

MOPAC 第6版のキーワード一覧表

キーワードは通常はデータファイルの第1行目で指定します。

1行に入りきらない場合には、&、+、SETUPキーワードなどを使って拡張することができます。

&	次の行をキーワード行にする
+	もう1行、キーワード行を加える
0SCF	データだけ読み込んで停止する
1ELECTRON	最終の1電子行列を印刷する
1SCF	1回だけSCF計算を行った後停止する
AIDER	ab initio のエネルギー微分を読み込む
AIGIN	入力構造データがGaussian形式フォーマットである
AIGOUT	ARCファイルにGaussian形式の構造データも出力する
ALLVEC	すべてのベクトルを印刷する(キーワードVECTORも必要)
AM1	AM1のハミルトニアンを使用する
ANALYT	解析的微分を行う
AUTOSYM	自動的(強制的)に対称性を適用する
BAR=N.N	鞍点計算の刻み幅を変える
BCC	体心立方に設定(BZで使用)
BIRADICAL	系が2個の不对電子を持っている
BONDS	最終の結合次数行列を出力する
CHARGE=N	系の電荷がNである(例えばNH4ではCHARGE=1)
C.I.	多電子配置間相互作用を行うよう指定する
CIS	一電子励起CI計算
CISD	一電子、二電子励起CI計算
CISDT	一電子、二電子、三電子励起CI計算
COMPFG	COMPFGサブルーチン内で計算された生成熱を出力する
CONNOLLY	CONNOLLY表面を用いる
CYCLES=N	EFにおける反復回数の最大値
DDMAX	EF/TS計算における最大信頼半径の値
DDMIN	EF/TS計算における最小信頼半径の値
DEBUG	DEBUGオプションを起動する
DELSC	COSMO法において遮蔽電荷距離を設定する
DENOUT	密度行列をファイル10に出力する
DENSITY	最終密度行列を出力する
DEP	新しい元素のパラメータのためのFORTRAN文を生成する
DERIV	DERIV内の計算経過を印刷する
DFORCE	振動解析を行う場合、力の定数行列も印刷する
DFP	構造最適化にDavidon-Fletcher-Powell法を用いる
DIPOLE	ESP 計算で、系の双極子モーメントを計算値に一致させる

DIPX	双極子モーメントのX-成分のみ一致させる
DIPY	双極子モーメントのY-成分のみ一致させる
DIPZ	双極子モーメントのZ-成分のみ一致させる
DISEX=N.N	COSMO 法でfine gridの相互作用を打ち切る距離
DMAX	EF法で使う最大ステップサイズ
DOUBLET	RHF計算で二重項状態を指定
DRC	DRC(動的反応座標)計算を行う
DUMP=N	n 秒ごとにRESTARTファイルを更新する
ECHO	計算を開始する前にデータをエコーバックする
EF	極小点探索にEFルーチンを使用する
EIGS	ITERルーチンの中ですべての固有値を印字する
ENPART	エネルギーを1中心および2中心項に分割する
ESP	静電ポテンシャルを計算する
ESPRST	ESP 計算を再開する
ESR	RHFでの不對電子密度を計算する
EXCITED	一重項第一励起状態を最適化する
EXTERNAL	ディスク上の外部ファイルからパラメータを読み込む
FIELD	外部静電場を与える
FILL=N	開殻、閉殻RHF計算で n 番目のMOに電子を詰める
FLEPO	BFGS法による構造最適化の詳細を印刷する
FMAT	FMATルーチンでの詳細計算経過をプリントする
FOCK	最終のFock 行列を印刷する
FORCE	振動解析を行う
GEO-OK	原子間距離が異常に近い場合のチェックを無視する
GNORM=N.N	エネルギー勾配ノルムがN.N以下になったら構造最適化を終了する
GRADIENTS	すべてのエネルギー勾配を印刷する
GRAPH	グラフィックス用ファイルを作成する
GREENF	Green関数を用いたイオン化ポテンシャルの補正
HCORE	HCOREルーチンでの詳細経過をプリントする
HESS=N	EF計算でのHessian行列の生成オプション
H-PRIO	DRC 計算で、生成熱がある値だけ変化することに印刷する
HYPERFINE	超微細結合定数を計算する
IRC	IRC(固有反応座標)計算を行う
ISOTOPE	力の定数行列をファイル(9)に書き出す
ITER	ITERルーチンでの詳細計算経過をプリントする
ITRY=N	SCF 計算の反復回数の最大をNとする
IUPD	EF 計算においてHessian更新モードにする
K=(N,N)	Brillouin ゾーン構造を計算する
KINETIC	DRC計算において運動エネルギーを加える
LINMIN	Line Minimization 法の経過を印刷する

