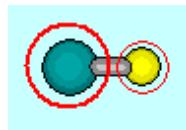


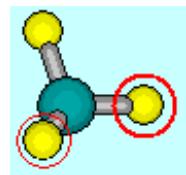
## メタンの構造の作成と構造最適化

### 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 PRECISE VECTORS
Optimization
```

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いように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。

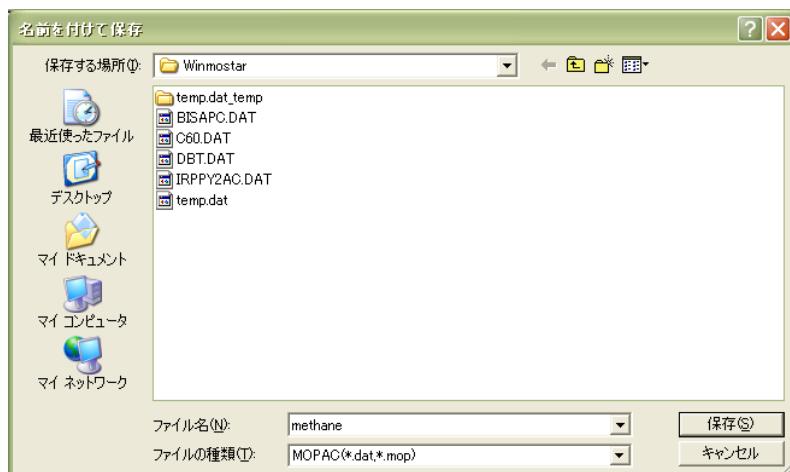
1 C	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2 H	1.1	1	0	1	0	1	1	0	0
3 H	1.1	1	109	1	0	1	1	2	0
4 H	1.1	1	109	1	120	1	1	2	3
5 H	1.1	1	109	1	-120	1	1	2	3

### 3. ファイルの保存

- 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。



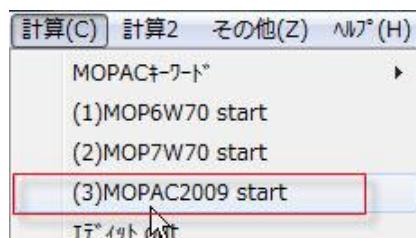
- PC のディスクの適当な場所に、ファイル名「methane.dat」として保存する。



(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

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



- 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
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	X	Y	Z	TOTAL	
POINT-CHG.	0.000	0.000	0.000	0.000	
HYBRID	0.000	0.000	0.000	0.000	双極子モーメント
SUM	0.000	0.000	0.000	0.000	

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 PM6 PRECISE VECTORS							
Optimization							
C	0.0000000 +0	0.0000000 +0	0.0000000 +0				-0.6551
H	1.08455171 +1	0.0000000 +0	0.0000000 +0	1	0	0	0.1638
H	1.08446758 +1	109.4699769 +1	0.0000000 +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
2	H	1.08455	1	0	0	0	1	0	0
3	H	1.08446	1	109.47	1	0	0	1	2
4	H	1.08446	1	109.47	1	120	1	1	2
5	H	1.08446	1	109.47	1	-120	1	1	2

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

- 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)