

MOPAC による計算で分かること

MOPAC には、MINDO/3 法, MNDO 法, AM1 法, PM3 法が組込まれている。これらのどの方法を用いても下記の物理量が求まる。以下に、出力リストに打ち出されてくる物理量と、それらをもとにして得られる情報とを列挙する。

- a) 固有値 ϵ_0
 - 1 電子軌道エネルギー, イオン化ポテンシャル, 電子親和力, 励起エネルギー (これは CI が必要)
- b) 固有ベクトル C
 - 分子軌道の形……フロンティア電子密度と配向原理, 局在化軌道密度行列 ……電子密度, 結合次数, 正味電荷 (Net Charge) Mulliken Population 解析
- c) 構造最適化
 - 平衡構造, 遷移状態の構造, 反応座標の追跡
- d) エネルギー分割 (ENPART サブルーチン)
 - 1 中心, 2 中心 (結合) エネルギー → 反応論
- e) ポテンシャル曲面……IRC (Intrinsic Reaction Coordinates) DRC (Dynamic Reaction Coordinates)
 - 反応の追跡
- f) エネルギーの一次微分 (つまり “力”)
 - 反応の追跡 (力の緩和する方向), 構造の変形 (Jahn-Teller 効果)
- g) エネルギーの二次微分 (つまり “力の定数”)
 - 力の定数 (= 結合の強さ) → 反応論
 - 基準振動 (赤外, ラマン)
 - 零点振動エネルギー, エンタルピー, エントロピー, 比熱
 - 自由エネルギー, 分配関数
 - 遷移状態の判定, 反応速度定数 (Eyring の絶対反応速度論の適用)
- h) 1 次元高分子の最適化構造, 強度, ヤング率。2 次元 (層状), 3 次元 (固体) のバンド構造 (電子状態およびホノンの状態について)

- i) 分極率, 静的および周波数依存の超分極率 (非線形光学材料)
- j) Electrostatic Potential 法による有効正味電荷の計算
- k) COSMO 法 (Conductor-like Screening Model) による溶液中の分子の計算 (溶媒効果の計算)

分子軌道法 MOPAC ガイドブック (平野、田辺) より
(熱力学的パラメーターについては標準状態における計算値が得られる。計算に組み込まれたパラメータは標準状態のものであるから)

表 1.1 半経験的分子軌道法一覧

・拡張ヒュッケル法 ^{a)} Hoffmann (1963)	} MOPAC Ver. 5.0 (1989) Stewart
・CNDO/2 ^{b)} Pople ら (1966)	
・INDO ^{c)} Pople ら (1967)	
・MINDO シリーズ Dewar ら “Chemical accuracy”	
{ MINDO/1 ^{d)} (1969)	
{ MINDO/2 ^{e)} (1970)	
{ MINDO/3 ^{f)} (1975)	
・MNDO ^{g)} Dewar ら (1977)	
・AM1 ^{h)} Dewar ら (1985)	
・PM3 ⁱ⁾ Stewart (1989)	

Neglected 2-el Integrals

2-el integral	CNDO	INDO	NDDO	
$(\mu_A \mu_A \parallel \lambda_A \lambda_A)$	+	+	+	← MNDO, AM1, PM3
$(\mu_A \mu_A \parallel \lambda_B \lambda_B)$	+	+	+	
$(\mu_A \nu_A \parallel \lambda_A \lambda_A)$	-	+	+	
$(\mu_A \nu_A \parallel \lambda_B \lambda_B)$	-	-	+	
$(\mu_A \nu_B \parallel \lambda_A \lambda_A)$	-	-	-	
$(\mu_A \nu_A \parallel \lambda_A \sigma_A)$	-	+	+	
$(\mu_A \nu_A \parallel \lambda_B \sigma_B)$	-	-	+	
$(\mu_A \nu_A \parallel \lambda_A \sigma_B)$	-	-	-	
$(\mu_A \nu_B \parallel \lambda_A \sigma_B)$	-	-	-	