



Title	分子科学用プログラムの開発、移植、及び改良： MOPAC93の簡単な使用方法
Author(s)	高木, 達也
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1998, 109, p. 65-76
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66295
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

平成 9 年度 ライブラリ・プログラム研究開発計画成果報告

分子科学用プログラムの開発、移植、及び改良

～MOPAC93の簡単な使用方法～

大阪大学 遺伝情報実験施設 高木達也¹⁾

§ 1. はじめに

半経験的分子軌道計算プログラム、MOPAC93 revision2が世に出てからもう随分になります。MOPAC97が出現しているこの時期に、何を今更といわれるかもしれませんか、実は、大阪大学大型計算機センターでは、未だ、MOPAC93 Rev.2が使える状況にはなっていませんでした。種々の経緯から、元来、量子化学の素人である筆者が、大阪大学大型計算機センター・ライブラリプログラム研究開発課題として、スーパーコンピュータ、SX-4Rへの移植作業を行っていました。今回、長い試用期間をへて、ほぼ、バグも洗い出されたと思われますので、本格的公開に踏み切りました。

MOPAC93で計算可能な分子軌道計算法に関しては、専門の異なる筆者が今更解説するまでもないでしょうが、プログラムとしては、半経験的分子軌道法の多くの機能を取り入れた総合半経験的分子軌道計算プログラムパッケージとでも呼ぶべきもので、おおよそ、以下の機能を持っています。

1) ハミルトンian

- MINDO/3
- MNDO
- AM1
- MNDO/PM3

2) 近似法

- 制限 Hartree-Fock 近似 (RHF)
- 非制限 Hartree-Fock 近似 (UHF)
- 配置間相互作用法 (CI)
- 遷移状態の計算
- 基準振動計算
- 热力学諸量の計算
- 固有反応座標等の計算

3) その他の手法

- 分子分極率の計算
- COSMO 法等による溶媒中での計算
- 高分子のバンド計算

* : 平成 10 年 5 月 1 日から、大阪大学大学院薬学研究科

このほか、実に多様な機能を持っていますが、とてもここでそのすべてを解説することはできません。幸い、詳しい日本語の参考文献¹⁾が出版されていますので、そちらをご参照願います。

以下では、MOPAC93の簡単な使用方法と、近年使用可能になった COSMO 法による計算結果及び、ほとんど同様な入力データで使用可能な GAUSSAIN94の簡単な使用方法²⁾について、解説したいと思います。なお、現在のところ、大阪大学大型計算機センターでは、MOPAC93 Rev. 2は、SX-4R 上でのみご利用になれます。あしからずご了承のほど、お願ひいたします。

§ 1. MOPAC93の入力データ

MOPAC93の入力様式は、ver. 6.03の時からほとんど変わっていません。いくつかキーワード（機能）が付け加えられただけと考えていただいていいでしょう。

表 1 [H₃N-CH₃]⁺ + I⁻ の MOPAC93における入力データ

入力データ										行番号
NOINTER PM3 SYMMETRY										a
NH3-CH3+I-										b
hypothetical calculation										c
C	0.00000000	0	0.0000000	0	0.0000000	0	0	0	0	1
I	3.00000000	1	0.0000000	0	0.0000000	0	1	0	0	2
H	1.10000000	1	65.0000000	1	0.0000000	0	1	2	0	3
H	1.10000000	0	65.0000000	0	120.0000000	0	1	2	3	4
H	1.10000000	0	65.0000000	0	-120.0000000	0	1	2	3	5
XX	9.90000000	0	90.0000000	0	0.0000000	0	1	2	3	6
N	1.50000000	1	90.0000000	0	180.0000000	0	1	6	2	7
H	1.00000000	1	110.0000000	1	180.0000000	1	7	1	6	8
H	1.00000000	0	110.0000000	0	120.0000000	0	7	1	8	9
H	1.00000000	0	110.0000000	0	-120.0000000	0	7	1	8	10
										d
3	1	4	5							e
3	2	4	5							f
8	1	9	10							g
8	2	9	10							h
										i

