

```
Options
calc = MIN
frozen = True
submit = False
machine = ims
END
```

calc : MINのインプット名
xxx.com の xxx を書く

frozen : 置換基以外をFrozenAtomsにするか
(True/False)

submit : MIN計算を計算機に自動投入するか
(True/False)

machine : 計算を投げる計算機の指定
(karura, kudpc, ims)

kudpcは動作確認していない

```
Model Molecule
C      0.482307887      0.456442573     -0.111104200  0 0 1 0 N N
C      1.780640441      0.131553857     -0.057536415  0 0 2 0 N N
C      0.971058703      2.304564330      2.054106231  0 0 3 0 N N
C      1.366783577      1.243157742      2.786099368  0 0 4 0 N N
O      0.086209787      1.766805063     -0.107537374  0 0 0 0 N N
C     -0.251028687      2.271755590      1.189415705  0 0 5 0 N N
H     -1.069011165      1.678157846      1.643212387  0 0 0 0 N N
H      0.769324586      0.339615323      2.878786745  0 0 0 0 N N
H      2.548873966      0.916260296      0.070017376  0 0 0 0 N N
X     -0.672115094     -0.504758680     -0.292497327  1 1 0 1 S B
X      2.273472013     -1.192651293     -0.136913085  2 2 0 2 S B
X      1.783407961      3.375945429      2.121544604  3 3 0 3 S B
X      2.657267885      1.274703738      3.518938155  4 4 0 4 S B
X     -0.818326526      3.657099395      0.828035427  5 5 0 5 S B
END
```

```
X1 list
CF3
5
H      1.350623349     -1.634895532     -3.234227624
C      1.753299022     -1.739094059     -4.230919637
F      2.338383926     -0.596460277     -4.649879043
F      2.685568734     -2.714314970     -4.288202425
F      0.789118072     -2.049649234     -5.123877463
```

```
CN
3
H      0.055147059      0.000000000     -1.022944010
C      0.055147059      0.000000000      0.057055990
N      0.055147059      0.000000000      1.220394990
```

```
CHCH32
11
H      0.118887156      3.048943656     -6.019158158
C      0.118887156      3.195109269     -4.949094789
H      0.118887156      4.269320226     -4.697903052
C      1.392345301      2.549524774     -4.412354848
C     -1.154570989      2.549524774     -4.412354848
H     -2.056020712      3.033069115     -4.817794750
H     -1.201294070      1.480909960     -4.677207861
H     -1.203764233      2.618905835     -3.313755418
H      1.439068381      1.480909960     -4.677207860
H      1.441538545      2.618905836     -3.313755418
H      2.293795024      3.033069115     -4.817794750
END
```

```
Options
calc = MIN
frozen = True
submit = False
machine = ims
END
```

```
Model Molecule
```

```
C      0.482307887      0.456442573     -0.111104200    0 0 1 0 N N
C      1.780640441      0.131553857     -0.057536415    0 0 2 0 N N
C      0.971058703      2.304564330      2.054106231    0 0 3 0 N N
C      1.366783577      1.243157742      2.786099368    0 0 4 0 N N
O      0.086209787      1.766805063     -0.107537374    0 0 0 0 N N
C     -0.251028687      2.271755590      1.189415705    0 0 5 0 N N
H     -1.069011165      1.678157846      1.643212387    0 0 0 0 N N
H      0.769324586      0.339615323      2.878786745    0 0 0 0 N N
H      2.548873966      0.916260296      0.070017376    0 0 0 0 N N
X     -0.672115094     -0.504758680     -0.292497327    1 1 0 1 S B
X      2.273472013     -1.192651293     -0.136913085    2 2 0 2 S B
X      1.783407961      3.375945429      2.121544604    3 3 0 3 S B
X      2.657267885      1.274703738      3.518938155    4 4 0 4 S B
X     -0.818326526      3.657099395      0.828035427    5 5 0 5 S B
```

```
END
```

```
X1 list
```

```
CF3
5
H      1.350623349     -1.634895532     -3.234227624
C      1.753299022     -1.739094059     -4.230919637
F      2.338383926     -0.596460277     -4.649879043
F      2.685568734     -2.714314970     -4.288202425
F      0.789118072     -2.049649234     -5.123877463
```

```
CN
3
H      0.055147059      0.000000000     -1.022944010
C      0.055147059      0.000000000      0.057055990
N      0.055147059      0.000000000      1.220394990
```

```
CHCH32
11
H      0.118887156      3.048943656     -6.019158158
C      0.118887156      3.195109269     -4.949094789
H      0.118887156      4.269320226     -4.697903052
C      1.392345301      2.549524774     -4.412354848
C     -1.154570989      2.549524774     -4.412354848
H     -2.056020712      3.033069115     -4.817794750
H     -1.201294070      1.480909960     -4.677207861
H     -1.203764233      2.618905835     -3.313755418
H      1.439068381      1.480909960     -4.677207860
H      1.441538545      2.618905836     -3.313755418
H      2.293795024      3.033069115     -4.817794750
```

```
END
```

