OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

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	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

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、83～84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。[1] 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[2]の計算が可能なプログラム、MNDOC[3]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
MNDOC	minimal	CI
MNDOC	摂動法	

2. 原子種

MINDO/3　：　H, C, N, O, F, Si, P, S, Cl

---

*　現在、藤沢薬品工業勤務。

**　現在、日本ベーリンガー・インゲルハイム勤務。

MNDO　：H, Li, Be, B, C, N, O, F,
　　Al, Si, P, S, Cl

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。

fc	書式	内容
01	なし	密度行列、又は固有ベクトルの入出力に使用する
02	なし	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
03	なし	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
04	なし	DFP法による構造最適化に関する情報を格納する
05	あり	（入力ファイル）
06	あり	（出力ファイル）
07	あり	最適化構造を出力する

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（CH_2CH^+）

```
12345678901234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890123456
  0   -1
 0 1
 1                  1 0-2    VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC
 6
 6          1.33      1
99          1.00              90.
 1          1.08      1       90.                180.0              2 3 1
 1          1.08      1      120.        1       180.               1 2 3
 1                                                 0.               1 2 3

 5  1      1        6
 5  2      1        6

   3   2   1   0   0   2
 4 5
   0   0   0
99
```

1. **CARD 1**（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。

◇CARD3, 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　ＳＣＦ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**　（CARD７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）	I5	構造が最適化されるＣＩ state。DEFAULT＝1
6 - 10		I5	1）２＊２ＣＩの時、KからＬへの２電子励起。
11 - 15		I5	DEFAULT：HOMO→ＬVMO。
16 - 20		I5	2）３＊３ＣＩの時、KからM、LからNへの１電子励起。
1 - 25		I5	（但し、Ｋ，ＬはSOMO）
			DEFAULT：K→L，L→K

9. **CARD11**　（摂動計算のための対称性カード。IABS（KCI）＝２～４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_{2v}、D_{2h}、C_{2h}、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。

C_2　：　C_2 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（ＩＡＸ＝０の時）
又はC_2 軸がＸ軸でC_s 平面がＸＺ平面（ＩＡＸ＝１の時）

D_{2h} ： C_2軸がX軸で主C_s平面がXY平面、もう1つのC_s平面がYZ平面。

C_{2h} ： C_2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XZ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 ではダミー原子は数えない。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) CARD11－1

1－4	(ISUB)	I4	点群の指定。
			0 ： C_1　　3 ： C_{2v}
			1 ： C_s　　4 ： D_{2h}
			2 ： C_2　　5 ： C_{2h}
5－8	(IOZ)	I4	点群がC_{2v}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	(IAXE)	I4	上記のN回回転軸の指定。
			0 ： Z軸　　2 ： Y軸
			1 ： X軸　　3 ： Z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：ICI1番目のMOがHOMOとなるように被占軌道を選択し、LVMOから順にICI2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), 20I4　I＝1, ICI1）　摂動計算に取り込む被占軌道の番号を入力する。入力方法は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), 20I4　I＝ICI1＋1, ICI1＋ICI2）　摂動計算に取り込む空軌道の番号を入力する。必要なだけの行を使って入力してよい。

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行列生成のルーチ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、ソース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290 kw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 Uhiversitat 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 M200H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

VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

SYMMETRY CONDITIONS

VARIABLE PARAMETER LOCATION ATOM	TYPE	NUMBERS OF ATOMS FOR WHICH PARAMETER EQUALS VARIABLE PARAMETER
5	1	6
5	2	6

****

TYPE. 1=BOND-LENGTH 2=BOND-ANGLE 3=TWIST-ANGLE

VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

TRIAL GEOMETRY PARAMETERS

ATOM NUMBER I	ATOMIC NUMBER	BOND LENGTH (ANGSTROMS) NA I	BOND ANGLE (DEGREES) NB NA I	TWIST ANGLE (DEGREES) NC NB NA I	NA	NB	NC
1	6						
2	6	1.33000 *			1		
3	99	1.00000	90.00000		2	1	
4	1	1.08000 *	90.00000	180.00000	2	3	1
5	1	1.08000 *	120.00000 *	180.00000	1	2	3
6	1	1.08000	120.00000	0.00000	1	2	3

****

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

VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

TRIAL SET OF ATOMIC COORDINATES (ANGSTROMS)

