

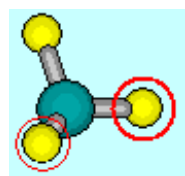
メタンの構造の作成と構造最適化

1. メタンの構造の作成

- i. Winmostar の起動直後、分子表示ウィンドウには次のような構造が表示されている。



- ii. 画面中央の炭素（上の図の暗緑色の部分）を右クリックすると、メタンが表示される。

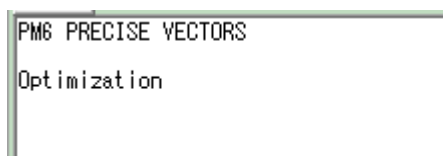


2. 計算方法の指定

- i. MOPAC 計算のキーワードのテキストエリア（1 行目）を

PM6 PRECISE VECTORS

と変更する。（小文字でもかまわない）



PM6：MOPAC 2009 の計算方法のデフォルトは PM6 なので、指定する必要はないが、ここでは分かりやすく明示的に指定している。

PRECISE：収束判定条件を 100 倍厳しくする

VECTORS：最終固有ベクトルを印字する

デフォルトで表示されるキーワードとタイトルは、「計算」メニューの「MOPAC キーワード」－「Setup」で設定することができる。

- ii. 構造最適化前の Z マトリックスは次のようになっている。

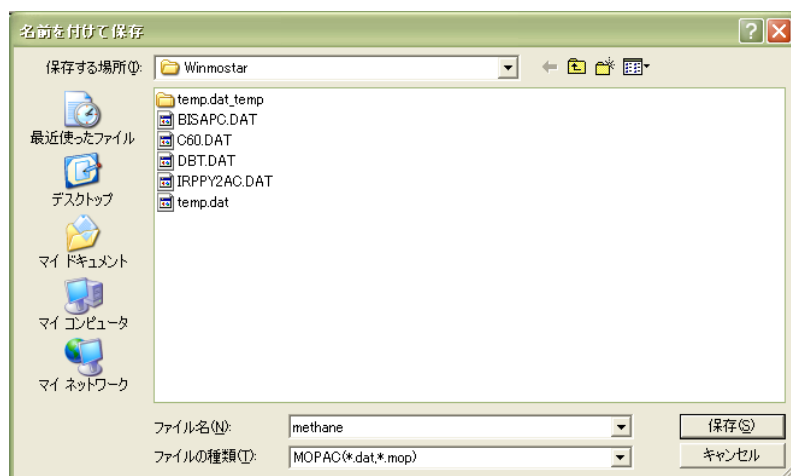
1	C	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2	H	1.1	1	0	1	0	1	1	0	0
3	H	1.1	1	109	1	0	1	1	2	0
4	H	1.1	1	109	1	120	1	1	2	3
5	H	1.1	1	109	1	-120	1	1	2	3

3. ファイルの保存

- i. 計算を実行するためには、計算方法に合った形式でデータを保存する必要がある。
ファイルメニューから「名前を付けて保存」を選択する。



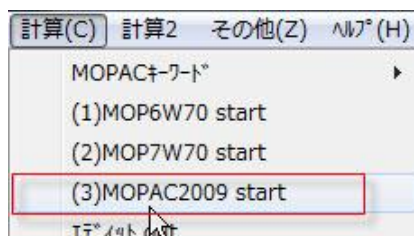
- ii. PC のディスクの適当な場所に、ファイル名「methane.dat」として保存する。



(注： デフォルトでファイルの種類として MOPAC(*.dat, *.mop)が選ばれているので、ファイル名は "methane" だけを入力すればよい)。

3. 計算の実行

- 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「methane.out」が開かれる。

4. 結果の表示

- i. Out ファイルの途中に最適化の経過が表示されている。

```

Geometry optimization using EF
DIAGONAL MATRIX USED AS START HESSIAN
CYCLE:   1 TIME:   0.000 TIME LEFT:  2.00D GRAD.:   20.814 HEAT:-11.95101
CYCLE:   2 TIME:   0.000 TIME LEFT:  2.00D GRAD.:    7.114 HEAT:-12.24507
CYCLE:   3 TIME:   0.000 TIME LEFT:  2.00D GRAD.:    0.882 HEAT:-12.28556
CYCLE:   4 TIME:   0.000 TIME LEFT:  2.00D GRAD.:    0.654 HEAT:-12.28678
CYCLE:   5 TIME:   0.000 TIME LEFT:  2.00D GRAD.:    0.040 HEAT:-12.28825

RMS GRADIENT = 0.04022 IS LESS THAN CUTOFF = 0.05000

```

- ii. 計算結果として、

- ・ 最適化された構造の生成熱
- ・ 分子軌道のエネルギーと波動関数（固有値と固有ベクトル）
- ・ 電荷密度

などが表示されている。

PM6 CALCULATION

MOPAC2009 (Version: 11.366W)
Tue Jul 24 13:41:57 2012
No. of days left = 111

生成熱

FINAL HEAT OF FORMATION = -12.28825 KCAL/MOL = -51.41405 KJ/MOL

TOTAL ENERGY	=	-177.17021 EV	
ELECTRONIC ENERGY	=	-394.18089 EV	POINT GROUP: Td
CORE-CORE REPULSION	=	217.01068 EV	
COSMO AREA	=	54.80 SQUARE ANGSTROMS	
COSMO VOLUME	=	37.05 CUBIC ANGSTROMS	
GRADIENT NORM	=	0.04022	
IONIZATION POTENTIAL	=	13.675861 EV	
HOMO LUMO ENERGIES (EV)	=	-13.676 6.016	
NO. OF FILLED LEVELS	=	4	
MOLECULAR WEIGHT	=	16.043	

