OF  3600.0 SECONDS REQUESTED
*  DUMP=N    - RESTART FILE WRITTEN EVERY  3600.0 SECONDS
*  PM3      - THE PM3 HAMILTONIAN TO BE USED
*****025BY025
```

PARAMETER DEPENDENCE DATA

REFERENCE ATOM	FUNCTION NO.	DEPENDENT ATOM(S)
3	1	4 5 6
3	2	4 5 6

DESCRIPTIONS OF THE FUNCTIONS USED

1	BOND LENGTH	IS SET EQUAL TO THE REFERENCE BOND LENGTH
2	BOND ANGLE	IS SET EQUAL TO THE REFERENCE BOND ANGLE

VECTORS LOCALIZE SYMMETRY PM3

KAORU, MIHO, MAKOTO, NAOKI, MASAOKI, H₂GeGeH₂

ATOM NUMBER (I)	CHEMICAL SYMBOL	BOND LENGTH (ANGSTROMS) NA:I	BOND ANGLE (DEGREES) NB:NA:I	TWIST ANGLE (DEGREES) NC:NB:NA:I	NA	NB	NC
1	GE						
2	GE	1.78000 *			1		
3	H	1.20000 *	120.00000 *		2	1	
4	H	1.20000	120.00000	180.00000	2	1	3
5	H	1.20000	120.00000	0.00000	1	2	3
6	H	1.20000	120.00000	180.00000	1	2	3

CARTESIAN COORDINATES

NO.	ATOM	X	Y	Z
1	GE	0.0000	0.0000	0.0000
2	GE	1.7800	0.0000	0.0000
3	H	2.3800	1.0392	0.0000
4	H	2.3800	-1.0392	0.0000
5	H	-0.6000	1.0392	0.0000
6	H	-0.6000	-1.0392	0.0000

H: (PM3): J. J. P. STEWART, J. COMP. CHEM., 10, 209 (1989).

GE: (PM3): J. J. P. STEWART, J. COMP. CHEM., (ACCEPTED)

RHF CALCULATION, NO. OF DOUBLY OCCUPIED LEVELS = 6

INTERATOMIC DISTANCES

		GE 1	GE 2	H 3	H 4	H 5	H 6
GE	1	0.000000					
GE	2	1.780000	0.000000				
H	3	2.596998	1.200000	0.000000			
H	4	2.596998	1.200000	2.078461	0.000000		
H	5	1.200000	2.596998	2.980000	3.633235	0.000000	
H	6	1.200000	2.596998	3.633235	2.980000	2.078461	0.000000
CYCLE:	1	TIME: 0.15	TIME LEFT: 3599.7	GRAD.: 87.364	HEAT: 79.30022		
CYCLE:	2	TIME: 0.13	TIME LEFT: 3599.6	GRAD.: 4.286	HEAT: 75.93481		

TEST ON GRADIENT SATISFIED

HOWEVER, A COMPONENT OF GRADIENT IS LARGER THAN 1.00

CYCLE: 3 TIME: 0.07 TIME LEFT: 3599.5 GRAD.: 1.056 HEAT: 75.91235

HEAT OF FORMATION TEST SATISFIED

PETERS TEST SATISFIED

VECTORS LOCALIZE SYMMETRY PM3

KAORU, MIHO, MAKOTO, NAOKI, MASAAKI, H2GeGeH2

PETERS TEST WAS SATISFIED IN BFGS OPTIMIZATION

SCF FIELD WAS ACHIEVED

PM3 CALCULATION

VERSION 6.02
92-05-29

FINAL HEAT OF FORMATION = 75.91056 KCAL

TOTAL ENERGY = -233.83203 EV
ELECTRONIC ENERGY = -501.03270 EV
CORE-CORE REPULSION = 267.20067 EV

IONIZATION POTENTIAL = 9.38695
NO. OF FILLED LEVELS = 6
MOLECULAR WEIGHT = 149.212

SCF CALCULATIONS = 9
COMPUTATION TIME = 0.558 SECONDS

ATOM NUMBER (I)	CHEMICAL SYMBOL	BOND LENGTH (ANGSTROMS) NA:I	BOND ANGLE (DEGREES) NB:NA:I	TWIST ANGLE (DEGREES) NC:NB:NA:I	NA	NB	NC
-----------------------	--------------------	------------------------------------	------------------------------------	--	----	----	----

1	GE						
2	GE	1.97214	*			1	
3	H	1.48507	*	122.01392	*		1
4	H	1.48507		122.01392	180.00000	2	1 3
5	H	1.48507		122.01392	0.00000	1	2 3