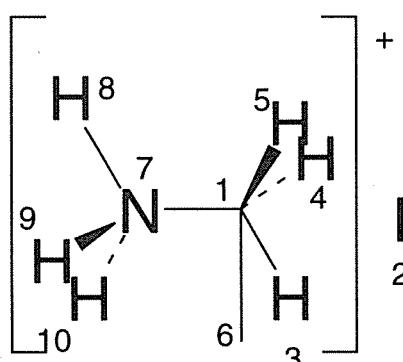


図 1 [H₃N-CH₃]⁺ + I⁻

ですが、今一度、表 1 = 図 1 のデータを見ながら、簡単に入力データの作成方法をおさらいしてみましょう。

a) キーワードの行。ここでは、PM3法（I 陰イオンが絡むときは PM3法がいいようです）を用い、分子の対称性（この場合 C3v）を利用するため、後で対称性に関するデータを入力することを指示しています (SYMMETRY)。また、出力ファイルに原子間距離を含まないことも指示しています (NOINTER)。

b, c) コメント行です。

- 1) ここから分子の構造を入力します。もっとも、X線構造解析等で水素原子まで含めて精密な分

子の構造が決定されている例はそう多くはありませんので、この例のように、最初は少々いい加減に入力し、エネルギーがもっとも安定になるように構造を最適化する例が多いです。分子の構造を入力するには、まず、分子（この場合、 $[H_3N-CH_3]^+ + I^-$ ）を構成する各原子に番号をつけます。できるだけ、分子構造の入力が行い易いように番号をつけるのがみそですが、なれてくると何となく判ります。最初は、中心付近の骨格原子から、番号をつけていって下さい。この例では、炭素原子に1番をつけました。この入力方法では、1番目の原子は、自動的に、座標軸の原点におかれます。

- 2) 2番目の原子は、自動的に、x軸上におかれます。ただし、x軸は無限に伸びていますから、x軸のどの辺にあるのかを示す必要があります。それを示しているのが、5.5という数字で、自動的に、1番目の原子との距離（オングストローム単位）を示しています。5.5という数字の後ろの「1」は、この原子間距離を、最も分子のエネルギーが安定になるように最適化せよという指令を意味しています。
- 3) 3番目の原子は、自動的にxy平面上におかれます。これもxy平面は広いので、平面上のどこに置くかを指定しなければなりません。指定は、2番目の原子（ヨウ素）との原子間距離、2番目、1番目の原子（炭素）との間で作る角度（ $\angle 3\ 1\ 2 = 65^\circ$ ）で行われています。どの原子との距離を指定するのか、どの原子とどの原子との角度を入れるのかを指定するのは、行の右端（この行では120となっている）に書かれます。1で、（この原子は3だから）距離3-1を定義していることを、1 2で、 $\angle 3\ 1\ 2$ を定義していることを規定しています。
- 4) 4番目の原子からは、もう、何平面上に置かれるとかいった規制はありません。自由になった分は、いろいろ入力しなければならないことで帳消しになりますが・・・。もうおわかりと思いますが、この例では、4番目の原子は、1番目の原子（炭素）と1.1Åの距離にあり、 $\angle 4\ 1\ 2$ が 65° で有ることを示しています。ただしこれだけでは、4番目の原子（水素）の座標を決定することはできません。C-I軸の周り360度、どこに存在しても構わぬことになってしまいます。そこで、「2面角」（dihedral angle, twist angle）を指定してやります。この行では、右端は、1 2 3となっていますので、2面角 $\angle 4\ 1\ 2\ 3$ を定義しています。2面角は、この場合、図2のように、Newman投影図を描くとわかりやすいです。この場合、原子1から2を見通したNewman投影図を描き、原子4から原子3までの角度のことを意味します。ふつう、左回りを正にとりますので、この場合、120度になります。ところで、この原子や5番目の原子は、どの構造パラメーターも「最適化しない」むね、0が指定されています。3番目の水素の構造パラメータだけ最適化して、4や5は最適化しないというのは不公平ではないかと思われるかもしれません、これは、あとで、対称性の入力のところで、4番目の水素の原子間距離は3番目の水素のそれと同じだと

