

 winmostar チュートリアル

NWChem

# 元素ごとの基底関数・ECP設定

V11.7.5

2024年5月7日

株式会社クロスアビリティ

# 本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

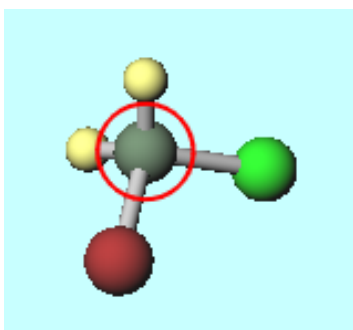
# 概要

ブロモクロロメタン(CH<sub>2</sub>BrCl)の元素ごとの基底関数の設定、基底関数及びECPの設定をします。

基底関数のみの設定 C,Cl,Br: 6-31G\*、H: STO-3G

基底関数及びECPの設定 C,H: 6-31G\*、Cl,Br: LANL2DZ(基底関数、ECP共に)

注意：元素ごとに指定する場合は、最新版Winmostar(V11.7.5以降)をご利用ください。



## 基底関数のみ

```
BASIS cartesian
* library 6-31G* except H
H library STO-3G
end
```

## 基底関数及びECP

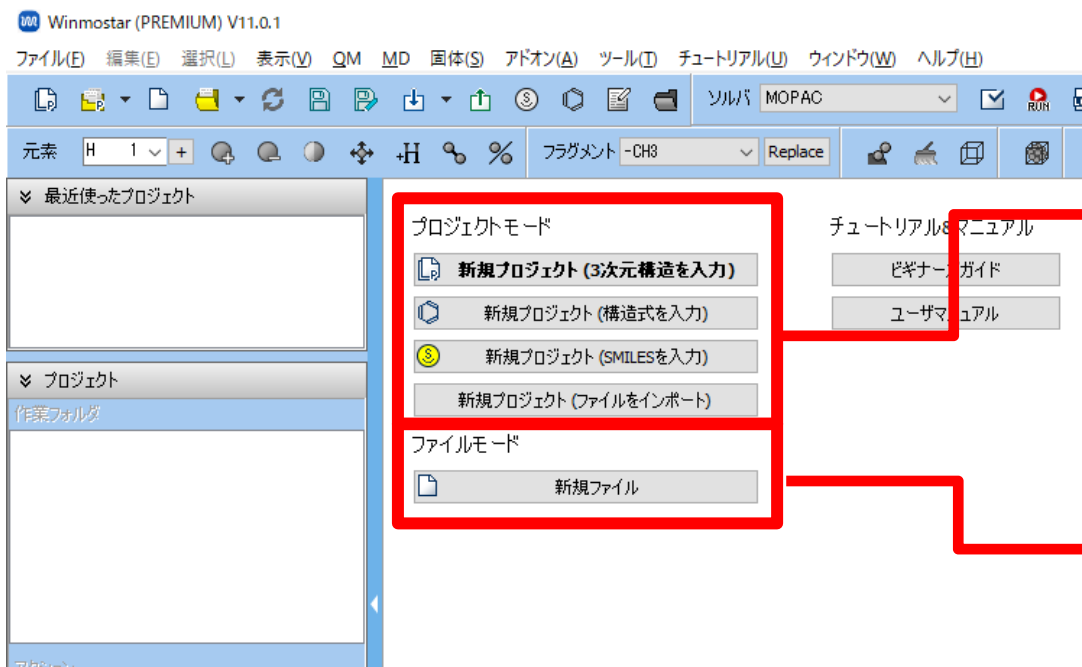
```
BASIS cartesian
* library 6-31G* except Cl Br
Cl library lanl2dz_ecp
Br library lanl2dz_ecp
end
ecp
Cl library lanl2dz_ecp
Br library lanl2dz_ecp
end
```

# Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**と**ファイルモード**の2つの動作モードが用意されています。

