

Title	半経験的分子軌道法MNDOCの改良と整備
Author(s)	高木,達也;田中,明人;松尾,三四郎他
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1987, 64, p. 83-99
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65725
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

Osaka University

研究開発の成果

半経験的分子軌道法MNDOCの改良と整備

大阪大学薬学部 高木達也 田中明人* 松尾三四郎 前田重男** 前崎博信 谷 美香 佐々木喜男

§ 1. はじめに

近年の電子計算機の発達により、化学、薬学等の分野においても、次第に分子計算に対する要請が強まってきており、より大きな分子のより精密な計算を行う必要性がでてきた。筆者らは既に、 $83\sim84$ 年度の大阪大学大型計算機センター研究開発計画により、MNDO MO法による分子計算の可能なプログラム、MNDOAを開発し、本センターのライブラリープログラムとして登録した。 11 本研究開発計画では、W. Thiel によって開発された、電子相関を含んだ分子計算のための半経験的分子軌道法、MNDOC法 21 の計算が可能なプログラム、MNDOC 31 の移植、改良を行い、当初の目的をほぼ達成することができた。データの入力方法等の大半はMNDOAの場合と同じであるので、以下ではMNDOAの入力データと異なる部分について解説を加えることにする。

§ 2. プログラムMNDOCの概要

このプログラムで計算できる分子についての制限は、現在のところ以下のようである。

1. 使用できる近似法 : MINDO/3 SCF

MNDO SCF

MNDOC SCF

CNDO/2 SCF

MINDO/3 minimal CI

MNDO minimal CI

MN DOC minimal CI

MNDOC 摂動法

2. 原子種

MINDO/3 : H, C, N, O, F, Si, P, S, C1

^{*} 現在、藤沢薬品工業勤務。

^{**} 現在、日本ペーリンガー・インゲルハイム勤務。

MNDO : H, Li, Be, B, C, N, O, F,

A1, Si, P, S, C1

CNDO/2 : H, C, N, O, F

MNDOC : H.C.N.O

3. 規模

原子数 : 75 考慮する対称性 : 50 依存性パラメータ : 20 最適化できる構造変数 : 99 摂動計算で取り扱う軌道数 : 200

基底関数の数 : 50~120

二電子積分の数 : 2500

但し、原子数、摂動計算で取り扱う軌道数、基底関数の数、二電子積分の数については、容易に変更できるように改良が加えられている。ユーザーは行エディターで、各サブルーチンの先頭近くにある PARAMETER 文の数字を変更するだけでよい。なお、MNDO SCF法の計算に関してはMNDOAプログラムとほぼ同様の計算が可能であるが、要する計算時間は MNDOAの方が少なくてすむ。

実行時に使用する中間ファイルは、以下のようである。

f c 書式	内容
01 なし 02 なし 03 なし 04 なり 05 ありり	SCF計算 - 二電子原子積分を格納する 摂動計算 - 二電子分子積分を格納する SCF計算 - コアハミルトニアン、Fock 行列を格納 摂動計算 - 並びかえられた二電子原子積分を格納する DFP法による構造最適化に関する情報を格納する (入力ファイル) (出力ファイル)

又、出力される情報は以下のようである。

- 1. SCF計算に関する入力データ
- 2. 分子の直交座標系における(初期)座標及び、原子間距離

- 3. 摂動計算に関する入力データ
- 4. DFP最適化に関する情報
- 5. SCF計算の結果 : 固有値、固有ベクトル、密度行列、電子稠度、双極子モーメント
- 6. 摂動計算の結果
- 7. DFP最適化の結果 : 標準生成エンタルピー、エネルギー勾配、Z-matrix、原子間距離
- 8. 結果のサマリー