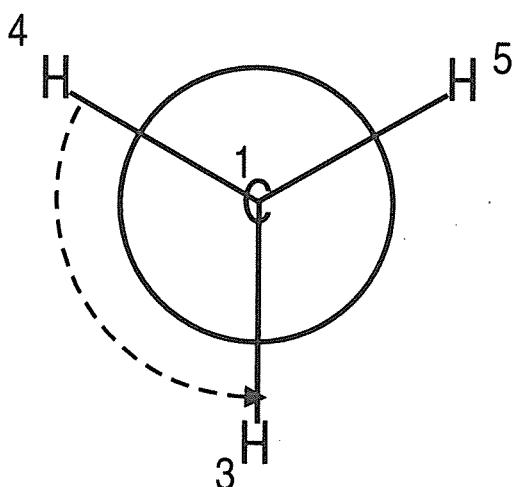


図2 2面角の定義

指定するので、ほおっておいても構わないのです。

5) 4 の水素原子とほとんど同じ入力データですが、2面角だけが、-120度になります。240度でも同じです。

6) 一般に、このような入力方式のことを Z-Matrix 方式と呼びますが、この方式の最大の欠点は、エチレンのように、直線分子の入力が難しい点です。なにしろ、「2面角」を定義できなくなってしまいます。もちろん、原子間角を180度にすれば、後は何とかしてくれるようなソフトもありますが、通常は、この6番目の原子のように、「ダミー」の原子を定義しておくのが便利です。この原子は、もちろん、実体を伴わない原子ですので、原子記号としてはXXが用いられています。

7-10) 同様に構造の入力を行います。

d) ブランク行で、構造データの入力の終了を指示しています。

e) ここから、対称性を指定するデータになります。この行では、左から3, 1, 4, 5と数字が指定されていますが、これは、「3番目の原子の1番目の構造パラメーター（原子間距離。ちなみに、2が角度で3が2面角）は、4番目と5番目の原子の1番目の構造パラメーターと同じです」ということを意味しています。同じパラメーターが多数ある時は、4, 5の後に、11, 12, …と続けければいいのですが、1行には5つの原子までにしておいて下さい。それ以上ある時は、別の行で、同様に指定します。

f-h) eに同じです。

i) ブランク行で、データの終了を示しています。キーワードに、これ以上データの入力を促すところはありませんから、これで、全データの記述が終了したことになります。

さて、この計算を行った結果は、どう記述されるでしょうか。次ページから示しました（付録の1, 2を参照下さい）。

§ 2. COSMO 法の結果

このような変?なデータ例を出したのは、COSMO 法の効果をお示しするためですが、論より証拠。 $\text{CH}_3\text{-I} + \text{NH}_3$ のシステムと、 $[\text{H}_3\text{N-CH}_3]^+ + \text{I}^-$ のシステムで、真空中と水溶液中での計算結果を示してみます（表2）。

表2 COSMO法 (MNDO/PM3) による計算例

	$\text{H}_3\text{N} + \text{H}_3\text{C-I}$		$[\text{H}_3\text{N-CH}_3]^+ + \text{I}^-$	
	真空中	水中	真空中	水中
生成熱/kJ mol ⁻¹	23.79	1.69	48.40	-306.6

** MOPAC 93 (c) Fujitsu
**

PM3 CALCULATION RESULTS

* *
* MOPAC 93.01 CALC'D. Tue Apr 14 15:05:02 1998
* SYMMETRY - SYMMETRY TO BE IMPOSED
* T= - A TIME OF 720000.000 SECONDS REQUESTED
* DUMP=N - RESTART FILE WRITTEN EVERY 720000.000 SECONDS
* PM3 - THE PM3 HAMILTONIAN TO BE USED
* NOINTER - INTERATOMIC DISTANCES NOT TO BE PRINTED
*****125BY125

PARAMETER DEPENDENCE DATA

REFERENCE ATOM	FUNCTION NO.	DEPENDENT ATOM(S)
3	1	4 5
3	2	4 5
8	1	9 10
8	2	9 10
8	8	

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
NOINTER PM3 SYMMETRY
NH3-CH3+-I-
hypothetical calculation

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	C	3.00000 *	65.00000 *	120.00000	1	2	3
2	I	1.10000 *	65.00000 *	120.00000	1	1	2
3	H	1.10000	65.00000	-120.00000	1	2	3
4	H	1.10000	90.00000	0.00000	1	2	3
5	H	1.10000	1.50000 *	90.00000	180.00000	1	6
6	XX	9.90000	1.00000 *	110.00000 *	180.00000	7	1
7	N	1.50000 *	110.00000 *	110.00000	120.00000	7	1
8	H	1.00000	1.00000				
9	H	1.00000					