EIGENVECTORS								
Root No.	1	2	3	4	5	6	7	8
エネルギー	1 a1	1 t2	1 t2	1 t2	2 t2	2 t2	2 t2	2 a1
波動関数	-25.210	-13.676	-13.676	-13.676	6.016	6.017	6.017	7.255
S C 1	-0.7338	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0000	0.0000	-0.6794
Px C 1	0.0000	0.0004	0.0004	-0.7723	0.6353	-0.0003	-0.0003	0.0001
Py C 1	0.0000	0.5450	-0.5471	0.0000	0.0000	0.4502	-0.4483	0.0000
Pz C 1	0.0000	0.5471	0.5450	0.0005	-0.0005	-0.4483	-0.4502	0.0000
S H 2	-0.3397	0.0003	0.0003	-0.5502	-0.6689	0.0003	0.0003	0.3667
S H 3	-0.3397	0.3660	-0.3676	0.1834	0.2228	-0.4469	0.4448	0.3670
S H 4	-0.3397	-0.5014	-0.1334	0.1831	0.2224	-0.1621	-0.6095	0.3670
S H 5	-0.3397	0.1351	0.5007	0.1837	0.2232	0.6086	0.1643	0.3670

NET ATOMIC CHARGES AND DIPOLE CONTRIBUTIONS						
ATOM NO.	TYPE	CHARGE	No. of ELECS.	s-Pop	p-Pop	
1	C	-0.655119	4.6551	1.07689	3.57823	
2	H	0.163784	0.8362	0.83622		
3	H	0.163778	0.8362	0.83622		
4	H	0.163778	0.8362	0.83622		
5	H	0.163778	0.8362	0.83622		
DIPOLE						
POINT-CHG.	X	Y	Z	TOTAL		
HYBRID	0.000	0.000	0.000	0.000		
SUM	0.000	0.000	0.000	0.000		双極子モーメント

- iii. 計算結果をまとめたアーカイブファイル「metane.arc」は、「計算」メニュー → 「エディット arc」で開くことができる

SUMMARY OF PM6 CALCULATION, Site No: 357			
MOPAC2009 (Version: 11.366W)			
Tue Jul 24 13:41:57 2012			
No. of days left = XXX			
Empirical Formula: C H4 = 5 atoms			
PM6 PRECISE VECTORS			
Optimization			
GEOMETRY OPTIMISED USING EIGENVECTOR FOLLOWING (EF).			
SCF FIELD WAS ACHIEVED			
HEAT OF FORMATION	=	-12.28825 KCAL/MOL =	-51.41405 KJ/MOL
TOTAL ENERGY	=	-177.17021 EV	
ELECTRONIC ENERGY	=	-394.18089 EV	
CORE-CORE REPULSION	=	217.01068 EV	
GRADIENT NORM	=	0.04022	
DIPOLE	=	0.00015 DEBYE	POINT GROUP: Td

```

NO. OF FILLED LEVELS   =           4
IONIZATION POTENTIAL   =      13.675861 EV
HOMO LUMO ENERGIES (EV) =    -13.676  6.016
MOLECULAR WEIGHT       =      16.043
COSMO AREA             =      54.80 SQUARE ANGSTROMS
COSMO VOLUME           =      37.05 CUBIC ANGSTROMS

```

MOLECULAR DIMENSIONS (Angstroms)

```

      Atom      Atom      Distance
      H        4      H        2      1.77098
      H        3      H        5      1.77094
      H        3      H        2      1.25226
SCF CALCULATIONS       =           6
COMPUTATION TIME       =      0.031 SECONDS

```

FINAL GEOMETRY OBTAINED CHARGE
 PM6 PRECISE VECTORS

Optimization

C	0.00000000 +0	0.00000000 +0	0.00000000 +0				-0.6551
H	1.08455171 +1	0.00000000 +0	0.00000000 +0	1	0	0	0.1638
H	1.08446758 +1	109.4699769 +1	0.00000000 +0	1	2	0	0.1638
H	1.08446749 +1	109.4699902 +1	120.0000470 +1	1	2	3	0.1638
H	1.08446767 +1	109.4699639 +1	-119.9999528 +1	1	2	3	0.1638

iv. Winmostar の Z マトリックス・ウィンドウに、最適化後の Z マトリックスが表示されている。

1	C	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	H	1.08455	1	0	0	0	1	0	0	0	0
3	H	1.08446	1	109.47	1	0	0	1	2	0	0
4	H	1.08446	1	109.47	1	120	1	1	2	3	0
5	H	1.08446	1	109.47	1	-120	1	1	2	3	0

C-H 結合距離 0.1084 nm

∠H-C-H 109.47 度

となっている。

5. ファイルの保存

- i. ファイルメニューから「名前を付けて保存」を選択し、ファイル名「methane.dat」として、最適化後の構造データを保存する。

(木原 寛)