§ 3. データの入力方法

- ① 入力データの概要
 - 1. タイムリミット、方法選択カード(1行)。
 - 2. オプションカード (1~3行)。
 - 3. 分子の構造、及びそれに関するオプションのためのカード(ダミー原子を含んだ原子数 +1 行)。
 - 1) タイトル、オプションカード
 - 2) 原子数、Z-matrix、最適化変数の指定のためのカード
 - 3) 分子の対称性を指定するカード (PART1)
 - 4) 依存性パラメーター指定カード
 - 5) 分子の対称性を指定するカード
 - 6) CIに関するデータカード
 - 7) 摂動計算のための対称性を指定するカード
 - 8) 摂動計算のための他の情報を指定するカード
- 4. 次に計算する分子のためのカード。 3.1 に戻る。 1 2 カラムの値が 99 ならば、計算を終了する。

なお、データの入力方法の大半はプログラムMNDOAと同一であるため、以下適時省略する ことにする。MNDOAに関しては、参考文献の1を参照して頂きたい。

② データの入力方法

下記入力例に従って解説を加える。

◎入力例(CH₂CH⁺)

1	0	-1								
2	0 1									
3	1				1	0-2	VINYL CAT	TION, CLAS	SICAL STRUCTUR	RE, C2V, MNDOC
4	6									
5	6		1.3			1				
6	99		1.0	0			90.			
7	1		1.0	8		1	90.		180.0	2 3 1
8	1		1.0	8		1	120.	1	180.	1 2 3
9	1								0.	1 2 3
10										
11	5 1		1		6	;				
12	5 2		1		6	;				
13										
14	3	2	1 ()	0	2		,		
15	4 5									
16	0	0	0							
17	99									
	I									

1. CARD1 (タイムリミット、方法選択カード)

1-5 カラム (LIMIT) I5 CPU TIMEの制限秒数。DEFAULT=3600 秒。

6-10 (IOP) I5 計算方法の選択。

-1:MNDOC

0:MNDO

1:MINDO/3

2:CNDO/2

2. **CARD 2** (DFPオプションカード1)

1-2 カラム (MAXEND) I2 SCF計算の回数の上限。

0~2:MNDOAに同じ。

3:エネルギー勾配のみを計算する。

3-4 (IPRINT) I2 出力に関するオプション。DEFAULT=+99

+K:Kサイクル毎に、最適化構造変数とエネルギー勾配を出力する。

7-8 (IOPTC) I2 DFP計算に関するオプション。

今回のVERSIONでは、常に0を入力する。

41-80 (KOMENT) 10A4 コメントを入力できる。

◇ CARD 3, 4は、IOPTC=1の時のみ必要。入力例では省かれている。

- 3. CARD 5 (分子に関する情報の指定)
 - 1-2 カラム (KHARGE) I2 荷電数。例は+1の陽イオンである。
 - 21-22 (KSYM) I2 ≠ 0 対称性データを入力する。
 - 23-24 (KDEP) I2 ≠0 依存性データを入力する。
 - 25 26 (KCI) I2 0 S C F 計算のみを行う。
 - ±1 minimal CI計算を行う。
 - ±2 1つの参照電子配置によるBWEN計算を行う。
 - ±3 2つの参照電子配置によるBWEN計算を行う。
 - 31 78 (KTITLE) 12A4 コメントを入力できる。
- 4. CARD 6 (分子構造の入力: Z-matrix.1原子につき1行のデータ)
- 5. **CARD 7** (対称性データの入力。KSYM=1の時のみ必要)
- **6. CARD 8** (依存性データの入力。KDEP=1の時のみ必要)
- 7. CARD 9 (CARD 7 と同じ。KSYM=1.AND.KDEP=1の時のみ必要)
- ◇CARD6~9の入力方法は、MNDOAと全く同じです。
- 8. CARD10 (CIデータカード。KCI=±1の時のみ必要)

1 - 5	(LROOT)	I 5	構造が最適化されるCI state。 DEFAULT=1
6 -10		I 5	1) 2 * 2 C I の時、K からL への 2 電子励起。
11 -15		I 5	DEFAULT: HOMO→LVMO。
16 -20		I5	 3 * 3 C I の時、KからM、LからNへの1電子励起。
1 -25		I 5	(但し、K, LはSOMO)
			DEFAULT: $K \rightarrow L$, $L \rightarrow K$