本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。

ファイルモードの操作方法は[V10のNWChemチュートリアル](#)を参照してください。



## プロジェクトモード V11新機能

ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

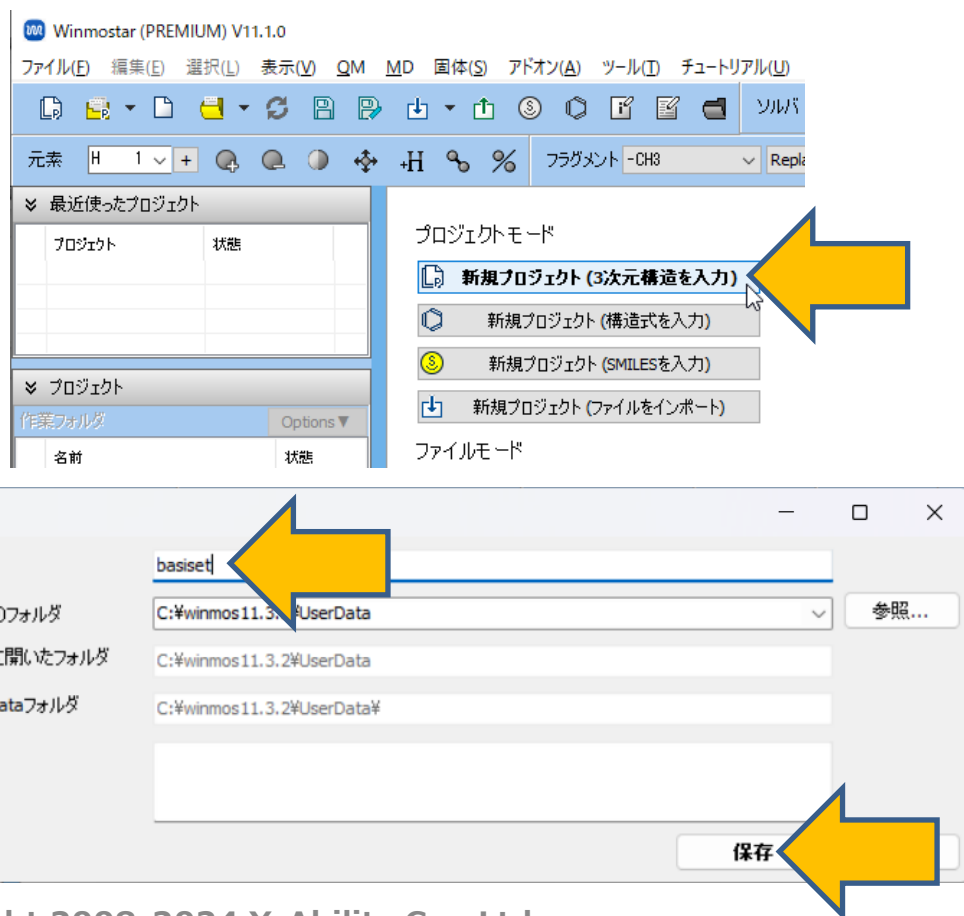
## ファイルモード

ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

継続ジョブを作成するときに、ファイルモードまたはV10以前では都度継続元ジョブの最終構造を表示する必要がありますが、プロジェクトモードでは自動で最終構造が引き継がれます。

