

4. Ghemical マニュアル抜粋 MOPAC の入出力に関する機能についてだけ説明します

0

1. 主なコマンド <MOPAC7 の入出力に関する項目だけ抜粋して訳者の注釈を加筆>

main menu/main toolbar/popup-menu(右クリックで表れる)で表示されます

shift/ctrl キー併用で起動する隠れコマンドがあります

1.1 main menu (画面の左上の FILE をクリックするとリストが表れます、目的の項目をクリックします)

①FILE

New: 新しいプロジェクトの開始

Open: ~.gpr ファイルのプロジェクトを開く

Save: プロジェクトを~.gpr ファイルとして保存する

End: プログラムを終了します

②HELP 省略(以下「省略」と書くのを省略するので項目番号が飛びます)

1.2 main tool bar (画面の 2 段目にある目的の画像をクリックして選択します)

①Draw<鉛筆の図>: 分子描画面で原子の付加/変更はクリック、結合の付加/変更はドラッグで行います。

②Erase<消しゴムの図>: 分子描画面で原子の消去はクリック、結合の消去はドラッグで行います。

③Select<花火の図>: 選択したい原子をクリックします。選択されている原子をクリックすると選択マークが消えます。

④Zoom <虫メガネの図>: 分子の表示を拡大/縮小します(他の動作を行なわないと機能しないことあり)。

⑤Clipping<二重正方形の図>: グラフィック表示の切り抜き面を設定します。?

⑥Translate tools<座標の図>: 表示をしている分子の視点を平行移動させる。

⑦Orbital tools <分子軌道の図>: 表示分子を中心として視点を動かします。宇宙船から地球を見るように。

⑧Rotate tools<回転の図>: 視点を回転させます(分子が回転するように見えます:座標数値は不変)。

⑨Measure<両矢印の図>: 距離/角度/二面角を定義するために原子をクリックします。(Select ツールと同様に)。

⑩Period table<周期律表の図>: 周期律表が表示されます。目的とする元素をクリックして選択します。

⑪結合<4 種類の結合の図>: 単/二重/三重/共役結合から結合方法を選択します

⑫Setup<MM の図>: MM 等の計算方法を選択します

1.3 ポップアップメニュー(マウスの右ボタンを押すと popup-menu が表示)←MOPAC7 の入出力に関する項目だけ書きます

①FILE:

Import MOPAC 様式 Z-matrix の入力に使用; 項目 2.6 参照

Export MOPAC 様式 Z-matrix の出力に使用; 項目 2.7 参照

②Select: 選択した原子の移動が可能; 項目 2.2 参照

③Render: Label Mode:Index を選択すると原子の番号/元素名を表示します; 項目 2.5 参照

⑤Compute: Geometry Optimization MM 等による簡単な最適構造化をします; 項目 2.4 参照

⑧Build: Hydrogens 水素の追加/消去を行いません; 項目 2.3 参照

2

2.1 操作例:エタノール分子

ステップ 1: まず新しいプロジェクトを開きます。このため、ファイルメニューをクリックし、「New」を選んでください。

ステップ 2: 左上のツールバーから「Draw」を選んでください。ドロップツールは、結合と原子を付加する法です。

ステップ 3: 原子/結合を分子に追加しはじめてください。原子タイプの既定値は炭素です。原子を分子に追加するために、その原子を追加したい所でクリックします。2 つの原子間の結合を描くために結合の初めの原子の所で左クリックし、マウスを 2 番目の原子にドラッグしてください。次にマウスボタンを離してください。別な方法として既存の原子を左クリックし、マウスを 2 番目の原子を置きたい所にドラッグし、それからマウスボタンを離すことによって同時に原子と結合を作成することもできます。

ステップ 4: 現時点で炭素主鎖が作成されているので、未だ描かれていない酸素原子を追加します。すべての重い原子 (水素以外)が用意されています。画面の上方にあるツールバーから周期表(period table)ボタンを選びます。周期表のダイアログボックスが表示されます。目的とする元素のボタンをクリックしてください。

ステップ 5: 炭素原子が追加された同じ方法で追加の酸素原子を分子に追加します。

ステップ 6: 最後に水素原子を追加します。水素原子追加自動ツールを使って行うことができます(popup-menu 項目 Build/Hydrogens/Add 参照)。水素原子を一つ一つ手動で追加することもできます(異性体を考えて入力する場合)。エタノール分子のすべての原子が追加されました。

ステップ 7: 全ての原子/結合が表示されていますが分子が安定の配座ではありません。Ghemical は構造最適化ツールを使って安定配座にすることができます(項目 2.4 参照)

構造最適化を動かすと、エタノール分子の結合距離/結合角/他の構造的特徴は理想値にセットされます(構造最適化のために使われた分子力学配位場による)。tool bar の「Set the current bond type」ボタンをクリックして結合タイプを変更することもできます。このボタンを押して単/二重/三重/共役のリストから結合タイプを選択します。結合タイプを変更するまで、同じ結合タイプを続けます。共役結合は平行した-と=で描かれます。二重結合と三重結合は各々=と≡で描かれます(MOPAC 計算に結合タイプは使用しませんが、分子構造を説明するためには必要です)。

2.2 選択した原子の移動

Moving only some atoms

選ばれた原子だけを動かすことが可能です。ツールバーから選択ツールをクリックした後動かしたい原子を選択して、ボタンをクリックして使いたいツール(translate XY, orbit XY 等)を選んでください。ドラッグすると選択した原子だけが動きます。