RHF CALCULATION, NO. OF DOUBLY OCCUPIED LEVELS = 11
CYCLE: 1 TIME: 0.186 TIME LEFT: 20.00H GRAD.: 16.223 HEAT: 11.85481
CYCLE: 2 TIME: 0.093 TIME LEFT: 20.00H GRAD.: 14.432 HEAT: 11.64956
CYCLE: 3 TIME: 0.094 TIME LEFT: 20.00H GRAD.: 3.556 HEAT: 11.57848
TEST ON GRADIENT SATISFIED
PETERS TEST SATISFIED

MOLECULAR POINT GROUP : C3v
-
NOINTER PM3 SYMMETRY
NH3-CH3+-I-
hypothetical calculation

PETERS TEST WAS SATISFIED IN BFGS OPTIMIZATION SCF FIELD WAS ACHIEVED

PM3 CALCULATION
MOPAC 93.01
Tue Apr 14 15:05:03 1998

NET ATOMIC CHARGES AND DIPOLE CONTRIBUTIONS

FINAL HEAT OF FORMATION =	11.56633 KCAL =	48.39354 KJ
TOTAL ENERGY	=	-662.07144 EV
ELECTRONIC ENERGY	=	-1755.03376 EV
CORE-CORE REPULSION	=	1092.96232 EV
IONIZATION POTENTIAL	=	4.98549
NO. OF FILLED LEVELS	=	11
MOLECULAR WEIGHT	=	158.970
SCF CALCULATIONS =		7
COMPUTATION TIME =		0.640 SECONDS

CARTESIAN COORDINATES

MOLECULAR POINT GROUP	:	C _{3v}	EIGENVALUES
1.21462	0.82679	1.15613	1.92217
1.99754			1.97848
0.84819	0.84819	1.15168	1.99754
1.00425			0.99804
1.00426			0.99804

$$\begin{aligned} & -37.43889 - 26.83483 - 20.53742 - 20.53741 - 18.26506 - 14.75228 - 14.75228 \\ & -8.23346 - 8.23346 - 4.98549 - 1.42879 \quad 0.41682 \quad 0.41682 \\ & \end{aligned}$$

TOTAL CPU TIME: 0.66 SECONDS

2. 85051 3. 37556

== MOPAC DONE ==
JOB FINISHED

さて、この種の計算結果の数字がどこまで信用できるかについては、多くの研究例があり、当たり前ですが、ケースバイケースで、信用度は異なってくるようです。COSMO 法はもちろん、誘電率さえわかっていれば他の溶媒にも適用可能ですので、有機溶媒中における化学反応の追跡などには、威力を発揮する場面もあると思われます。とりあえず、COSMO 法の精度に関しましては、ここでは、イオン対形成の方が水中では安定だというのは、定性的には自然な結論でしょう・・と述べる程度にとどめておきたいと思います。詳細は、参考文献等をご参照願います。MOPAC93 Rev. 2では、COSMO 法の他に、Mierutus-Scrocco-Tomasi Solvation Model (必要なキーワードは TOM で、ORT も用いられることが多い) 等の計算も可能になっています。

§ 3. GAUSSIAN94の計算へ

MOPAC93で計算できないような計算を行わみたい場合は、当然、非経験的分子軌道計算を必要とします（もちろん、中には、MOPAC93でしか得られない情報もありますが）。大阪大学大型計算機センターでは、非経験的分子軌道計算のために、AMOSS, GAUSSIAN94, GAMESS のソフトウェアが準備されています。AMOSS の計算例については、別の機会に触れる予定ですので、ここでは、広く普及している GAUSSIAN94²⁾の入力データの作成法についてごく簡単にお話したいと思います・・・と言っても、実は、入力データの作成手順は、MOPAC93 とほとんど変わりません。しかも、世の中には便利なソフトウェア³⁾があり、MOPAC93の入力データファイルを GAUSSIAN94の入力ファイルに変換してくれたりします。もっとも、細かい制御を行うときは、やはり、自分で作成した方が効率的なようです。表1の入力例を GAUSSIAN94におきかえますと、下表3のようになります。