ATOM NO.	ATOMIC NO.	X-COORDINATE	Y-COORDINATE	Z-COORDINATE	ATOMIC ORBITALS
1	6	0.000000	0.000000	0.000000	1 TO 4
2	6	1.330000	0.000000	0.000000	5 TO 8
3	99	1.330000	1.000000	0.000000	
4	1	2.410000	0.000000	0.000000	9 TO 9
5	1	-0.540000	-0.935307	0.000000	10 TO 10
6	1	-0.540000	0.935307	0.000000	11 TO 11

INITIAL INTERATOMIC DISTANCES (ANGSTROMS)

	1	2	3	4	5	6
1	0.00000					
2	1.33000	0.00000				
3	1.66400	1.00000	0.00000			
4	2.41000	1.08000	1.47187	0.00000		
5	1.08000	2.09086	2.69115	3.09472	0.00000	
6	1.08000	2.09086	1.87112	3.09472	1.87061	0.00000

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

OPTIONS 1 0 0 0 0 0 50 0 0 1 0-2 4 4

POINT GROUP C2V

SYMMETRY OPTIONS
3 2 1 0 0 2 0 0

CENTERS RELATED BY YZ-PLANE
4 5

NUMBER OF MOS 5
NUMBER OF VOS 6
PRINTING FLAG 0

```
     VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC


*****

     FUNCTION VALUE=   294.45022050     IS BEING REPLACED BY VALUE=   293.23648703     FOUND IN RESTART PROCEDURE
     THE CORRESPONDING X VALUES AND GRADIENTS ARE ALSO BEING REPLACED

AT THE BEGINNING OF CYCLE    1  THE FUNCTION VALUE IS    0.29323649E+03
 THE CURRENT POINT IS ...

   I        1           2           3           4
 X(I)    1.32000     1.07000     1.09000   120.57296
 G(I)   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 ...

   I        1           2           3           4
 X(I)    1.26331     1.07665     1.09971   123.19579
 G(I)   -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.
```

```
*****

AT THE BEGINNING OF CYCLE    3  THE FUNCTION VALUE IS    0.29047708E+03
 THE CURRENT POINT IS ...

   I        1           2           3           4
 X(I)    1.26483     1.07825     1.10528   123.99634
 G(I)    1.17588    -0.35586    -3.97121     1.49629

 GRADIENT NORM =  0.4418E+01
 ANGLE COSINE  =  0.7196E+00
 -ALPHA.P.G    =  0.4832E-01

 TERMINATION 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.

ROOT NO.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
	-40.47748	-28.74463	-23.66526	-22.60534	-18.98846	-8.44647	-5.80384	-4.77508	-2.66823	-2.09018
1	0.65608	-0.42765	-0.13139	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.39441	0.42302	0.00000
2	0.21684	0.27852	0.57207	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.25094	-0.37128	0.00000
3	0.00000	0.00000	0.00000	0.71445	0.00000	0.05473	0.00000	0.00000	0.00000	-0.69754
4	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.67420	0.00000	-0.73855	0.00000	0.00000	0.00000
5	0.62043	0.54122	-0.01382	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-0.52652	0.14108	0.00000
6	-0.23590	0.33696	-0.55901	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-0.04074	0.27818	0.00000
7	0.00000	0.00000	0.00000	0.33375	0.00000	-0.90287	0.00000	0.00000	0.00000	0.27101
8	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.73855	0.00000	0.67420	0.00000	0.00000	0.00000
9	0.13556	0.43626	-0.40841	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.63071	-0.33447	0.00000
10	0.17829	-0.26717	-0.29663	-0.43484	0.00000	-0.30153	0.00000	-0.22891	-0.48685	-0.46904
11	0.17829	-0.26717	-0.29663	0.43484	0.00000	0.30153	0.00000	-0.22891	-0.48685	0.46904

