

Słowa kluczowe MOPAC	Symbol	Opis	MOPAC
PM6 PRECISE	nAT	liczba atomów w cząsteczce	Empirical formula
	nX	liczba podstawników chloru	Empirical formula
	MW	masa cząsteczkowa	Molecular weight
	HOF	standardowe ciepło tworzenia	Final heat of formation
	EE	energia elektronowa	Electronic energy
	Core	energia rdzenia	CORE-CORE repulsion
	TE	energia całkowita	Total energy
	HOMO	energia najwyższej obsadzonego orbitala molekularnego	HOMO LUMO Energies (EV)
	LUMO	energia najniższej obsadzonego orbitala molekularnego	HOMO LUMO Energies (EV)
	D	moment dipolowy	Dipole
	SAS	powierzchnia dostępu rozpuszczalnika	Cosmo area
	MV	objętość cząsteczkowa	Cosmo volume
	Q ₋	najniższy ujemny ładunek cząstkowy	Eigenvalues
Q ₊	najwyższy dodatni ładunek cząstkowy	Eigenvalues	
PM6 1SCF CHARGE=1 DOUBLET PRECISE	TE ₊	energia całkowita kationu	Total energy
PM6 1SCF STATIC	Ahof	polaryzowalność uzyskana z ciepła tworzenia	Average Polarizability from H.o.F [ANG.**3]
	Ad	polaryzowalność uzyskana z momentu dipolowego	Average Polarizability from Dipole [ANG.**3]
PM6 1SCF SUPER	EN	elektroujemność Mullikena	Mulliken electronegativity
	Hard	twardość bezwzględna	Parr & Pople absolute hardness
	Shift	Schuermann MO shift alpha	Schuermann MO shift alpha
PM6 1SCF COSWRT EPS=78.4	HOF _c	standardowe ciepło tworzenia, obliczone z uwzględnieniem wpływu rozpuszczalnika symulującego wodę - Conductor-like Screening Model (COSMO)	Final heat of formation
	TE _c	energia całkowita obliczona z uwzględnieniem wpływu rozpuszczalnika symulującego wodę - Conductor-like Screening Model (COSMO)	Total energy