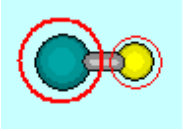
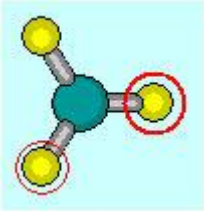
水分子の振動解析（赤外吸収スペクトル）

1. 水分子の構造の作成

i. ファイルメニューから「新規」を選択する。

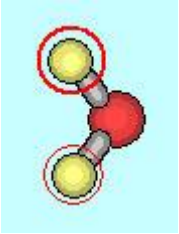


ii. 置換基プルダウンメニューから「-CH2」を選択後、画面中央の炭素（図の暗緑色の部分）を右クリックすると、CH3 が現れる。



iii. Winmostar のウィンドウ左上の「Del」ボタンをクリックするか「Shift + F4」キーを押して水素を削除する。

iv. 炭素を選択し、「元素選択」プルダウンメニューから「O」（酸素）を選択し、「Chng」ボタンをクリックする。



v. MOPAC 計算のキーワードのテキストエリア（1 行目）を「PM6 PRECISE」と変更する。

vi. ファイルメニューから「名前を付けて保存」を選択し、”water.dat”の名前で保存する。

2. 構造最適化

i. 計算メニューから、「(3)MOPAC 2009 start」を選択し、計算を開始する。

ii. 計算が終了すると、計算結果を書き出したファイル「water.out」が開かれる。

3. 振動解析計算

i. MOPAC 計算のキーワードのテキストエリア（1 行目）を「PM6 FORCE PRECISE」と変更する。

ii. ファイルメニューから「名前を付けて保存」を選択し、”water-freq.dat”の名前で保存する。

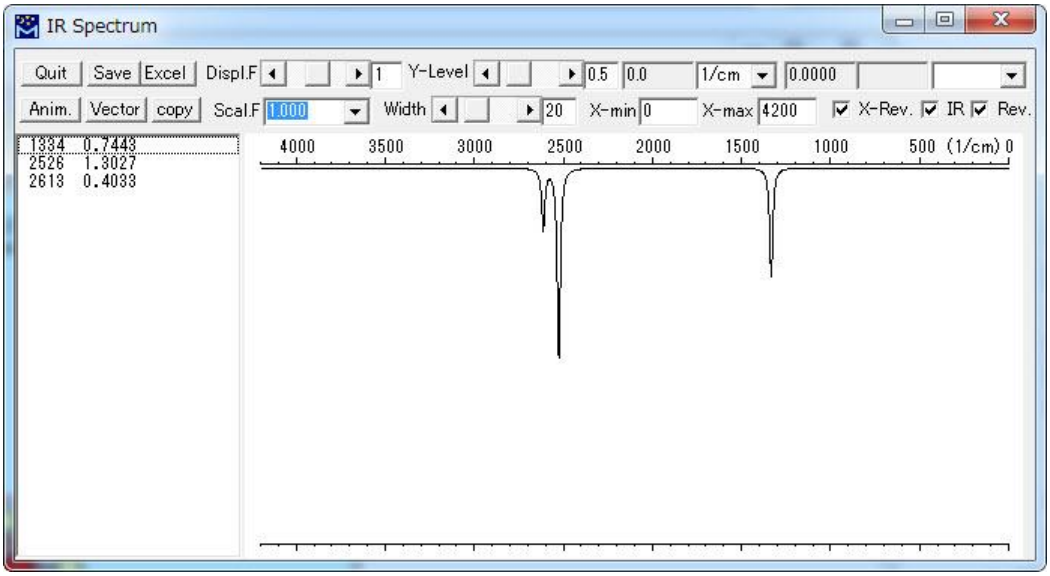
iii. 計算メニューから、「(3)MOPAC 2009 start」を選択し、計算を実行する。