分子の骨格部分の座標

置換基を生やしたい原子の場所はXで与える

Xの座標は, 結合方向さえあっていれば, 共有結合半径などを気にせず置いて良いです

```
Options
calc = MIN
frozen = True
submit = False
machine = ims
END
```

Model Molecule

	1	2	3	4	5	6
C	0.482307887	0.456442573	-0.111104200	0	0	1
C	1.780640441	0.131553857	-0.057536415	0	0	2
C	0.971058703	2.304564330	2.054106231	0	0	3
C	1.366783577	1.243157742	2.786099368	0	0	4
O	0.086209787	1.766805063	-0.107537374	0	0	0
C	-0.251028687	2.271755590	1.189415705	0	0	5
H	-1.069011165	1.678157846	1.643212387	0	0	0
H	0.769324586	0.339615323	2.878786745	0	0	0
H	2.548873966	0.916260296	0.070017376	0	0	0
X	-0.672115094	-0.504758680	-0.292497327	1	1	0
X	2.273472013	-1.192651293	-0.136913085	2	2	0
X	1.783407961	3.375945429	2.121544604	3	3	0
X	2.657267885	1.274703738	3.518938155	4	4	0
X	-0.818326526	3.657099395	0.828035427	5	5	0

END

X1 list

```
CF3
5
H 1.350623349 -1.634895532 -3.234227624
C 1.753299022 -1.739094059 -4.230919637
F 2.338383926 -0.596460277 -4.649879043
F 2.685568734 -2.714314970 -4.288202425
F 0.789118072 -2.049649234 -5.123877463
```

```
CN
3
H 0.055147059 0.000000000 -1.022944010
C 0.055147059 0.000000000 0.057055990
N 0.055147059 0.000000000 1.220394990
```

```
CHCH32
11
H 0.118887156 3.048943656 -6.019158158
C 0.118887156 3.195109269 -4.949094789
H 0.118887156 4.269320226 -4.697903052
C 1.392345301 2.549524774 -4.412354848
C -1.154570989 2.549524774 -4.412354848
H -2.056020712 3.033069115 -4.817794750
H -1.201294070 1.480909960 -4.677207861
H -1.203764233 2.618905835 -3.313755418
H 1.439068381 1.480909960 -4.677207860
H 1.441538545 2.618905836 -3.313755418
H 2.293795024 3.033069115 -4.817794750
```

END

1. X原子に1から順に番号を振ります
他の原子は0にします
 2. ①に同じくです。
 3. 置換基を接続する原子に番号付けします
 4. ③で指定した原子とX原子を結びつける
番号です。read.comの中身を見てみてください
 5. A: 原子置換モード
S: 置換基配置モード
M: 分子配置するモード
N: X出ない分子
- とりあえずSにしておけばOKです
X以外の原子はNにしておきます
6. とりあえずBにしておけばOKです
X以外の原子はNにしておきます

```
Options
calc = MIN
frozen = True
submit = False
machine = ims
END
```

```
Model Molecule
```