6	H	1.48507		122.01392	180.00000	1	2 3

INTERATOMIC DISTANCES

		GE 1	GE 2	H 3	H 4	H 5	H 6

GE	1	0.000000					
GE	2	1.972141	0.000000				
H	3	3.033154	1.485075	0.000000			
H	4	3.033154	1.485075	2.518447	0.000000		
H	5	1.485075	3.033154	3.546692	4.349896	0.000000	
H	6	1.485075	3.033154	4.349896	3.546692	2.518447	0.000000

EIGENVECTORS

ROOT NO.		1	2	3	4	5	6
		-14.97572	-14.61060	-13.72871	-11.76333	-11.58344	-9.38695
S GE	1	-0.48511	0.28536	0.00000	-0.09780	0.00000	0.00000
PX GE	1	-0.16062	-0.37144	0.00000	-0.63072	0.00000	0.00000
PY GE	1	0.00000	0.00000	0.52887	0.00000	0.48039	0.00000
PZ GE	1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.70711
S GE	2	-0.48511	-0.28536	0.00000	-0.09780	0.00000	0.00000
PX GE	2	0.16062	-0.37144	0.00000	0.63072	0.00000	0.00000
PY GE	2	0.00000	0.00000	0.52887	0.00000	-0.48039	0.00000
PZ GE	2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.70711
S H	3	-0.34559	-0.37457	0.33189	0.21520	-0.36690	0.00000
S H	4	-0.34559	-0.37457	-0.33189	0.21520	0.36690	0.00000

S	H	5	-0.34559	0.37457	0.33189	0.21520	0.36690	0.00000
S	H	6	-0.34559	0.37457	-0.33189	0.21520	-0.36690	0.00000

ROOT NO.	7	8	9	10	11	12
	-3.29857	-1.35276	0.39292	0.74435	2.92140	3.48954

S	GE	1	0.00000	0.22638	0.00000	0.00000	-0.50508	0.60607
PX	GE	1	0.00000	0.59968	0.00000	0.00000	0.27639	-0.04911
PY	GE	1	0.00000	0.00000	0.46936	0.51887	0.00000	0.00000
PZ	GE	1	0.70711	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

S	GE	2	0.00000	-0.22638	0.00000	0.00000	-0.50508	-0.60607
PX	GE	2	0.00000	0.59968	0.00000	0.00000	-0.27639	-0.04911
PY	GE	2	0.00000	0.00000	0.46936	-0.51887	0.00000	0.00000
PZ	GE	2	-0.70711	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

S	H	3	0.00000	-0.21110	-0.37397	0.33969	0.29026	0.25521
---	---	---	---------	----------	----------	---------	---------	---------

S	H	4	0.00000	-0.21110	0.37397	-0.33969	0.29026	0.25521
---	---	---	---------	----------	---------	----------	---------	---------

S	H	5	0.00000	0.21110	-0.37397	-0.33969	0.29026	-0.25521
---	---	---	---------	---------	----------	----------	---------	----------

S	H	6	0.00000	0.21110	0.37397	0.33969	0.29026	-0.25521
---	---	---	---------	---------	---------	---------	---------	----------

NET ATOMIC CHARGES AND DIPOLE CONTRIBUTIONS

ATOM NO.	TYPE	CHARGE	ATOM ELECTRON DENSITY	
1	GE	0.2033	3.7967	
2	GE	0.2033	3.7967	
3	H	-0.1016	1.1016	
4	H	-0.1016	1.1016	
5	H	-0.1016	1.1016	
6	H	-0.1016	1.1016	
DIPOLE	X	Y	Z	TOTAL
POINT-CHG.	0.000	0.000	0.000	0.000
HYBRID	0.000	0.000	0.000	0.000
SUM	0.000	0.000	0.000	0.000

CARTESIAN COORDINATES

NO.	ATOM	X	Y	Z
1	GE	0.0000	0.0000	0.0000
2	GE	1.9721	0.0000	0.0000