ROOT NO. 11

-0.88360

1	-0.18681
2	-0.58934
3	0.00000
4	0.00000
5	0.15757
6	-0.66278
7	0.00000
8	0.00000
9	0.33887
10	-0.13936
11	-0.13936

BOND ORDER MATRIX.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	1.26119									
2	-0.10402	0.90371								
3	0.00000	0.00000	1.02089							
4	0.00000	0.00000	0.00000	0.90909						
5	0.35484	0.55473	0.00000	0.00000	1.35610					
6	-0.45084	-0.55420	0.00000	0.00000	0.08747	0.96337				
7	0.00000	0.00000	0.47690	0.00000	0.00000	0.00000	0.22278			
8	0.00000	0.00000	0.00000	0.99586	0.00000	0.00000	0.00000	1.09091		
9	-0.08793	-0.16548	0.00000	0.00000	0.65174	0.68666	0.00000	0.00000	0.75101	
10	0.54040	-0.41089	-0.62134	0.00000	-0.05976	0.06748	-0.29026	0.00000	0.05752	0.76048
11	0.54040	-0.41089	0.62134	0.00000	-0.05976	0.06748	0.29026	0.00000	0.05752	0.00414

	11
11	0.76048

HEAT OF FORMATION	290.46916 KCAL/MOLE
TOTAL ENERGY	-285.61109 EV
ELECTRONIC ENERGY	-637.62966 EV
NUCLEAR ENERGY	352.01858 EV

NET ATOMIC CHARGES.

ATOM NO.	CHARGE	DENSITY
1	-0.09488	4.09488
2	0.36684	3.63316
3	0.24899	0.75101
4	0.23952	0.76048
5	0.23952	0.76048

MO SYMMETRY NUMBERS.

1 1 1 4 3 4 3 1 1 4 1

THERE ARE 150 NONZERO MATRIX ELEMENTS.

CYCLE 1 ENERGY = -0.0302805 A.U.
CYCLE 2 ENERGY = -0.0288007 A.U.
CYCLE 3 ENERGY = -0.0288690 A.U.
CYCLE 4 ENERGY = -0.0288659 A.U.
CYCLE 5 ENERGY = -0.0288660 A.U.
CYCLE 6 ENERGY = -0.0288660 A.U.

SECOND-ORDER ENERGY = -0.0288660 A.U.= -0.7854442 EV= -18.1131288 KCAL/MOLE OPTION=BWEN

DAVIDSON CORRECTION = -0.0012773 A.U.= -0.0347557 EV= -0.8015023 KCAL/MOLE OPTION=BWEN

COEFFICIENT OF SCF CONFIGURATION 0.9776248
SQUARE OF COEFFICIENT 0.9557502

COMPUTATION TIME FOR
INTEGRAL TRANSFORMATION 0.009 SEC
PERTURBATION TREATMENT 0.005 SEC

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

I	1	2	3	4
X(I)	1.26445	1.07870	1.10745	123.73958
G(I)	0.07856	0.04934	-0.03127	0.00435

ATOM NUMBER I	ATOMIC NUMBER	BOND LENGTH (ANGSTROMS) NA I	BOND ANGLE (DEGREES) NB NA I	TWIST ANGLE (DEGREES) NC NB NA I	NA	NB	NC
1	6						
2	6	1.26445 *			1		
3	99	1.00000	90.00000		2	1	
4	1	1.07870 *	90.00000	180.00000	2	3	1
5	1	1.10745 *	123.73958 *	180.00000	1	2	3
6	1	1.10745	123.73958	0.00000	1	2	3

INTERATOMIC DISTANCES (ANGSTROMS)

	1	2	3	4	5	6
1	0.00000					
2	1.26445	0.00000				
3	1.61209	1.00000	0.00000			
4	2.34315	1.07870	1.47091	0.00000		
5	1.10745	2.09304	2.68750	3.09828	0.00000	
6	1.10745	2.09304	1.88122	3.09828	1.84185	0.00000

VINYL CATION, CLASSICAL STRUCTURE, C2V, MNDOC

HEAT OF FORMATION 290.46916 KCAL/MOLE

IONIZATION POTENTIAL 18.98846 EV

CHARGE 1

ATOM NUMBER I	ATOMIC NUMBER	BOND LENGTH (ANGSTROMS) J I	BOND ANGLE (DEGREES) K J I	TWIST ANGLE (DEGREES) L K J I	J	K	L
1	6						
2	6	1.2645 *			1		
3	99	1.0000	90.000		2	1	
4	1	1.0787 *	90.000	180.000	2	3	1
5	1	1.1075 *	123.740 *	180.000	1	2	3
6	1	1.1075	123.740	0.000	1	2	3

ATOM NUMBER I	COORDINATES X	Y	Z
1	0.00000	0.00000	0.00000
2	1.26445	0.00000	0.00000
3	1.26445	1.00000	0.00000
4	2.34315	0.00000	0.00000
5	-0.61510	-0.92093	0.00000
6	-0.61510	0.92093	0.00000

COMPUTATION TIME = 0.40 SECONDS

SCF CALCULATIONS = 9