9. CARD11 (摂動計算のための対称性カード。 IABS (KCI) = $2 \sim 4$ の時のみ必要) 摂動計算のために、分子の属している点群を指定する。ここで点群、 C_s 、 C_2 、 C_2 、 D_2 ト、 C_2 ト、 C_2 でのMO対称性の指定に対して、分子のorientationが次の規約に従っていなければならない。

C_s: C_s平面がXY平面。

C₂ : C₂軸がZ軸 (IAX=0の時) 又はX軸 (IAX=1の時)

 C_{2v} : C_2 軸が Z 軸で C_s 平面が YZ 平面(I AX=0 の時)

D_{2h}: C₂軸がX軸で主C₅平面がXY平面、もう1つのC₅平面がYZ平面。

C_{2h}: C₂軸がZ軸でC_s平面がXY平面。

平面分子に関しては、点群が C_2 、 C_{2v} で、 IAX=0 の場合は分子平面がX Z 平面、その他の場合は XY 平面になるように指定する。又、以下の説明に関して、オプション IOZ, IDZ, ICEN, ICEN1, ICEN2 では \emptyset 5 ー原子は数えない。入力例では、点群は C_{2v} で C_2 軸が X 軸(IAX=1)、分子平面は XY 平面である。

1) CARD 11 - 1

1 - 4	(ISUB) 14	点群の指定。
	$0 : C_1$	3 : C ₂ v
	1 : C _s	4 : D _{2h}
	2 : C ₂	5 : C _{2h}
5 - 8	(IOZ) I4	点群がC ₂ vの時のみ指定。
		C ₂ 軸上に存在する原子の番号。1つだけ指定すればいい。
9 - 12	(IAX) I4	0 : C ₂ 軸が Z 軸。
		1 : C ₂ 軸がX軸。
13 - 16	(NNXY) I4	点群がC _s , D _{2h} , C _{2h} の時のみ指定する。
		XY平面上に存在する原子の数。最大 15 個。
17 - 20	(NRXY) I4	点群がC _s , C _{2v} , C _{2h} の時のみ指定する。
		XY平面によりその対称性が規定される原子の総数。
21 - 24	(NRYZ) I4	点群がC ₂ , C _{2v} , C _{2h} の時のみ指定する。
		C ₂ 軸又はYZ平面(C _{2v} かつIAX=1のときはXZ平面)
		によりその対称性が規定される原子の数。
25 - 28	(IDZ) I4	degenerate MOの対称化に使うN回回転軸上に存在する
		原子数。
29 - 32	(JAXE) I4	上記のN回回転軸の指定。
	O : Z 軸	2 : Y軸
	1 : X 軸	3 : 乙軸

2) CARD11-2 (NNXY≤0の時は省略)

1-30 (ICEN(I)) 15I2 XY平面上に存在する原子の番号。 入力例では IAX=0 だから不要。

- 3) CARD 11-3 (NRXY≤0の時は省略)
 - 1-48 (ICEN1(I)) 24I2 XY平面によって関係づけられる原子の番号。先と同様、 入力例では不要。
- 4) CARD 11-4 (NRYZ≤0の時は省略)
 - 1-48 (ICEN2(I)) 24I2 YZ平面によって関係づけられる原子の番号。入力例では 4,5 番目のH原子がこれにあたる(C_{2V} かつIAX=1のときは XZ 平面)。
- 10. CARD 12 (摂動計算のための情報カード。KCI=±2~±4の時のみ必要)

1) CARD12 - 1

1-4 (ICI1) I4 摂動計算に取り込まれるべき被占軌道の数。

DEFAULT:全空軌道

5-8 (ICI2) I4 摂動計算に取り込まれるべき空軌道の数。

DEFAULT:全空軌道。

9-12 (IOUTCI) I4 出力の制御。

0:標準 4:デバック -5:出力なし

13-16 (MOVO) I4 摂動計算に取り込まれるMOの指定。

DEFAULT: 0

- 0 : I C I 1 番目のMOがHOMOとなるように被占軌道を選択し、L VMOから 順に I C I 2 個の空軌道を選択する。
- 1:MOの番号を、別に入力する。
- 117-20 (MPERT) I4 摂動計算の方法を指定する。