3	H	2.7594	1.2592	0.0000
4	H	2.7594	-1.2592	0.0000
5	H	-0.7873	1.2592	0.0000
6	H	-0.7873	-1.2592	0.0000

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

0.65265	1.12315	1.02095	1.00000	0.65265	1.12315	1.02095	1.00000
1.10163	1.10163	1.10163	1.10163				

NUMBER OF ITERATIONS = 5
LOCALISATION VALUE = 2.985925727

NUMBER OF CENTERS (COMPOSITION OF ORBITALS)

2.0074	H	3	54.64	GE	2	44.67
2.0074	H	4	54.64	GE	2	44.67
2.0074	H	6	54.64	GE	1	44.67
2.0074	H	5	54.64	GE	1	44.67
2.0271	GE	2	49.66	GE	1	49.66
2.0000	GE	2	50.00	GE	1	50.00

LOCALIZED ORBITALS

ROOT NO.	1	2	3	4	5	6
	-13.42452	-13.42451	-13.42451	-13.42451	-12.96374	-9.38695
S GE 1	0.01939	0.01939	0.30475	-0.30474	-0.37394	0.00000
PX GE 1	0.05650	0.05650	-0.31494	0.31494	-0.59734	0.00000
PY GE 1	0.02424	-0.02424	-0.50463	-0.50463	0.00000	0.00000

PZ GE	1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.70711
S GE	2	0.30475	0.30475	0.01939	-0.01939	-0.37394	0.00000
PX GE	2	0.31494	0.31494	-0.05650	0.05650	0.59734	0.00000
PY GE	2	0.50463	-0.50463	-0.02424	-0.02424	0.00000	0.00000
PZ GE	2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.70711
S H	3	0.73921	0.04042	0.03275	0.00226	-0.04095	0.00000
S H	4	0.04042	0.73921	-0.00226	-0.03275	-0.04095	0.00000
S H	5	-0.00226	0.03275	0.04042	-0.73921	-0.04095	0.00000
S H	6	0.03275	-0.00226	0.73921	-0.04042	-0.04095	0.00000

TOTAL CPU TIME: 0.58 SECONDS

== MOPAC DONE ==

2) ヒスタミンの入力データ例

PM3 VECTORS PI SYMMETRY
Histamine Geometry Optimization / Mika Tani

C	0.0000000	0	0.000000	0	0.000000	0	0	0	0
C	1.4000000	1	0.000000	0	0.000000	0	1	0	0
N	1.3500000	1	105.000000	1	0.000000	0	1	2	0
N	1.3500000	1	105.000000	1	0.000000	0	2	1	3
C	1.3500000	1	109.000000	1	0.000000	0	3	1	2
C	1.5000000	1	130.000000	1	180.000000	0	1	2	4
C	1.5500000	1	116.000000	1	180.000000	1	6	1	2
N	1.5200000	1	116.000000	1	0.000000	1	7	6	1
H	1.0000000	1	126.000000	1	180.000000	0	5	4	3
H	1.0000000	1	126.000000	1	180.000000	0	4	2	5
H	1.1000000	1	130.000000	1	180.000000	0	2	1	4
H	1.1000000	1	109.500000	1	120.000000	0	6	1	7
H	1.1000000	0	109.500000	0	-120.000000	0	6	1	7
H	1.1000000	1	109.500000	1	120.000000	0	7	6	8
H	1.1000000	0	109.500000	0	-120.000000	0	7	6	8
H	1.0300000	1	111.558820	1	180.000000	1	8	7	6
H	1.0300000	0	111.558820	0	120.000000	0	8	7	16
H	1.0300000	0	111.558820	0	-120.000000	0	8	7	16
O	0.0000000	0	0.000000	0	0.000000	0	0	0	0

12	1	13
14	1	15
16	1	17 18
12	2	13
14	2	15
16	2	17 18
0	0	0

§ 9. 参考文献

- 1) a : 佐々木喜男、高木達也、田中明人、都倉亮道、大阪大学大型計算機センターニュース 1985, 14(4), 103 ; b : 高木達也、田中明人、松尾三四郎、前田重雄、前崎博信、谷美香、佐々木喜男、大阪大学大型計算機センターニュース、1987, 16(4), 83 ; c : 高木達也、谷美香、村埜賢司、清水尚人、平井淳一、藤原英明、佐々木喜男、大阪大学大型計算機センターニュース、1988, 18(2), 161.