LARGE	印字する情報量を拡張する
LET	いくつかの安全チェックを無視させる
LOCALIZE	局在化軌道を印刷する
LOCMIN	LOCMIN内の計算の詳細を印刷する
MAX	格子点計算で最大格子サイズ(23*23)で印刷する
MECI	MECI計算の詳細を印刷する
MERS=(N)	BZ用のキーワード
MICROS	CI計算で特定のmicrostateを用いる
MINDO/3	MINDO/3 ハミルトニアンを使用する
MMOK	CONH結合に分子力学的補正を加える
MNDO	MNDO ハミルトニアンを使用する
MODE=N	EF計算において Hessian モードの n 番目を追跡する
MOLDAT	MOLDAT ルーチンでの経過をプリントする
MS=N	MECI計算におけるスピンの磁気成分
MULLIK	Mullikenのポピュレーション解析結果を印刷する
NLLSQ	NLLSQを使用してエネルギー勾配を極小化する
NOANCI	解析的 C.I. 微分を使用しない
NOINTER	原子間距離を印刷しない
NOLOG	計算記録(Log)ファイルへの出力で可能なものを削る
NOMM	CONH結合に対して分子力学補正を行わない
NONR	EF 計算でNewton-Raphson法を使用しない
NOTHIEL	ThielのFSTMIN 法を使用しない
NSPA	COSMO計算で構造セグメントの数を設定する
NOXYZ	Cartesian 座標を印刷しない
NSURF=N	ESP 計算で使う表面の数
OLDENS	密度行列の初期値をファイルから読み込む
OLDGEO	前回の構造を使用する
OMIN	TSルーチンにおいて最小許容重なりを指定する
OPEN	開殻RHF計算を行う
PARASOK	AM1で未定義の元素に対してMNDOのパラメータを流用する
PI	密度行列を 結合と 結合に分離する
PL	ITERにおける密度行列の収束を監視する
PM3	PM3ハミルトニアンを使用する
POINT=N	反応経路における点の数
POINT1=N	格子点計算における第一方向の点の数
POINT2=N	格子点計算における第二方向の点の数
POLAR	一次、二次、三次の分極率を計算する
POTWRT	ESP 計算において静電ポテンシャルをファイル(21)に書き出す
POWSQ	POWSQでの詳細経過を印刷する
PRECISE	収束判定条件を 100 倍厳しくする

PULAY	SCF を得るために Pulay の収束法を使用する
QUARTET	RHF計算で四重項状態を指定
QUINTET	RHF計算で五重項状態を指定
RECALC=N	EF計算でNステップごとにHessian行列を再計算する
RESTART	中断した計算を継続する
RMAX	TSルーチンにおいてエネルギー変化率の許容最大値を指定する
RMIN	TSルーチンにおいてエネルギー変化率の許容最小値を指定する
ROOT=N	CI 計算でN番目の解を最適化する
ROT=N	熱力学諸量の計算で対称性の数Nを指定する
RSOLV	COSMO法において溶媒分子の実効半径を設定する
SADDLE	遷移状態(鞍点構造)を最適化する
SCALE=N.N	ESP 計算における van der Waals 半径のスケール因子
SCFCRT=N.N	SCF収束判定条件のデフォルト値をN.Nにする
SCINCR	ESP計算におけるレイヤー間距離の増分値
SETUP	SETUP ファイルからキーワード群を読み込む
SEXTET	RHF計算で六重項状態を指定
SHIFT=N	SCF が振動して収束しない場合の再開時の減衰因子
SIGMA	SIGMA を使用してエネルギー勾配を極小化する
SINGLET	RHF計算で一重項状態を指定
SLOPE	MNDOによる電荷の値を縮小するための乗数
SPIN	最終のスピン行列を印刷する
STEP	反応経路のステップサイズ
STEP1=N	格子点計算の第一座標変数の刻み幅
STEP2=N	格子点計算の第二座標変数の刻み幅
STO-3G	分子軌道をSTO-3G基底で非直交化する
SYMAVG	ESP 計算において対称性から等価な電荷の値を平均する
SYMMETRY	対称条件を課す
T=N	CPU 時間の制限(秒)
THERMO	熱力学諸量を計算する
TIMES	いろいろな過程の計算時間を印刷する
T-PRIO	DRC 計算において時間を優先する
TRANS	系は遷移状態である(熱力学諸量の計算時に使用)
TRIPLET	RHF計算で三重項状態を指定
TS	遷移状態の探索にEF ルーチンを用いる
UHF	非制限 Hartree-Fock 計算
VDW	デフォルト値以外のvan der Waals半径を定義する。
VECTORS	最終の固有ベクトルを印字する
VELOCITY	DRC 計算において初期速度ベクトルを与える
WILLIAMS	ESP 計算でWilliams 表面を用いる
X-PRIO	DRC 計算において構造変化を優先する

XYZ

カルテシアン座標系を用いてすべての計算を進める