2.3

Add Hydrogen(水素追加)ツール

水素をすべての未結合の結合位に追加するために追加水素ツールを使うことができます。すべての非水素原子を分子に追加した後に、右クリックし、popup-menu から構造を選んでください。このメニューから水素を選んでください、次に追加を選んでください。自動的に水素が分子に追加されます。より正確な構造にするため最適化を行います。Ghemical は、安定した配座(炭素の場合の四面体)に水素を配置します。

Remove Hydrogens (水素の消去)

すべての水素原子を分子から取り除くツールがあります。右クリックし、メニューの「Build」を選び、サブメニューの水素を選び、消去を選ぶことによって作動します。

2.4 構造最適化

構造最適化ツールは、分子の構造を最低のエネルギー構造にします。このツールを作動させるために、右クリックして popup-menu を呼び出してください。そのメニューにある Compute をを選んでください、次に geometry optimization をクリックしてください。geometry optimization と呼ばれるダイアログボックスが現われます。ダイアログボックスに示されている 3 つのテキストボックスは、構造最適化の終点をコントロールします。一般にこの値を変更するのは上級ユーザーだけにした方がいいでしょう。「Muximum number of steps:」の値は、最適化を終わるまで繰り返して計算する最大の回数を行っています。「Gradient cutoff:」の値は、最適化が終わるベクトルの長さを表しています。「Delta E Cutoff:」の値はステップの間のポテンシャル・エネルギーを表しています。各々のチェックは各々の値の左のチェックボックスをチェックしないことで実行不可能となります。最適化を始めるために、OK をクリックしてください。分子の配座は各ステップでわずかに変化します。ログボックスにテキストの列がプリントされます。最初の行は現在実行されている最適化のステップを示します。2 番目の行はそのステップの分子のポテンシャル・エネルギーです。この数値は小さくなるのが普通です。3 番目の行は最後のステップの勾配ベクトルの長さです。4 番目の行は、前のステップと現在のステップの間のポテンシャルエネルギーの変化です。行の最終行は、どの終端条件が最適化を終わらせたかを示します。「the n-steps termination test was passed」は、最適化が行われたステップ数を意味しています。これは一般に、最適化がさらに動いた場合、もっと最適な構造を見つけるこ

とができたことを意味しています。最適化がそれらの条件で終わった時に Ghemical は、「the termination test was passed」。または「the delta_e termination test was passed」を表示します。

例: この例はシクロヘキサン構造最適化を示します。最初、この分子は平面であり、結合距離は等しくありません。標準パラメータで構造最適化が動きます。ポテンシャルエネルギー(delta_e)の変化が 1×10^{-7} なので、最適化は 175 回の繰り返しで終わります。

構造最適化ログボックス例: 最適化の後、シクロヘキサン分子はすべての C-C 結合距離が等しい椅子形配座になります。

2.5 ラベル付け原子と結合

Ghemical では、それらのプロパティを示す原子または結合にラベルを付けることができます。これらのラベルは、表示インターフェースを右クリックすることによって、Render > Rendering Mode を選び、次にリストからラベルのタイプを選んで、追加することができます。

空白ラベル: 空白ラベルは、ラベルを表示しないための設定です。これは、ラベルが必要でない分子からラベルを外すために使われます。空白ラベルはデフォルト設定です。

ラベルインデックス: このセッティングでは各原子に番号ラベルを貼ります。番号は、各原子が 0 で始まる分子に付けた数です (例: 分子に最初に追加された原子が 0、2 番目が 1...)。この数は Ghemical が内部で原子をどのように参照しているかであり、Ghemical が、ユーザーが立体配座の検索ツールの中など特定の原子を指定する必要がある時に使われます。

ラベル電荷: このセッティングでは近似電荷のラベルを各原子に貼ります。原子が最初に追加される時に、0 電荷とします。その電荷を計算するために、エネルギー計算または構造最適化のどちらかがまず動いていなければなりません。

ラベル元素: この設定はその 1 文字か 2 文字の元素の略称を各原子にラベルを貼ります。

ラベル原子タイプ: この設定はその原子タイプのラベルを各原子に貼ります。最初の桁は原子番号を表していて、末尾の数字は原子の結合形式を表しています。各原子は構造最適化またはエネルギー計算までタイプ Oxxxxxx として表示されます。

ラベルの結合タイプ: この設定はその結合タイプのラベルを貼ります。単結合は S というラベルが貼られて、共役結合は C というラベルが貼られて、二重結合は D というラベルが貼られて、三重結合は T というラベルが貼られません。

2.6 MOPAC の Z-matrix の入力

- ①右クリックでポップアップメニューを呼び出す。
- ②「File」にポインタを置いてクリックするとコマンドリストが表示される。
- ③そのリストから「import」をクリック、ファイル書式から「MOPAC internal」をクリックする。
- ④ファイル名を browser で選択して OK をクリックする。
- ⑤画面上に 3D 分子構造が表示される。

註: Z-matrix が様式に合わないとき Ghemical が凍結することあり; 座標やフラグが空白は許されない、0 を入力しておく MOPAC の計算結果で原子の電荷の項があっても問題を起こすことはない。原子の番号は問題を起こす。

2.7 MOPAC の Z-matrix を出力

- ①右クリックでポップアップメニューを呼び出す。
- ②「File」にポインタを置いてクリックするとコマンドリストが表示される。
- ③そのリストから「Export」をクリックし、ファイル書式から「MOPAC internal」をクリックする。
- ④化合物名等をファイル名にして保存。
- ⑤OK をクリックして Ghemical を閉じる (MOPAC 様式 Z-matrix でファイルに保存; 最初の 3 行が追加されている)。