表3 [H3N-CH3]⁺ + I⁻ の GAUSSIAN94における入力データ

%Chk=test	a
#rhf LANL2DZ opt scf=direct	b
comment line	c
0 1	d
C	e
I	f
H 1 r2	1
H 1 r3 2 a3	2
H 1 r3 2 a3 3 120.0	3
H 1 r3 2 a3 3 -120.0	4
X 1 9.9 2 90.0 3 0.0	5
N 1 r7 6 90.0 2 180.0	6
H 7 r8 1 a8 3 180.0	7
H 7 r8 1 a8 3 120.0	8
H 7 r8 1 a8 3 -120.0	9
Variables:	10
r2= 3.0000	f
r3= 1.1000	g
a3= 65.00	h
r7= 1.5000	i
r8= 1.0000	j
a8= 110.00	k

極論すれば、MOPAC93では MNDO か、AM1 か、PM3 か等を選択する必要がありました。GAUSSIAN94では、基底関数を選択する必要があると言う点を除いて後は同じ・・・とも言えるでしょう。この例では、LANL2DZ と呼ばれる有効核ポテンシャルを用いています。一番大きな差異は、MOPAC93では部分対称性の指定を後から行う必要がありました。GAUSSIAN94では、左表のように Z-Matrix 内に変数名を入れておき、後からその初期値を指定するだけですむということです。4番目の水素も 5番目、6番目の水素も、原子間距離を表す変数は r_3 になっていますので、構造計算中、同じ値に

保たれます。a 3、r 8、a 8 も同様です。

§ 4. プログラムの実行方法

MOPAC93 rev. 2 の実行形式プログラムは、/usr/local/appli/mopac93下に、MOPAC93として格納されています。プログラムは、拡張子が.dat のファイルに対してその前のファイル名だけを指定するようになっています。例えば、test.dat という名前のファイルですと、

```
ccsx40>/usr/local/appli/mopac93/MOPAC93 test &
```

と下線部を入力すると、計算が始まり、

test.log 結果出力ファイル

test.arc 重要な結果だけをまとめてあるファイル

が作成されます。分子軌道のグラフィック出力のためにキーワードに GRAPH オプションを指定している場合は、

test.gpt グラフィック出力用データファイル

も作成されます。もっとも、計算の規模からは、nqs を使って、バッチジョブとされることをおすすめします。mopac と言うディレクトリ下にある test.dat と言う名の入力ファイルを実行される場合の簡単なスクリプトファイルを記しますと、以下のようになります。

```
#!/usr/bin/csh
# @$-o /usr1/a60000/mopac/test.molog
# @$-e /usr1/a60000/mopac/test.moerr
# @$-q p4
# @@
setenv F_PROGINF DETAIL
cd mopac
/usr/local/appli/mopac93/MOPAC93 test
```

実行クラスは p4 としてあります。a60000 のところには、利用者のみなさんの user id をお入れ下さい。GAUSSIAN94の実行方法もほぼ同じです（コマンドは g94）。ただし、

```
setenv g94root /usr/local/appli
source $g94root/g94/bsd/g94.login
```

のコマンドを、g94コマンドの前に実行してやる必要があります。なお、この nqs スクリプト例は、/usr/local/appli/mopac93/runnqs に格納されています。

§ 6. 分子軌道のグラフィック表示

MOPAC93の出力データは、計算機センターの SGI IRIS Indigo2マシン上で動作するプリポストプロセッサー、Cerius2で視覚化可能です。Cerius2を使用している際の画面全体を図3に、Cerius2で表示された[CH₃-NH₃]₊の LUMO の分子軌道等値曲面の図を、図4に示しました。この際、キーワードに GRAPH オプションを指定することを忘れないで下さい。GRAPH オプションにより生成される.gpt ファイルが必須です。この分子軌道を表示させる手順は、

- 1) ccindigo2の前に座り、login する。
- 2) UNIX シェルを開き、cerius2とコマンド投入すると、暫くして、cerius2の起動画面が現れる。
- 3) 起動時点では、おそらく右上に現れている、Visualizer ウィンドウの左上の「File」