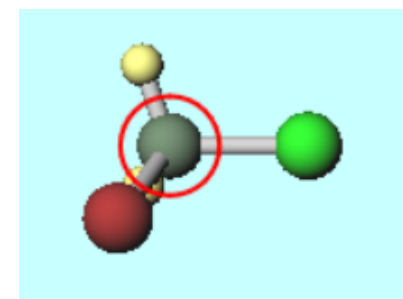
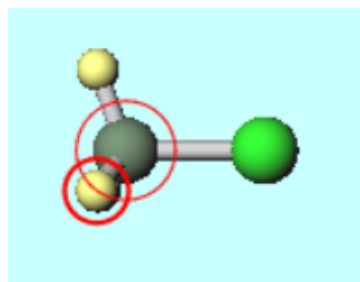
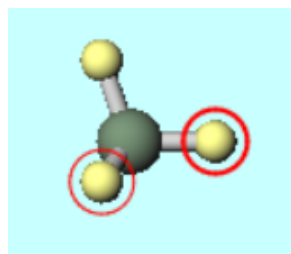
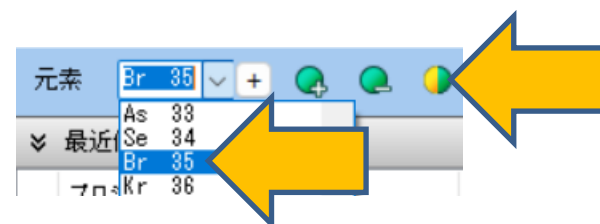
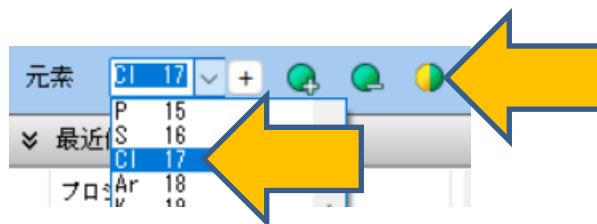
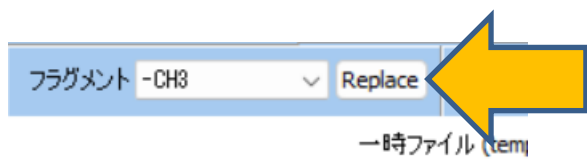
# I. 系のモデリング

1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト（3次元構造を入力）**をクリックします。（すでに起動している場合は**ファイル | 新規プロジェクト**をクリックします。）
2. **プロジェクト名**に「basiset」と入力し**保存**をクリックします。



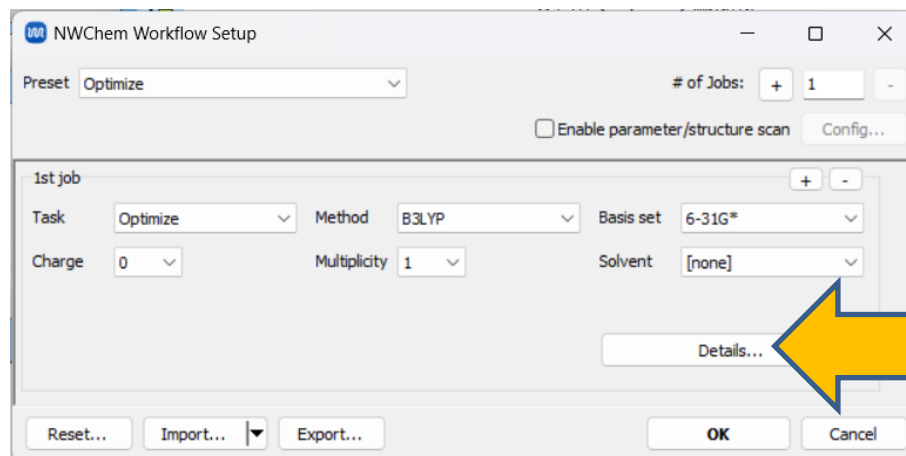
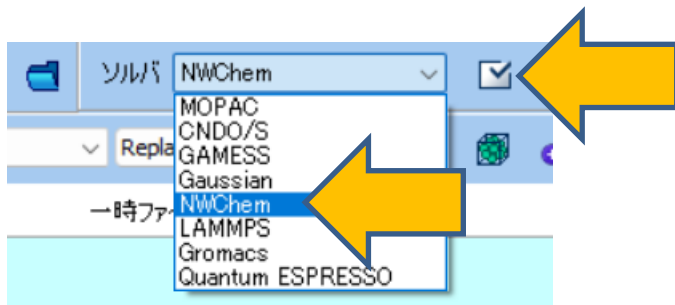
# I. 系のモデリング