0:BWEN法

1:他の方法。詳細は別に入力する。

- 2) CARD12-2 (MOVO=0の時は省略)
 - 1-80 (IMOCI(I), 2014 摂動計算に取り込む被占軌道の番号を入力する。入力方 I=1, ICI1) 法はSCF計算の出力結果に同じ。必要なだけの行を使って入力してよい。
- 3) CARD12-3 (MOVO=0の時は省略)
 - 1-80 (IMOCI(I), 2014 摂動計算に取り込む空軌道の番号を入力する。必要なだI=ICI1+1,けの行を使って入力してよい。ICI1+ICI2)

4) CARD12-4 (MPERT=0の時は省略)

1-16 (IPERT(I)) 4I4 摂動計算の方法を指定する。

IPERT(1)≠0の場合: RSMP法を行う。

IPERT(2)≠0の場合: RSEN法を行う。

IPERT(3)≠0の場合: BWMP法を行う。

IPERT (4)≠0の場合: BWEN 法を行う。

◇ここで、RSはRayleigh-Shrödinger 法、BWはBrillouin-Wigner 法、MP はMoller - Plesset Denominater、ENはEpstein-Nesbet Denominaterを意味している(DEFAULT = BWEN)。IPERT(I) > 0 の時は、全エネルギー値に摂動計算による補正を加える。

11. 次に計算する分子のための入力

以上で、初めに計算する分子に関する入力は終了する。次に連続して別の分子を計算する場合、CARD5に戻る。

§ 4. その他の注意事項

- 1) このプログラムは、SX-1でも実行可能である。但し、Fock行列生成のn-fン等がベクトル計算機向きにコーディングされているわけではないので、S1000に比べて3倍強しか高速ではない。又、SX-1ではロードモジュール ライブラリはサポートされないので、Y-Xプログラムを使用して頂きたい。
- 2) このプログラムの計算結果から研究成果を発表される場合は、QCPEルールに従って参考 文献の3を引用して頂きたい(口頭発表の場合は不要である)。
- 3) このプログラムは、FORTRAN77 (V)の、NFORM, LNO, OPT=2, IAP, INLINE =2, AUTODBL=DBL4 モードでコンパイルされている。又、SX-1では、FORTRAN77 /SXのFREE2, AUTODBL=DBL4 モードでの動作を確認している。他のオプションはすべて既定値である。
- 4) このプログラムの実行には、約290kwのメモリーが必要である。
- 5) この原稿を書いている時点では、運用の詳細はまだ決定していないが、MNDOAの実行方法のうち、'MNDOA'の部分を 'MNDOC'に、'MNDA'の部分を 'MNDC'にすれば実行できるようになる予定である。

- 6) ソースプログラムの先頭に英文マニュアルがあるので、そちらも参照して頂きたい。又、不明な点は、大阪大学薬学部、薬品分析化学教室、高木(内線 6134)連絡して頂いてもかまわない。
- 7) 末尾に出力例を示した。これは先の入力例によるものである。

§ 5. 謝辞

本プログラムの移植、改良に関する計算の大半は、大阪大学大型計算機センター研究開発計画、「半経験的分子軌道法プログラム、MNDOCの改良と整備」に基づき、実行されました。本件を研究開発課題として承認して頂いた大阪大学大型計算機センター、並びに大阪大学大型計算機センター研究開発委員会に深く感謝致します。

又、プログラムMNDOCの大阪大学大型計算機センター、プログラムライブラリーへの移植、 改良を許可して頂いた、Philips Universitat Marburgの、W. Thiel 博士、及び、プログラムの 移植に際し、種々ご援助を頂いた大阪大学大型計算機センター、後藤米子技官に深謝致します。

なお、このプログラムの改良は、一部、分子科学研究所電子計算機センターのHITAC M200 Hシステム、及び、HITAC M680H+S810/10システムを使用して行われました。 計算機の利用を許可して頂いた、分子科学研究所電子計算機センターに深謝致します。

§ 6. 参考文献

- 1) 佐々木、高木、田中、都倉、大阪大学大型計算機センターニュース 1985、14 (4), 103.
- 2) Thiel, W. J. Am. Soc. 1981, 103, 1413.
- 3) Thiel, W. QCPE #438.

