

基準振動解析 (NMA)

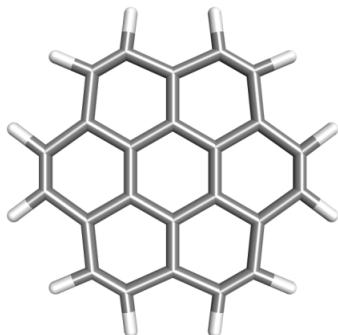
1. 計算設定

以下のように設定した。

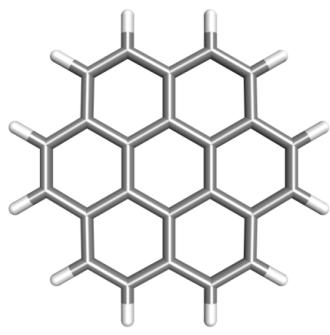
- Methods : GE0OPT, NMA
- Potential : SMASH (b3lyp/cc-pvdz)
- System : Coronene ($C_{24}H_{12}$)

2. 結果

まず構造最適化 (GE0OPT) を行う必要がある。以下のように構造が最適化された。



(a) initial structure



(b) optimized structure

各炭素原子間の距離は以下のように求まった。

C-C bond length [Å]	(a) initial	(b) optimized
①	1.115	1.375
②	1.409	1.430
③	1.409	1.430
④	1.115	1.375

次に、基準振動解析 (NMA) を行う。基準振動モードの固有値と固有ベクトルは

“nma.out” に Gaussian-like な形式で出力される。

Standard orientation:									
Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)						
			X	Y	Z				
1	6	0	-1.238466	-0.715152	0.000000				
2	6	0	-1.238466	0.715152	0.000000				
3	6	0	0.000000	1.430010	0.000000				
4	6	0	1.238466	0.715152	0.000000				
5	6	0	1.238466	-0.715152	0.000000				
6	6	0	0.000000	-1.430010	0.000000				
7	6	0	-2.471511	-1.427080	0.000000				
8	6	0	-2.471511	1.427080	0.000000				
9	6	0	0.000000	2.854059	0.000000				
... 略 ...									
35	1	0	-3.389026	3.397836	0.000000				
36	1	0	-1.246508	4.633954	0.000000				

Harmonic frequencies (cm**-1), IR intensities (KM/Mole),
Raman scattering activities (A**4/AMU), Raman depolarization ratios,
reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A) and normal coordinates:
1 2 3
?A ?A ?A
Frequencies -- 0.0000 0.0000 0.0000
Red. masses -- 8.1077 7.1737 6.6919
Frc consts -- 0.0000 0.0000 0.0000
IR inten -- 0.0000 0.0000 0.0000
Raman Activ -- 0.0000 0.0000 0.0000
Depolar -- 0.0000 0.0000 0.0000
Atom AN X Y Z X Y Z X Y Z
1 6 -0.02 0.15 0.00 -0.09 -0.06 -0.05 0.01 0.01 -0.16
2 6 -0.02 0.15 0.00 -0.13 -0.06 -0.04 0.03 0.01 -0.12
3 6 -0.02 0.15 0.03 -0.15 -0.02 -0.02 0.04 -0.01 -0.05
4 6 -0.02 0.16 0.05 -0.13 0.02 -0.01 0.03 -0.02 -0.02
5 6 -0.02 0.16 0.05 -0.09 0.02 -0.02 0.01 -0.02 -0.06
6 6 -0.02 0.15 0.03 -0.07 -0.02 -0.04 0.00 -0.01 -0.13
7 6 -0.02 0.15 -0.02 -0.07 -0.09 -0.07 0.00 0.03 -0.23
8 6 -0.02 0.15 -0.02 -0.15 -0.09 -0.05 0.04 0.03 -0.14
9 6 -0.03 0.15 0.03 -0.20 -0.02 -0.01 0.06 -0.01 0.00
10 6 -0.02 0.16 0.07 -0.15 0.05 0.01 0.04 -0.04 0.05
11 6 -0.02 0.16 0.07 -0.07 0.05 -0.01 0.00 -0.04 -0.03
12 6 -0.01 0.15 0.03 -0.03 -0.02 -0.05 -0.02 -0.01 -0.17
13 6 -0.03 0.16 0.05 -0.22 0.02 0.01 0.07 -0.02 0.06
14 6 -0.03 0.16 0.07 -0.20 0.05 0.02 0.06 -0.04 0.09
15 6 -0.02 0.16 0.10 -0.13 0.09 0.02 0.03 -0.06 0.08
16 6 -0.02 0.16 0.10 -0.09 0.09 0.01 0.01 -0.06 0.04
17 6 -0.01 0.16 0.07 -0.03 0.05 -0.02 -0.02 -0.04 -0.08
18 6 -0.01 0.16 0.05 -0.01 0.02 -0.04 -0.03 -0.02 -0.14
19 6 -0.01 0.15 -0.02 -0.03 -0.09 -0.08 -0.02 0.03 -0.27
20 6 -0.01 0.15 0.00 -0.01 -0.06 -0.07 -0.03 0.01 -0.24
21 6 -0.02 0.15 -0.05 -0.09 -0.13 -0.08 0.01 0.05 -0.25
22 6 -0.02 0.15 -0.05 -0.13 -0.13 -0.07 0.03 0.05 -0.21
23 6 -0.03 0.15 -0.02 -0.20 -0.09 -0.04 0.06 0.03 -0.10
24 6 -0.03 0.15 0.00 -0.22 -0.06 -0.02 0.07 0.01 -0.03
25 1 -0.03 0.16 0.05 -0.25 0.02 0.02 0.08 -0.02 0.10
26 1 -0.03 0.16 0.09 -0.21 0.08 0.04 0.07 -0.05 0.14
27 1 -0.02 0.17 0.12 -0.15 0.12 0.04 0.03 -0.07 0.13
28 1 -0.02 0.17 0.12 -0.08 0.12 0.02 0.00 -0.07 0.06
29 1 -0.01 0.16 0.09 -0.01 0.08 -0.01 -0.03 -0.05 -0.06
30 1 -0.01 0.16 0.05 0.03 0.02 -0.05 -0.05 -0.02 -0.18

31	1	-0.01	0.15	-0.04	-0.01	-0.12	-0.09	-0.03	0.04	-0.32
32	1	-0.01	0.15	0.00	0.03	-0.06	-0.08	-0.05	0.01	-0.27
33	1	-0.02	0.14	-0.07	-0.08	-0.16	-0.09	0.00	0.06	-0.31
34	1	-0.02	0.14	-0.07	-0.15	-0.16	-0.08	0.03	0.06	-0.23
35	1	-0.03	0.15	-0.04	-0.21	-0.12	-0.05	0.07	0.04	-0.12
36	1	-0.03	0.15	0.00	-0.25	-0.06	-0.01	0.08	0.01	0.00
• • • 以下、略 • • •										

最低振動数モードは、以下の様に得られる。

