

MOPAC 用 extdh

Extdh で計算した分子軌道の形を MOPAC で書かせるプログラムです。MOPAC 用の出力ファイル hdat.dat と hdat1.wob を出力する以外は、通常の extdh です。

インストール

フォートランプログラム extdh3.f をコンパイルしておきます。

計算

- (1) 通常通り extdh.dat を作っておきます。もちろん S に d は入れない。ただし遷移金属のように本来 d 軌道のあるものについてはそのまま使えます。
- (2) extdh3 を走らせます。通常のファイルの他に hdat.dat と hdat1.wob ができます。
- (3) MOPAC で hdat.dat を open します。[File][Open]
- (4) MOPAC を一度走らせます。[Calculation][Start]
- (5) MOPAC のつくってきた hdat.wob の名前を別のものに変更し(例えば hdat2.wob)、extdh のつくった hdat1.wob の名前を hdat.wob に変更します。
- (6) MOPAC から [Properties][Molecular Orbital] で分子軌道の形を描かせると、extdh の結果に従って作図します。ただしエネルギーの値は MOPAC のものが表示されます。