- 2) Tim Clark 著、大澤映二、田辺和俊、杉江正昭、水野正城訳、「計算化学ガイドブック」、丸善、1988.
- 3) 平野恒夫、田辺和俊編、「分子軌道法MOPACガイドブック」、海文堂、1991.
- 4) Bingham, R.C.; Dewar, M.J.S.; Lo, D.H. *J.Am.Chem.Soc.* 1975, 97, 1285.
- 5) Dewar M.J.S.; Thiel, W. *J.Am.Chem.Soc.* 1977, 99, 4899, 4907.
- 6) Dewar M.J.S.; Zebisch, E.G.; Healy, E.F.; Stewart J.J.P. *J.Am.Chem.Soc.* 1985, 107, 3902.
- 7) Stewart J.J.P. *J.Comput.Chem.* 1989, 10, 209, 221.

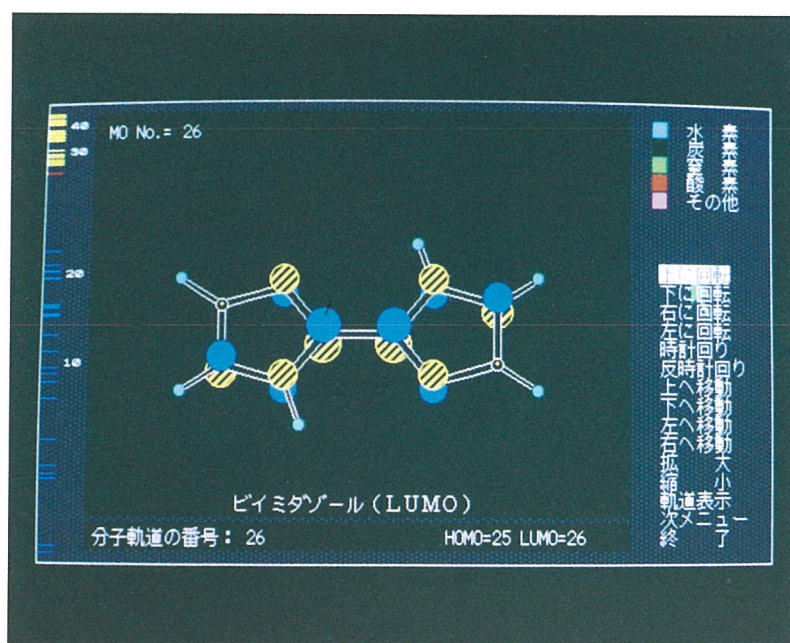
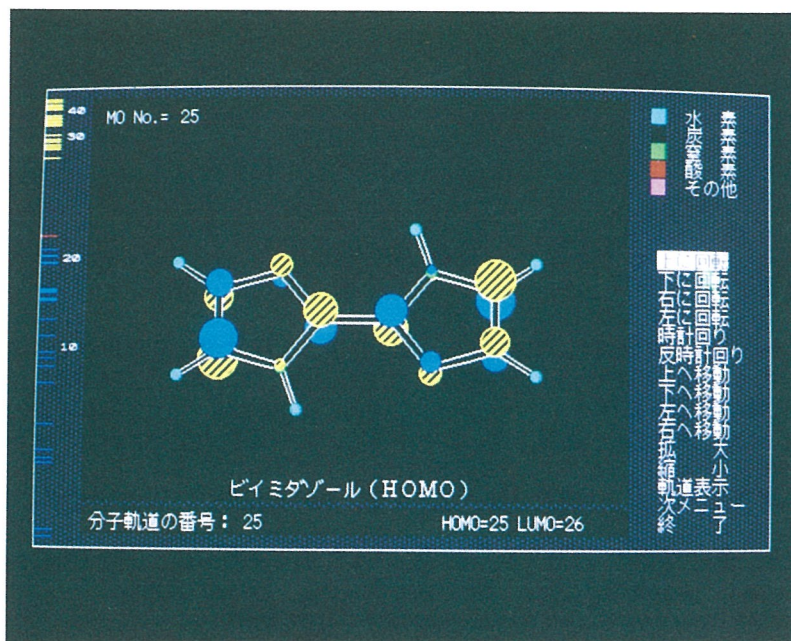


図4 GLCAO の出力例 (biimidazole の HOMO と LUMO)

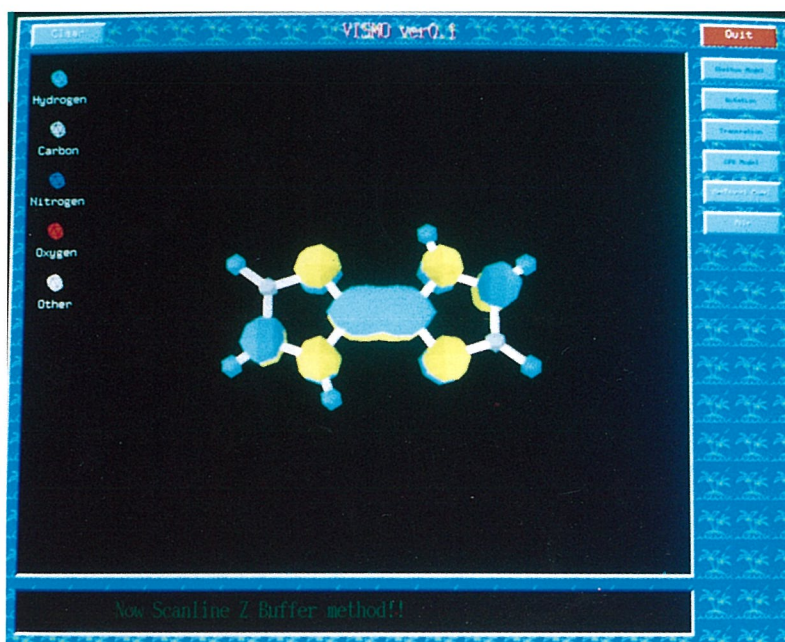
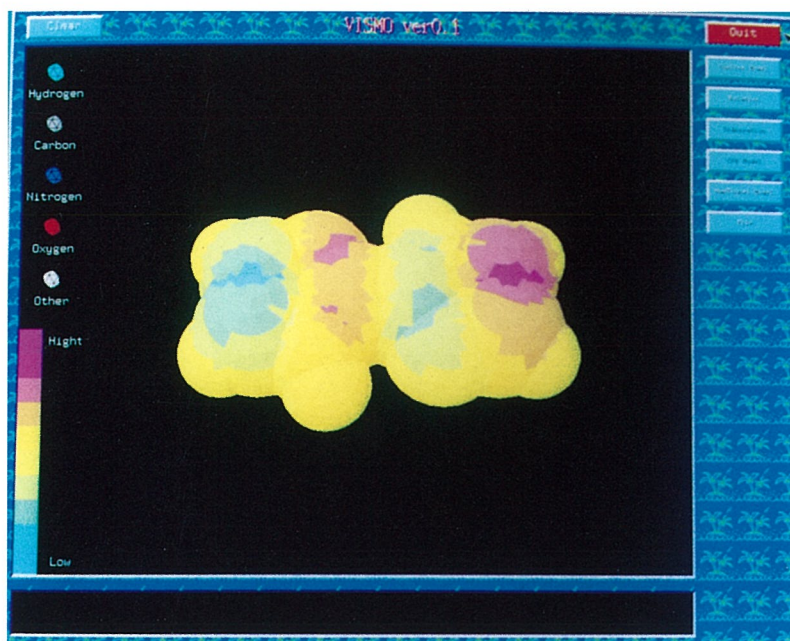


図5 VISMO (現在開発中) による biimidazole の HOMO と LUMO