メニューをクリックし、「Load Model」を指定しますと、Load Model ウィンドウが現れます。右上の File Format で MOPAC を指定しますと、MOPAC93の .arc 又は .dat ファイルが表示されますので、いずれかを指定し、読みとります。うまく読めれば、分子のワイヤーモデルが表示されます。このモデルは、Visuallizer ウィンドウの左上の Stick バーから、Ball & Stick モデルなど、いろいろ選択することができます。なお、モデル表示ウィンドウ中で、マウスを右クリックしながら動かすと、モデルが回転しますし、中クリックしながら動かすと、平行移動、また、シフトキーを押しながら中クリックすると、拡大縮小が可能です。

- 4) Visuallizer ウィンドウの右やや上に、default では、「BUILDERS1」と表示されているバーがあると思います。これをマウスクリックすると、たくさんのメニューが現れますので、QUANTUM1を指定します。下に表示されたメニューから、MOPAC を選択します。
- 5) 現れた MOPAC メニューから、Analyse→Files をマウスで指定しますと、MOPAC File Analysis メニューが現れ、MOPAC93の出力結果の .out ファイルを指定するよう要求されますので、先に指定した.dat 又は .arc ファイルに対応する .out ファイルを指定します。.gpt ファイルも含めて、すべてのファイルは同じディレクトリ下に存在し、かつ、拡張子以外の名前は同一にしておくのが基本です (default では、同一になるような仕組みになっています)。
- 6) もう一度 Visuallizer ウィンドウメニューに戻り、Analyse→Orbitals を指定すると、MOPAC Orbitals ウィンドウが現れ、計算された起動が、エネルギーの安定な順に、固有値付きで表示されます。どれか分子軌道を選択し、calculate ボタンをクリックすると、分子軌道が表示されます。

と、おおよそこんなところです。もともと、当研究開発計画は、あくまでも移植が目的で、視覚化機能の検討は対象に入っていませんでしたし、GAUSSIAN94は更に対象外でしたので、筆者の情熱が今少し不足しているせいかもしれません、GAUSSIAN94の結果を Cerius2で表示させることには成功していません（本来可能なはずですので、どなたか成功した方がおられましたら、ご教示いただけましたら幸いです）。GAUSSIAN94の計算結果を視覚化するためには、他の手段もありますが、また別の機会に触れたいと思います。

§ 6. 利用者の義務

MOPAC93 Rev. 2は、version 6と異なり、富士通（株）が著作権を有しています。従って、ご利用になる場合、或いは、ご利用になって得られた結果を報告される場合、幾つかの条件が存在します。どうか、ご了承下さい。

1. 大阪大学大型計算機センターの MOPAC93を利用して得られた結果を論文等に発表される際には、大阪大学大型計算機センターの MOPAC93 Revision2を用いたことを明

記の上、以下の記述を含むようにして下さい。

- 1) the name of MOPAC93
- 2) The source; Dr. J. J. P. Stewart and Fujitsu Limited, Tokyo, Japan
- 3) the copyright notice; All Reserved, Copyright

FUJITSU LIMITED 1993

- 4) 今あなたが読んでおられる、この文献。
2. いかなる理由があろうとも、また、状況のいかんを問わず、大阪大学大型計算機センターに存する MOPAC93を営利目的には使用しないで下さい。また、大阪大学大型計算機センターのユーザーでない人に使用させないで下さい。
3. もとより、ソースコードは公開していませんが、ソースコードに限らず、実行形式プログラム（オブジェクトコード）も含めて、大阪大学大型計算機センターに存する MOPAC93の複製、改変、翻訳を行わないで下さい。また、逆アセンブルなども行わないで下さい。

なお、富士通（株）は、大阪大学大型計算機センター利用者に対しても、MOPAC93について、商品性、特定目的への適合性などの保証を行うものではなく、その瑕庇については、いかなる責任も負うものではないことを、ご承知おき下さい。結果の吟味は、ご利用になられた方ご自信でお願いいたします。

§ 7. 謝辞

最後になりましたが、当研究開発計画をお認め頂きました、大阪大学大型計算機センター プログラムライブラリ研究開発計画委員会に深謝いたします。また、プログラム MOPAC93 の大阪大学大型計算機センターへの移植をご許可頂きました、富士通株式会社に深謝いたします。