4. 振動解析計算結果の確認

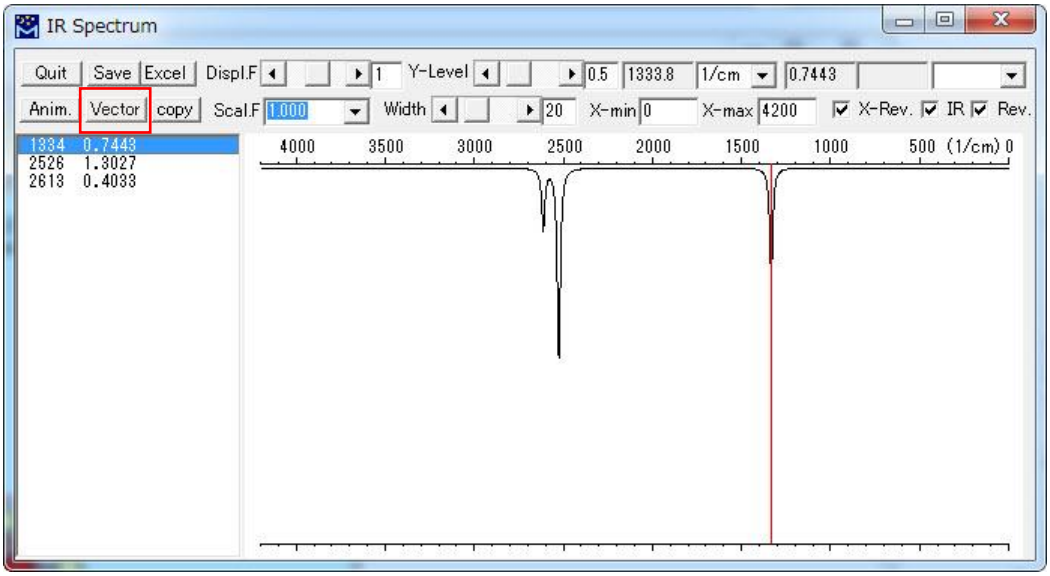
i. 計算が終了すると、「water-freq.out」が開かれる。

```
          DESCRIPTION OF VIBRATIONS

VIBRATION     1     1A1       ATOM PAIR        ENERGY CONTRIBUTION    RADIAL
FREQ.       1333.79         O  1 --  H  2          +50.0% ( 62.2%)     17.6%
T-DIPOLE     0.7443         O  1 --  H  3          +50.0% ( 62.2%)     17.5%
TRAVEL       0.1697
RED. MASS    0.5762
EFF. MASS    1.7561

VIBRATION     2     1B2       ATOM PAIR        ENERGY CONTRIBUTION    RADIAL
FREQ.       2526.04         O  1 --  H  2          +50.4% ( 71.6%)     96.8%
T-DIPOLE     1.3027         O  1 --  H  3          +49.6% ( 71.1%)     96.9%
TRAVEL       0.1327
RED. MASS    0.5224
EFF. MASS    1.5154

VIBRATION     3     2A1       ATOM PAIR        ENERGY CONTRIBUTION    RADIAL
FREQ.       2612.55         O  1 --  H  3          +50.4% ( 66.7%)     94.0%
T-DIPOLE     0.4033         O  1 --  H  2          +49.6% ( 66.1%)     94.0%
TRAVEL       0.1559
RED. MASS    0.4966
EFF. MASS    1.0617
```

ii. [計算]メニューから、[Import] – [Force(out)]を選び、ファイル「water-freq.out」から MOPAC 2009 による振動計算結果を読み込む。