C	0.482307887	0.456442573	-0.111104200	0	0	1	0	N	N
C	1.780640441	0.131553857	-0.057536415	0	0	2	0	N	N
C	0.971058703	2.304564330	2.054106231	0	0	3	0	N	N
C	1.366783577	1.243157742	2.786099368	0	0	4	0	N	N
O	0.086209787	1.766805063	-0.107537374	0	0	0	0	N	N
C	-0.251028687	2.271755590	1.189415705	0	0	5	0	N	N
H	-1.069011165	1.678157846	1.643212387	0	0	0	0	N	N
H	0.769324586	0.339615323	2.878786745	0	0	0	0	N	N
H	2.548873966	0.916260296	0.070017376	0	0	0	0	N	N
X X1	-0.672115094	-0.504758680	-0.292497327	1	1	0	1	S	B
X X2	2.273472013	-1.192651293	-0.136913085	2	2	0	2	S	B
X X3	1.783407961	3.375945429	2.121544604	3	3	0	3	S	B
X X4	2.657267885	1.274703738	3.518938155	4	4	0	4	S	B
X X5	-0.818326526	3.657099395	0.828035427	5	5	0	5	S	B

```
END
```

```
X1 list
```

```
CF3
5
H 1.350623349 -1.634895532 -3.234227624
C 1.753299022 -1.739094059 -4.230919637
F 2.338383926 -0.596460277 -4.649879043
F 2.685568734 -2.714314970 -4.288202425
F 0.789118072 -2.049649234 -5.123877463
```

```
CN
3
H 0.055147059 0.000000000 -1.022944010
C 0.055147059 0.000000000 0.057055990
N 0.055147059 0.000000000 1.220394990
```

```
CHCH32
11
H 0.118887156 3.048943656 -6.019158158
C 0.118887156 3.195109269 -4.949094789
H 0.118887156 4.269320226 -4.697903052
C 1.392345301 2.549524774 -4.412354848
C -1.154570989 2.549524774 -4.412354848
H -2.056020712 3.033069115 -4.817794750
H -1.201294070 1.480909960 -4.677207861
H -1.203764233 2.618905835 -3.313755418
H 1.439068381 1.480909960 -4.677207860
H 1.441538545 2.618905836 -3.313755418
H 2.293795024 3.033069115 -4.817794750
```

```
END
```

Model Moleculeにおいて、X原子はX1, X2, X3.....と昇順に配置した方が良いです。そうしない場合は、①や②で工夫した番号付けが必要です

```
Options
calc = MIN
frozen = True
submit = False
machine = ims
END

Model Molecule
C      0.482307887      0.456442573      -0.111104200  0  0  1  0  N  N
C      1.780640441      0.131553857      -0.057536415  0  0  2  0  N  N
C      0.971058703      2.304564330      2.054106231  0  0  3  0  N  N
C      1.366783577      1.243157742      2.786099368  0  0  4  0  N  N
O      0.086209787      1.766805063      -0.107537374  0  0  0  0  N  N
C      -0.251028687      2.271755590      1.189415705  0  0  5  0  N  N
H      -1.069011165      1.678157846      1.643212387  0  0  0  0  N  N
H      0.769324586      0.339615323      2.878786745  0  0  0  0  N  N
H      2.548873966      0.916260296      0.070017376  0  0  0  0  N  N
X      -0.672115094      -0.504758680      -0.292497327  1  1  0  1  S  B
X      2.273472013      -1.192651293      -0.136913085  2  2  0  2  S  B
X      1.783407961      3.375945429      2.121544604  3  3  0  3  S  B
X      2.657267885      1.274703738      3.518938155  4  4  0  4  S  B
X      -0.818326526      3.657099395      0.828035427  5  5  0  5  S  B
END
```

```
X1 list
CF3
5
H      1.350623349      -1.634895532      -3.234227624
C      1.753299022      -1.739094059      -4.230919637
F      2.338383926      -0.596460277      -4.649879043
F      2.685568734      -2.714314970      -4.288202425
F      0.789118072      -2.049649234      -5.123877463

CN
3
H      0.055147059      0.000000000      -1.022944010
C      0.055147059      0.000000000      0.057055990
N      0.055147059      0.000000000      1.220394990

CHCH32
11
H      0.118887156      3.048943656      -6.019158158
C      0.118887156      3.195109269      -4.949094789
H      0.118887156      4.269320226      -4.697903052
C      1.392345301      2.549524774      -4.412354848
C      -1.154570989      2.549524774      -4.412354848
H      -2.056020712      3.033069115      -4.817794750
H      -1.201294070      1.480909960      -4.677207861
H      -1.203764233      2.618905835      -3.313755418
H      1.439068381      1.480909960      -4.677207860
H      1.441538545      2.618905836      -3.313755418
H      2.293795024      3.033069115      -4.817794750
END
```