§ 7. 出力例

VINYE CALLON, CLASSICAL STRUCTURE, CZV, MNDOC

SYMMETRY CONDITIONS

	(C) (C)
ATOM TYPE	ია ია ∨ —
	ATOM TYPE

TYPE, I=BOND-LENGTH 2=BOND-ANGLE 3=TWIST-ANGLE

VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

TRIAL GEOMETRY PARAMETERS

TWIST ANGLE (DEGREES) NC NB NA 1	180.0000 180.00000 0.00000
BOND ANGLE (DEGREES) NB NA I	90.00000 90.00000 120.00000 *
BOND LENGTH (ANGSTROMS) NA 1	* * * * * * * * * * * * * * * * * * *
ATOM I C NUMBER	ω ω σ — — —
ATOM NUMBER I	- 0 w 4 m w

SC

NB NB

٧

- ო ო

- 6 2 2

- ~ ~ ~ -

* PARAMETERS TO BE OPTIMIZED, OF WHICH THERE ARE 4 + THE REACTION COORDINATE

VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

TRIAL SET OF ATOMIC COORDINATES (ANGSTROMS)

ATOMIC ORBITALS	5 TO 8 9 TO 9 10 TO 11
Z-COORDINATE	000000000000000000000000000000000000000
Y~COORDINATE	0.000000 0.000000 1.000000 0.000000 -0.935307
X-COORDINATE	0.000000 1.330000 1.330000 2.410000 -0.540000 -0.540000
ATOMIC NO.	© © Ö − − −
ATOM NO.	— <i>ი</i> ო 4 ი ი

INITIAL INTERATOMIC DISTANCES (ANGSTROMS)

	00000.0
	0.00000
4	0.00000 3.09472 3.09472
ო	0.00000 1.47187 2.69115 1.87112
2	0.00000 1.00000 1.08000 2.09086 2.09086
- 3 - 3 - 1	0.00000 1.33000 1.66400 2.41000 1.08000
1	- U M 4 W D

MOLECULAR CHARGE = 1 10 ELECTRONS, AND 5 DOUBLY OCCUPIED MOS

POINT GROUP C2V
SYMMETRY OPTIONS
3 2 1 0 0 2

0

NUMBER OF MOS 5 NUMBER OF VOS 6 PRINTING FLAG 0

CENTERS RELATED BY YZ-PLANE 4 5

VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

FOUND IN RESTART PROCEDURE

FUNCTION VALUE= 294.45022050 IS BEING REPLACED BY VALUE= 293.23648703 THE CORRESPONDING X VALUES AND GRADIENTS ARE ALSO BEING REPLACED	FOUND IN RESTAF
AT THE BEGINNING OF CYCLE 1 THE FUNCTION VALUE IS 0.29323649E+03.	
X(!) 1.32000 1.07000 1.09000 120.57296 G(!) 79.93125 -7.67577 -21.01433 -8.54218	
GRADIENT NORM = 0.8344E+02 ANGLE COSINE = 0.8406E+00 -ALPHA.P.G = 0.6503E+01	
TERMINATION TESTS FUNCTION EVALUATIONS = 4 RELATIVE CHANGE IN X = 0.252E-01 RELATIVE CHANGE IN F = 0.928E-02	
TIME FOR CYCLE 1 IS 0.1 SECONDS.	

AT THE BEGINNING OF CYCLE 2 THE FUNCTION VALUE IS 0.29053944E+03 THE CURRENT POINT IS	
1 1 2 3 4 X(1) 1.26331 1.07665 1.09971 123.19579 G(1) -4.75343 -1.94017 -13.54534 -2.81672	
GRADIENT NORM = 0.1476E+02 ANGLE COSINE = 0.5576E+00 -ALPHA.P.G = 0.6073E+00	
TERMINATION TESTS FUNCTION EVALUATIONS = 6 RELATIVE CHANGE IN X = 0.516E-02 RELATIVE CHANGE IN F = 0.215E-03	
TIME FOR CYCLE 2 IS 0.1 SECONDS.	