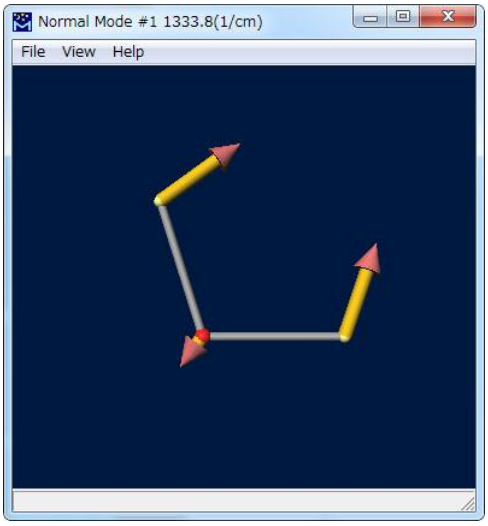


iii. 左側の波数と強度が表示されている欄内の行をクリックするか、スペクトル図内の該当位置をクリックして、振動 を選択する。

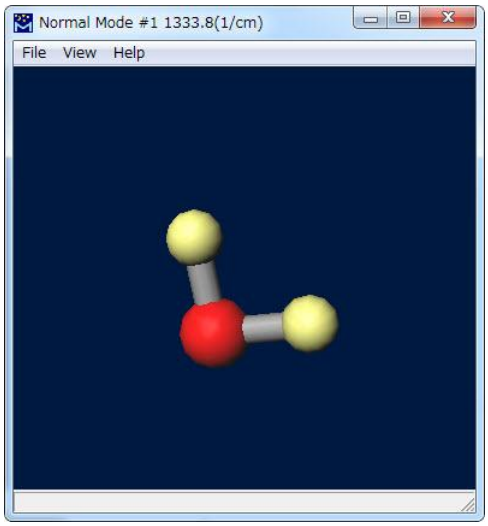


Y-Level で、縦軸の強度の表示スケールを変更することができる。
Width で、半値幅を変更することができる。

iv.　振動を選択し、[Vector]ボタンをクリックすると。基準振動のベクトルが表示される。

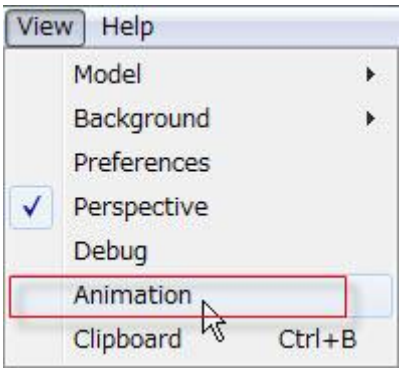


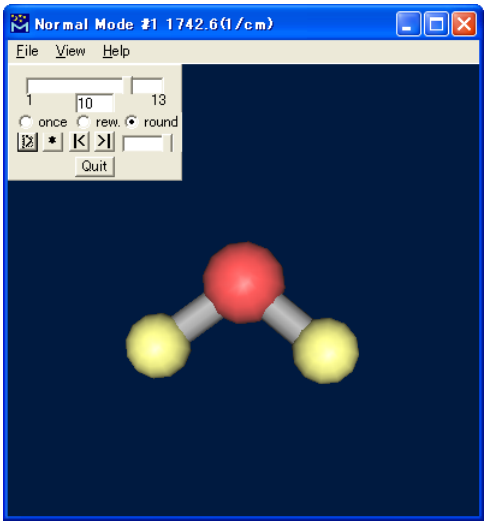
v.　[Anim]ボタンをクリックすると振動アニメーションが表示される。



マウスを右クリックしたまま下にドラッグすると、モデルが大きく表示される。

vi.　[View] – [Animation]メニューで表示される制御ウィンドウで、振動アニメーションの表示設定ができる。





5. PM6 法による振動数の予測精度について

MOPAC による振動計算の予測精度はあまり良くない。とくに、PM6 法では実験値と比べて大きくずれる例が見られる。水分子の振動数の MOPAC による計算値と実測値を比較した結果を表に示す。

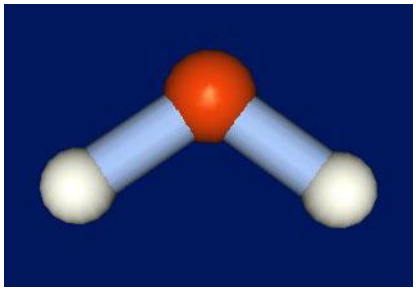
表　水分子の振動数の MOPAC による計算値と実測値の比較

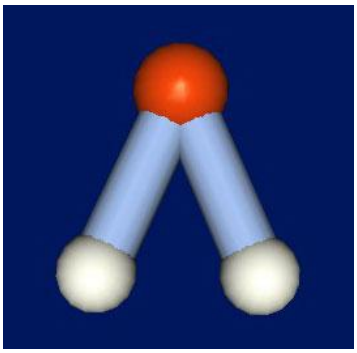
	実験値	AM1	PM3	PM6
ν_1	1595	1885	1743	1334
ν_2	3657	3504	3868	2526
ν_3	3756	3583	3989	2613

参考）Accuracy of Prediction of Vibrational Frequencies
http://openmopac.net/Vibrational%20frequencies%20table.html

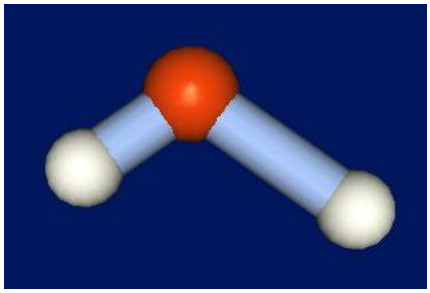
水分子の振動モード

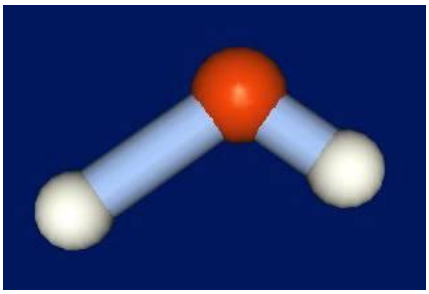
変角振動（ν_1）



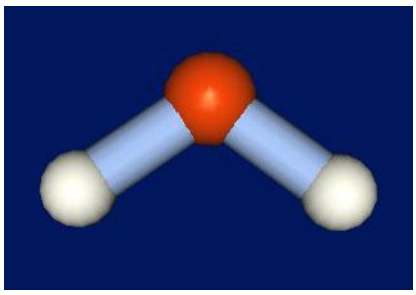


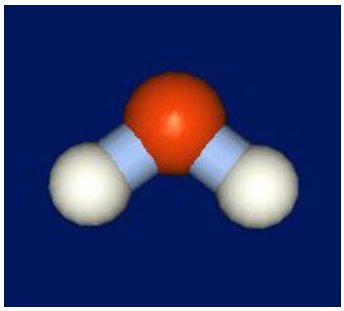
非対称伸縮振動（ν_2）





対称伸縮振動（ν_3）





（木原　寛）