

Słowo kluczowe MOPAC	Symbol	Opis	MOPAC
PM7 PRECISE	nAT	Liczba atomów w cząsteczce	Empirical formula
	nX	Liczba podstawników	Empirical formula
	MW	Masa cząsteczkowa	Molecular weight
	HOF	Entalpia tworzenia cząsteczki	Final heat of formation
	EE	Energia elektronowa	Electronic energy
	Core	Energia odpychania rdzeni atomowych	CORE-CORE repulsion
	TE	Energia całkowita	Total energy
	HOMO	Energia najwyższego obsadzonego orbitala molekularnego	HOMO LUMO Energies (eV)
	LUMO	Energia najniższego nieobsadzonego orbitala molekularnego	HOMO LUMO Energies (eV)
	D	Moment dipolowy	Dipole
	SAS	Powierzchnia dostępna dla rozpuszczalnika	Cosmo area
	MV	Objętość molekularna	Cosmo volume
Q-	Największa wartość ujemnego ładunku Mullikena na jednym z atomów	Eigenvalues	
Q+	Największa wartość dodatniego ładunku Mullikena na jednym z atomów	Eigenvalues	
PM7 1SCF CHARGE=1 DOUBLET PRECISE	TE+	Energia całkowita kationu	Total energy
PM7 1SCF STATIC	Ahof	Polaryzowalność obliczona na podstawie ciepła tworzenia	Average polarizability from H.o.F
	Ad	Polaryzowalność obliczona na podstawie momentu dipolowego	Average polarizability from Dipole
PM7 1SCF SUPER	EN	Elektroujemność Mullikena	Mulliken electronegativity
	Hard	Twardość chemiczna – odporność molekuly na reakcje chemiczne	Parr & Pople absolute hardness
	Shift	Potencjał chemiczny równy połowie różnicy pomiędzy energiami HOMO LUMO	Schuermann MO shift alpha
PM7 1SCF COSWRT EPS=78.4	HOFc	Entalpia tworzenia cząsteczki w roztworze – obliczane według modelu COSMO	Final heat of formation
	TEc	Energia całkowita cząsteczki w roztworze – obliczana według modelu COSMO	Total energy