

Gaussian 03 Document

藤田忠男
e-mail: molecule@emolec.com

February 21, 2006

Chapter 1

座標の指定方法

座標は基本的には、フリ-フォ-マツト (free format) で入力します。元素は、化学記号で指定してください。数字の間は、カラムを空けるかコンマで区切ってください。これは、Gaussian 98/03 は、Fortran 文で書かれているからです。ふつうは、カラムをあけて書いていきますので、みにくくなるので、コンマの使用をさけたほうがいいでしょう。

内部座標もしくはカルテシアン座標で入力できますが、内部座標を指定するほうが Gaussian 98/03 の機能を引き出すのに有利です。できるかぎり、内部座標でモデルを作成するようにこころがけてください。

1.1 内部座標の定義

原子の位置は、それ以前に定義された原子との距離、角度、二面体角で定義できます。それぞれの定義は、2, 3, 4 個の原子で構成されます。

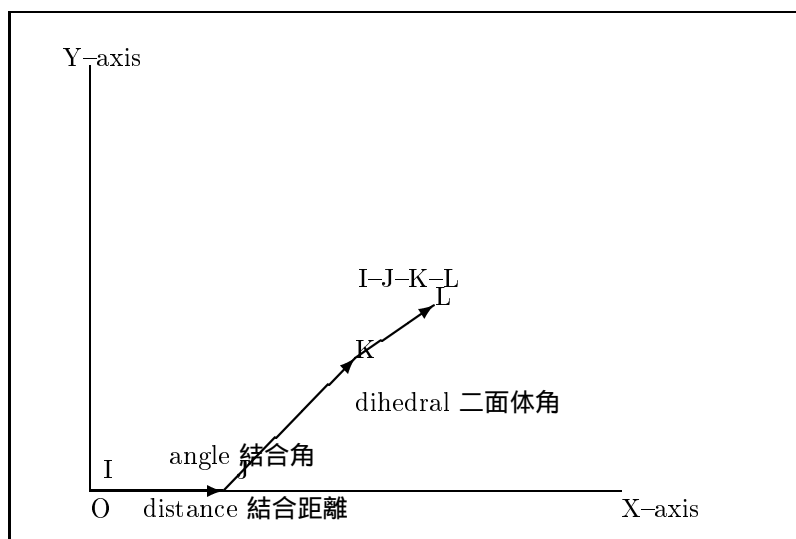
1. Atom 1 – いつも原点にします。座標を指定してはいけません。
2. Atom 2 – 原子 1 からの距離で指定してください。
3. Atom 3 – 原子 1 もしくは原子 2 に結合して、それからの距離とその前の原子との角度で指定してください。暗黙には、原子 2 に結合しているものとして。角度は、3-2-1 または 3-1-2 で指定してください。

1.1.1 座標指定の約束事

1. 原則的に原子間距離は、ゼロより大きくしてください。
2. 結合角は、0.0 から ± 180.0 の間で定義してください。
3. 二面体角は、定義できるようにしてください。直線分子に関しては、誤りが生じることがあります。
 - (a) 角度がゼロもしくは 180 度のときは、二面体角は定義する必要はありません。
 - (b) 3 原子がアセチレンやアセトニトリルのように直線にあるとき。

1.2 二面体角についての理解

下の図のように、1, 2 番目の原子は、原子間距離と角度から決定されます。ここで、1 番目の原子は、X 軸上におかれます。また、2 番目の原子は、XY 平面状におかれます。更に、3 番目の原子は、二面体角を指定することにより決定されます。これは、3 次元空間におかれます。それぞれ、I-J, I-J-K, I-J-K-L で定義されています。J-K を軸にして、K-L を I-J にあわせるように回転させるときの角度を二面体角と定義され、反時計周り方向を正とします。シスをゼロ、トランスを 180 度と覚えてください。



具体的には、原子の座標を、次のように定義します。

Element	N1	Length	N2	Alpha	N3	Beta
---------	----	--------	----	-------	----	------

記号の後に、数字を付けることができます。原子の定義した番号 N1, N2, と N3 で、結合距離、結合角度、二面体角を定義しています。二面体角は、4 つの原子で定義されます。ここで、Length, Alpha, と Beta は、それぞれ結合の長さ、結合角、二面体角を実数で入力してください。つぎに、一例を示します。なお、詳しいことは、*Gaussian 98 Navigator* を参照してください。

```
Line 1    AM1
Line 2 Ethane
Line 3
Line 4    C
Line 5    C      1      r21
Line 6    H      2      r32      1      a321
Line 7    H      2      r32      1      a321      3      d4213
Line 8    H      2      r32      1      a321      3      -d4213
Line 9    H      1      r32      2      a321      3      60.
Line 10   H      1      r32      2      a321      3      180.
Line 11   H      1      r32      2      a321      3      d300
Line 12
Line 13           r21      1.5
Line 14           r32      1.1
Line 15           a321     109.5
Line 16           d4313    120.0
Line 17
Line 18           d300     300.0
Line 19
```

E-learning Demonstration

発行所 (有) 分子 出版部

千葉県柏市あけぼの 1-8-20-601 (郵便番号 277-0841)

発行日 February 21, 2006

E-mail: molecule@emolec.com

Web site: <http://www.emolec.com/>