4	ť	
á	ė	
ś	è	
ζ)	
?	5	
,	۲,	۰

THE FUNCTION VALUE IS 3 4 1.10528 123.99634 -3.97121 1.49629	
3 2 2 2 2 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3	0.7196E+00 0.4832E-01
NG O NT O O NT O O NT O O NT O O O O O O O	
AT THE BEGINNII THE CURRENT PRINCIPLY X(1) 1.264 G(1) 1.175	ANGLE COSINE -ALPHA.P.G

0.29047708E+03

1 ERMINATION TESTS ...
FUNCTION EVALUATIONS = 8
RELATIVE CHANGE IN X = 0.171E-02
RELATIVE CHANGE IN F = 0.272E-04

TEST ON F SATISFIED TEST ON G SATISFIED VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

EIGENVALUES AND EIGENVECTORS.

10	-2.09018	0.00000	0.0000	-0.69754	0.0000	0000000	0.0000.0	0.27101	0.0000.0	0.00000	-0.46904	0.46904
o	-2.66823	0.42302	-0.37128	0.0000.0	0.0000.0	0.14108	0.27818	0.0000	0.00000	-0.33447	-0.48685	-0.48685
ω	-4.77508	0.39441	0.25094	0.0000.0	0.00000	-0.52652	-0.04074	0 00000	0.00000	0.63071	-0.22891	-0.22891
7	-5.80384	0.00000	0 00000 0	0.0000.0	-0.73855	0 00000 0	0.0000.0	0.0000	0.67420	0.0000.0	0.0000	0.0000
9	-8.44647	0.0000	0.0000	0.05473	0 00000 0	0 00000 0	0 00000 0	-0.90287	0 00000 0	0 00000 0	-0.30153	0.30153
ß	-18.98846	0.0000	0 00000 0	0.0000.0	0.67420	0 00000 0	0.0000.0	0.0000	0.73855	0 00000 0	0.0000	0.00000
4	-22.60534	0.00000	0.0000.0	0.71445	0.0000.0	0.0000.0	0.0000.0	0.33375	0.0000.0	0.0000.0	-0.43484	0.43484
ო	-23.66526	-0.13139	0.57207	0 00000 0	0 00000 0	-0.01382	-0.55901	0.0000	00000.0	-0.40841	-0.29663	-0.29663
2	-28.74463	-0.42765	0.27852	0.0000	0.0000.0	0.54122	0.33696	0.0000	0.0000.0	0.43626	-0.26717	-0.26717
	-40.47748	0.65608	0.21684	0 00000 0	0 00000 0	0.62043	-0.23590	0.0000	0.0000.0	0.13556	0.17829	0.17829
ROOT NO.		-	7	ო	4	വ	9	7	∞	o	01	Ξ

ROOT NO.

	-0.88360	.1868	5893	0.0000.0	.0000	.1575	.6627	.0000	.0000	.3388	.1393	-0.13936
2000		_	C4	ო	4	ഹ	9	1	ω	თ	10	_

BOND ORDER MATRIX.

		7	ო	4	വ	9	7	80 1	6	10
1 - 2 6 4 5 6 7 6 6 0 - 1	-0.10402 0.00000 0.00000 0.35484 -0.45884 0.00000 0.00000 0.508793 0.540440	0.90371 0.90371 0.00000 0.000000 0.055473 0.00000 0.00000 0.000000 0.00000	0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.000000	000000 000000 000000 000000 000000 00000	1.35610 0.08747 0.00000 0.00000 0.65174 -0.05976	0.96337 0.00000 0.00000 0.68666 0.06748	0.22278 0.00000 0.00000 -0.29026 0.29026	000000 000000 000000 000000	0.75101 0.05752 0.05752	0.76048
							-			
=	0.76048									
	HEAT OF FORMATION TOTAL ENERGY ELECTRONIC ENERGY NUCLEAR ENERGY	I ON RGY	290.46916 KCAL/MOLE -285.61109 EV -637.62966 EV 352.01858 EV	CAL/MOLE V V V						

S
CHARGE
g
α
Ø
工
S
S
ŏ
0
-
AT(
NET
ш
Z

DENSITY			0.76048	
CHARGE	.0948	0.24899	.2395	.2395
ATOM NO.	- (NΘ	4	2

MO SYMMETRY NUMBERS.

