2014/01/21

分子計算ソフトによる分子シュミレーション

仁科・立花・伊藤研究室　小野寺

1．実験

1.1　使用機器

ソフトウェア：富士通　SIGRESS

　OS：　Windows 7 Enterprise

　プロセッサ：Intel(R) Core(TM) i5-2400 CPU @ 3.10 GHz

 分子の描き方やモデリング方法のチューリアル日本語版：

　　　　　C:\Program Files (x86)\Fujitsu\SCIGRESS 2.5.2\GettingStarted\_JP.pdf

1.2　SCIGRESSの起動と新規プロジェクトの作成

　スタート｜すべてのプログラム｜SCIGRESS 2.5.2｜Workspaceをクリックし、SCIGRESSを立ち上げた。ただし、｜は「をクリックし」を意味する。左クリックを単にクリックと記述し、右クリックと区別する。○○｜とあれば、PC画面上に「○○」と書いてある部分を探し、クリックすることを意味する。クリックしなくても、カーソルを持っていくだけで、次の選択肢が出てくる場合もある。

　新規作成をクリックし、プロジェクトエクスプローラのUntiled 1 をMoleculesに変更した。

1.3　フェリシアニド([Fe(CN)6]3−)の作成

　プロジェクトエクスプローラ中のMoleculesフォルダをマウスで右クリックし、新規作成ウィザード｜手書き を選択し、OKを右クリックした。現れたモデリングウィンドウ上で、ツールパレットの描画を選択し、スタイルバーの元素の選択の周期表をクリックし、Fe26を選択し、OKをクリックした。混成状態の選択をsp3-四面体に、電荷を3に、Change the style of the selected bondsを単結合に選択し、鉄原子1つをウィンドウの中心に配置した。次にスタイルバーの元素の選択をC-Carbonに、混成状態の選択をsp3-四面体に、電荷を0に、Change the style of the selected bondsを配向結合に選択し、炭素原子6つを鉄原子の周囲に配置した。鉄原子をクリックし、それぞれ炭素原子に向かってドラッグすることにより結合した。次にスタイルバーの元素の選択をN-Nitrogenに、混成状態の選択をsp3-四面体に、電荷を‐1に、Change the style of the selected bondsを三重結合に選択し、窒素原子6つを鉄原子の周囲に配置した。窒素原子をクリックし、それぞれ炭素原子に向かってドラッグすることにより結合した。

(オプションメニュー)編集｜すべてを選択｜により、錯体全体を選択した。

(オプションメニュー)構造整形｜簡易整形｜により、形状を整えた。

　簡易整形後、(オプションメニュー)ファイル｜名前を付けて保存｜により、プロジェクトエクスプローラ上のファイルを保存した。この時、ファイル名は[Fe(CN)6]3-.csfとした。

(この時、原子に異常があると表示されますが、「はい」をクリック）

1.4　HOMO/LUMO(分子軌道エネルギー)の計算

　プロジェクトエクスプローラから、計算を行うcsfファイルを選択し、モデリングウィンドウを開き、(オプションメニュー)プロシージャ｜計算方法の選択と計算の実行を選択した。

対象の選択をchemical sample、目的の選択をHOMO&LUMO、計算方法の選択をstandard procedureとし、スタートし計算を行った。計算終了が表示されたら、計算状況のウィンドウを閉じ、

(オプションメニュー)表示｜表面の表示｜面の表示｜OKを選択し、求められたHOMOを表示した。

Fig.1にHOMOが表示された[Fe(CN)6]3−のSCIGRESS画像を示す。

