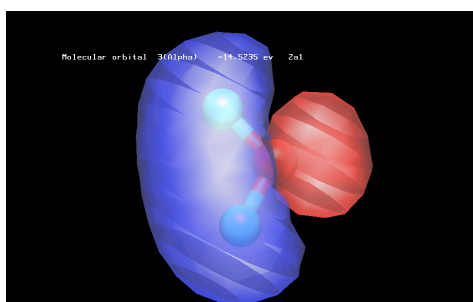


1. 水の分子軌道

- WinMOPAC を起動する。
- 新規ファイルを作る。
- 水の構造を入力する。 表示を ball&stick にすると見やすい。
- “Edit” – “Edit Z-matrix”
- Calculation Type → Geometry Optimization (註1)
- Method → PM5 (註2)
- Precise (註3)
- ファイルをセーブしておく。
- OK
- “Calculation” – “Start”
- 計算が終了したら、“Properties” – “Energy”で生成熱を、“Properties” – “Molecular orbital”で分子軌道を確認する。分子軌道は半透明にすると見やすい。
- コピーしてワープロに貼り込んでみる。



註1：どういう計算をするかで、他の計算方法を選択／追加する

COSMO in water 水中での（誘電率を考えた）構造を求めるとき

Optimize Transition State 遷移状態計算をするとき

IRC Calculation 反応座標を求めるとき

Force Calculation 振動計算（IRの計算）をするとき

その他の計算をするときには、マニュアルから適切なキーワードを選んでタイプする。

註2：MOPACでの計算の精度はどのようなパラメータを選ぶかによって決まる。現在最も信用できるパラメータはPM5であるが、歴史的な経緯からPM5は標準パラメータではなく、指定してやる必要がある。PM5の次に信用できるのはPM3。

註3：精密な計算をするとき。

2. シクロヘキサン誘導体の反転に伴うエネルギー変化

- 計算したい構造を入力する。
- “Edit” – “Edit Z-matrix”
- Calculation Type → Geometry Optimization
- Method → PM3
- Precise
- ファイルをセーブしておく。
- OK
- “Calculation” – “Start”
- 計算が終了したら、“Properties” – “Energy”で生成熱を確認する。
- シクロヘキサンを反転させた構造を入力して、同様に計算して生成熱を確認する。どちらがどれだけ安定か。

3. ベンゼン誘導体の求電子剤との反応位置

- 計算したい構造を入力する。
- “Edit” – “Edit Z-matrix”
- Calculation Type → Geometry Optimization
- Method → PM3
- Precise
- ファイルをセーブしておく。
- OK
- “Calculation” – “Start”
- 計算が終了したら、“Properties” – “Molecular orbital”で HOMO の分子軌道を確認する。軌道の係数が大きいところと求電子剤は反応しやすいはず。本当に反応するかどうかは実験してみなければ分からない。