X1に与える置換基の候補を列挙
最後はENDで囲む

同じように他のXも書き込む

```
Options
calc = MIN
frozen = True
submit = False
machine = ims
END

Model Molecule
C      0.482307887      0.456442573      -0.111104200  0  0  1  0  N  N
C      1.780640441      0.131553857      -0.057536415  0  0  2  0  N  N
C      0.971058703      2.304564330      2.054106231  0  0  3  0  N  N
C      1.366783577      1.243157742      2.786099368  0  0  4  0  N  N
O      0.086209787      1.766805063      -0.107537374  0  0  0  0  N  N
C      -0.251028687      2.271755590      1.189415705  0  0  5  0  N  N
H      -1.069011165      1.678157846      1.643212387  0  0  0  0  N  N
H      0.769324586      0.339615323      2.878786745  0  0  0  0  N  N
H      2.548873966      0.916260296      0.070017376  0  0  0  0  N  N
X      -0.672115094      -0.504758680      -0.292497327  1  1  0  1  S  B
X      2.273472013      -1.192651293      -0.136913085  2  2  0  2  S  B
X      1.783407961      3.375945429      2.121544604  3  3  0  3  S  B
X      2.657267885      1.274703738      3.518938155  4  4  0  4  S  B
X      -0.818326526      3.657099395      0.828035427  5  5  0  5  S  B
END
```

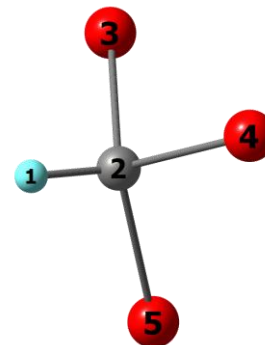
```
X1 list
CF3
5
H      1.350623349      -1.634895532      -3.234227624
C      1.753299022      -1.739094059      -4.230919637
F      2.338383926      -0.596460277      -4.649879043
F      2.685568734      -2.714314970      -4.288202425
F      0.789118072      -2.049649234      -5.123877463
```

```
CN
3
H      0.055147059      0.000000000      -1.022944010
C      0.055147059      0.000000000      0.057055990
N      0.055147059      0.000000000      1.220394990
```

```
CHCH32
11
H      0.118887156      3.048943656      -6.019158158
C      0.118887156      3.195109269      -4.949094789
H      0.118887156      4.269320226      -4.697903052
C      1.392345301      2.549524774      -4.412354848
C      -1.154570989      2.549524774      -4.412354848
H      -2.056020712      3.033069115      -4.817794750
H      -1.201294070      1.480909960      -4.677207861
H      -1.203764233      2.618905835      -3.313755418
H      1.439068381      1.480909960      -4.677207860
H      1.441538545      2.618905836      -3.313755418
H      2.293795024      3.033069115      -4.817794750
END
```

各置換基に対して、
名前, 原子数, 座標の順で情報を書く

置換基は必ず中性化した状態で与え
1番目の原子を中性化に用いた原子
2番目の原子を↑の原子に繋がっている原子
とします



実行方法

まず, AutoModeler_karura ディレクトリを適当な場所にコピーします。
中に program ディレクトリがあるので, その中へ cd します。
(ライブラリ化していないので, 若干使い勝手が悪い。。)

program ディレクトリには read.com (インプットファイルの例)と run.py があります。

インプットファイルの中身は適宜書き換えておいて

```
python run.py
```

を実行すると動きます。numpy や scipy がないとエラーが出ます。

生成された分子には自動的にディレクトリが割り振られ,
内部でMINのインプットが作られます。

インプットファイルで submit = True としている場合, 自動で MIN を投入されます
karura で計算を投げる場合は, bsub 後に3秒 sleep するので動作が遅いです
そのほかの計算機では, sleep せずに立て続けにジョブを投入します