ო 4 ო 4

THERI	THERE ARE	150 NON2	ZERO	150 NONZERO MATRIX ELEMENTS	. T.S	
CYCLE	_	ENERGY =		-0.0302805 A.U.		
CYCLE	2	ENERGY =		-0.0288007 A.U.		
CYCLE	т т	ENERGY =	ī	-0.0288690 A.U.		
CYCLE	4	ENERGY =	n	-0.0288659 A.U.		
CYCLE	5	ENERGY =	11	-0.0288660 A.U.		
CYCLE	9	ENERGY =	11	-0.0288660 A.U.		
SECO	VD-ORDER	ENERGY	1	SECOND-ORDER ENERGY = -0.0288660 A.U.=	0.7854442 EV= -18.1131288 KCAL/MOLE	MOLE
DAVII	SON COR	RECTION :	ī n	0.0012773 A.U.	DAVIDSON CORRECTION = -0.0012773 A.U.=0.0347557 EV= -0.8015023 KCAL/MOLE	MOLE
COEFI	FICIENT	COEFFICIENT OF SCF CONFIGURATION SQUARE OF COEFFICIENT	J ANC	SURATION	0.9776248 0.9557502	

OPTION-BWEN OPTION-BWEN

> 0.009 SEC 0.005 SEC COMPUTATION TIME FOR INTEGRAL TRANSFORMATION PERTURBATION TREATMENT

VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

OPTIMIZATION FINISHED AFTER 3 CYCLES AND 9 SCF CALCULATIONS

HEAT OF FORMATION 290.46916 KCAL/MOLE

OPTIMIZED VARIABLES AND GRADIENTS

TWIST ANGLE (DEGREES) NC NB NA I	180 . 00000 180 . 00000 0 . 00000
BOND ANGLE (DEGREES) NB NA I	90.00000 90.00000 123.73958 *
BOND LENGTH (ANGSTROMS) NA I	1.26445 * 1.00000 1.07870 * 1.10745 * 1.10745
ATOM!C NUMBER	9
ATOM NUMBER I	- N W 4 W O

S

ΑN

- ო ო

- w 0, 00 ·

INTERATOMIC DISTANCES (ANGSTROMS)

9	00000.0
വ	0.00000
4	828 828
ო	1 1
2	000
_	2 2

VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

290.46916 KCAL/MOLE

18.98846 EV

IONIZATION POTENTIAL

HEAT OF FORMATION

	2	00000		0.0000	0.0000	00000	00000	00000.0
COORDINATES	>-	0 00000	00000	0.000.0	1.00000	0.0000	55025 U-	0.92093
	×	0.0000	1 26445	01101	1.26445	2.34315	-0.61510	-0.61510
ATOM NUMBER			. ~	1	ო	4	г	ω
	_	,				_	ო	m
	¥				_	ო	8	8
	7		_	. ,	24	7	-	_
TWIST ANGLE (DEGREES)	- Г К					180.000	180.000	0.000
BOND ANGLE (DEGREES)	- ¬ ¥			000	80.000	90 . 000	123.740 *	123.740
BOND LENGTH (ANGSTROMS)	- -		1.2645 *	0000	0000.	1.0787 *	1.1075 *	1.1075
ATOM I C NUMBER		9	9	0	ה ה	_		_
ATOM NUMBER	_	_	7	c	ŋ	4	വ	ဖ

CHARGE

SECONDS

0.40

COMPUTATION TIME = SCF CALCULATIONS =