さらに、このプログラムの移植作業期間中、多くの方々に御試用いただき、バグ報告、その他、多くのご意見を頂きました。あまりに多くの方々ですので、ここにお名前をあげさせていただけないのが大変残念でありますが、この場を借りまして、厚く御礼申し上げます。

§ 8. 参考文献等

- 1) 平野恒夫、田辺和俊、「分子軌道法 MOPAC ガイドブック」 2訂版、海文堂 (1994)
- 2) 詳しくは、花村光泰、増田典雄、「非経験的分子軌道プログラム、GAUSSIAN94の利用法」、大阪大学大型計算機センターニュース、vol. 26(4), pp. 63-71 (1997).
- 3) Babel version 1.1; Walters, P. and Stahl, M. (1994).

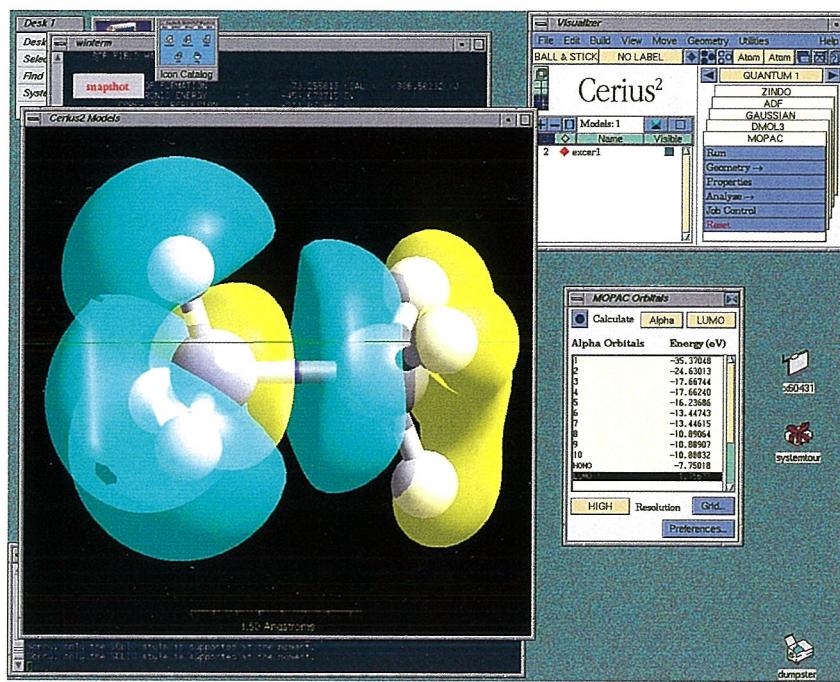


図3 Cerius2使用中の Indigo2の画面の全体像



図4 MOPAC93で計算された、 $[H_3N-CH_3]^+$ の LUMO の等値曲面

§ 9. 付録

- 1) 今回公開する実行形式プログラムは、最大、重原子 125 個、水素原子 125 個が扱えます。また、最大計算機時間は 20 時間に設定してあります。これでも、現在の p4 クラスで実行可能です。並列化等は行っていませんので、p8 等のクラスで実行するのは、課金面で不利になります。なお、これよりさらに大規模な計算を行われたいときは、筆者あてにご連絡下さい。
- 2) 必要な計算機時間については、計算の種類、規模、構造等の初期値に大きく依存するため、あまり確実なことをお伝えできませんが、図 1 のようなシステムでは、うまくすれば、0.66 秒ですべての計算が終了しています。
- 3) 移植の際には、clock ルーチンなどの改訂の他、幾つかのサブルーチンのコンパイラオプションを変更しています。具体的には、

jcarin.f	-Nv
ef.f	-NO

の 2 つで、これ以外はすべて default のオプションでコンパイルされています。

- 4) test data も、/usr/local/appli/mopac93 下に、幾つか格納されています。ご参考になりましたら幸いです。
- 5) バグ、その他、何かお気づきの点がありましたら、筆者 (ttakagi@phs.osaka-u.ac.jp) までご連絡お願ひいたします。質問等に関しましては、幸い、筆者はプログラム相談員でもありますので、questions@center.osaka-u.ac.jp までお寄せいただきますと、多くの MOPAC93 利用者の皆様の参考にもなるかと思いますので、宜しくお願ひいたします。