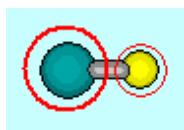


実験 1 分子の内部座標(Z-matrix)と構造最適化

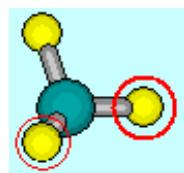
I. メタンの構造の作成と構造最適化

1. メタンの構造の作成とファイルの保存

- i. Winmostar の起動直後、またはファイルメニューから「新規」を選択した場合、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。



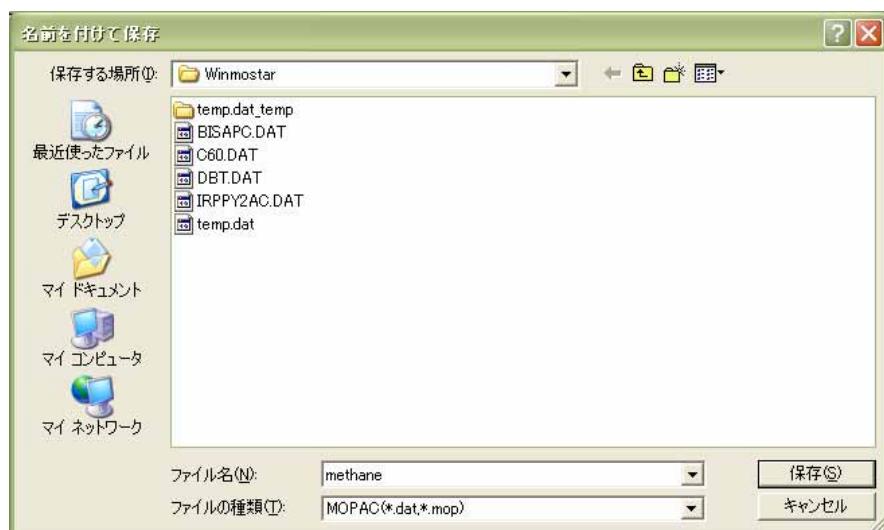
- ii. - CH₃ ボタンをクリックし、続いて画面中央の炭素（上の図の暗緑色の部分）を右クリックすると、メタンが表示される。



- iii. ファイルメニューから「名前を付けて保存」を選択する。



- iv. 適当な場所に、ファイル名「methane.dat」として保存する
(注：ファイル名は"methane"だけを入力すればよい)。



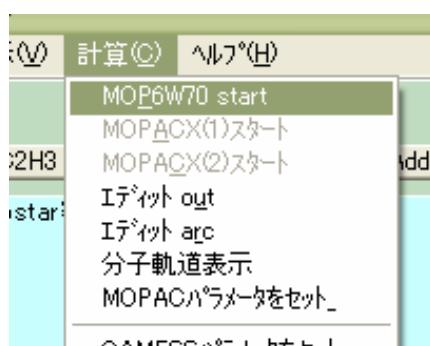
2. Z-Matrix の編集

- v. MOPAC 計算のキーワードのテキストエリア (1 行目) を
PM3 EF PRECISE VECTORS
と変更する。(小文字でもかまわない)
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
パラメータをセット」 - 「Default」で設定することができる。



3. 計算の実行

- vi. 計算メニューから、「MOP6W70 start」を選択し、計算を開始する。



vii. 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。

使用するテキストエディタは、計算メニューの「パスの設定」 - 「エディター」で指定することができる。

```

methane.out - メモ帳
ファイル(E) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

PM3      CALCULATION
VERSION 6.02
15-May-05

FINAL HEAT OF FORMATION = -13.01478 KCAL ← 最適化された構造の生成熱

TOTAL ENERGY      = -180.53516 EV
ELECTRONIC ENERGY = -384.89992 EV
CORE-CORE REPULSION = 204.36476 EV

IONIZATION POTENTIAL = 13.64243
NO. OF FILLED LEVELS = 4
MOLECULAR WEIGHT = 16.043

SCF CALCULATIONS = 1
COMPUTATION TIME = .000 SECONDS

```

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

SUMMARY OF PM3 CALCULATION
VERSION 6.02
C H4
11-May-06
PM3 EF PRECISE VECTORS

Winmostar

GEOMETRY OPTIMISED USING EIGENVECTOR FOLLOWING (EF).

SCF FIELD WAS ACHIEVED

HEAT OF FORMATION = -13.014776 KCAL
 ELECTRONIC ENERGY = -384.899902 EV
 CORE-CORE REPULSION = 204.364742 EV
 DIPOLE = .00000 DEBYE
 NO. OF FILLED LEVELS = 4
 IONIZATION POTENTIAL = 13.642427 EV
 MOLECULAR WEIGHT = 16.043
 SCF CALCULATIONS = 11
 COMPUTATION TIME = .125 SECONDS

FINAL GEOMETRY OBTAINED

CHARGE

PM3 EF PRECISE VECTORS

Winmostar

C	.0000000	0	.000000	0	.000000	0	0	0	0	-.1104
H	1.0870016	1	.000000	0	.000000	0	1	0	0	.0276
H	1.0869953	1	109.471077	1	.000000	0	1	2	0	.0276
H	1.0869953	1	109.471082	1	120.000124	1	1	2	3	.0276
H	1.0869954	1	109.471072	1	-119.999877	1	1	2	3	.0276

(貞富博喬・木原 寛)