1. フラグメントを選択が-CH<sub>3</sub>の状態です、その右にあるReplaceボタンを1回クリックし、メタンを作成します。
2. 水素原子が太い赤丸で選択された状態で、メインウィンドウ上部の編集操作向けの元素を選択メニューからCl 17を選択し、元素を変更ボタンをクリックして、クロロメタンを作成します。
3. 別の水素原子が太い赤丸で選択された状態で、編集操作向けの元素を選択メニューからBr 35を選択し、元素を変更ボタンをクリックして、ブロモクロロメタンを作成します。



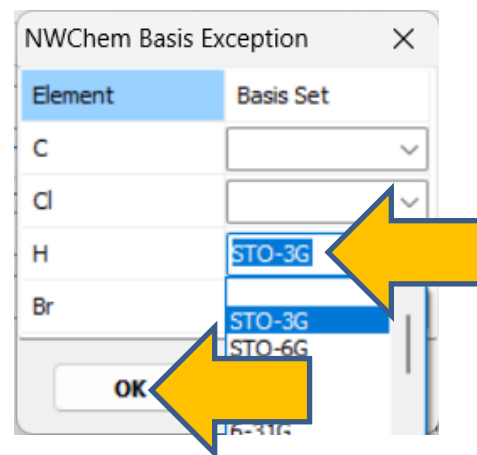
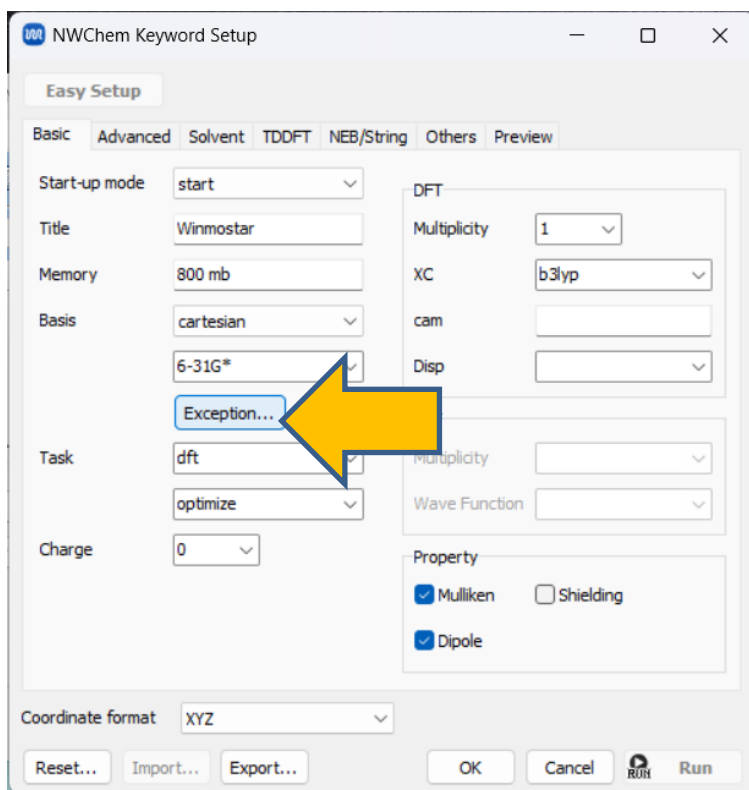
## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

1. ソルバを選択メニューでNWChemを選択して、ワークフロー設定ボタンをクリックします。
2. NWChem Workflow SetupウィンドウでDetailsボタンをクリックします。



## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

1. NWChem Keyword SetupウィンドウでBasisのExceptionボタンをクリックします。
2. NWChem Basis ExceptionウィンドウでHのみSTO-3Gを選択して、OKボタンをクリックします。これで、HはSTO-3G、他の元素は6-31G\*となります。





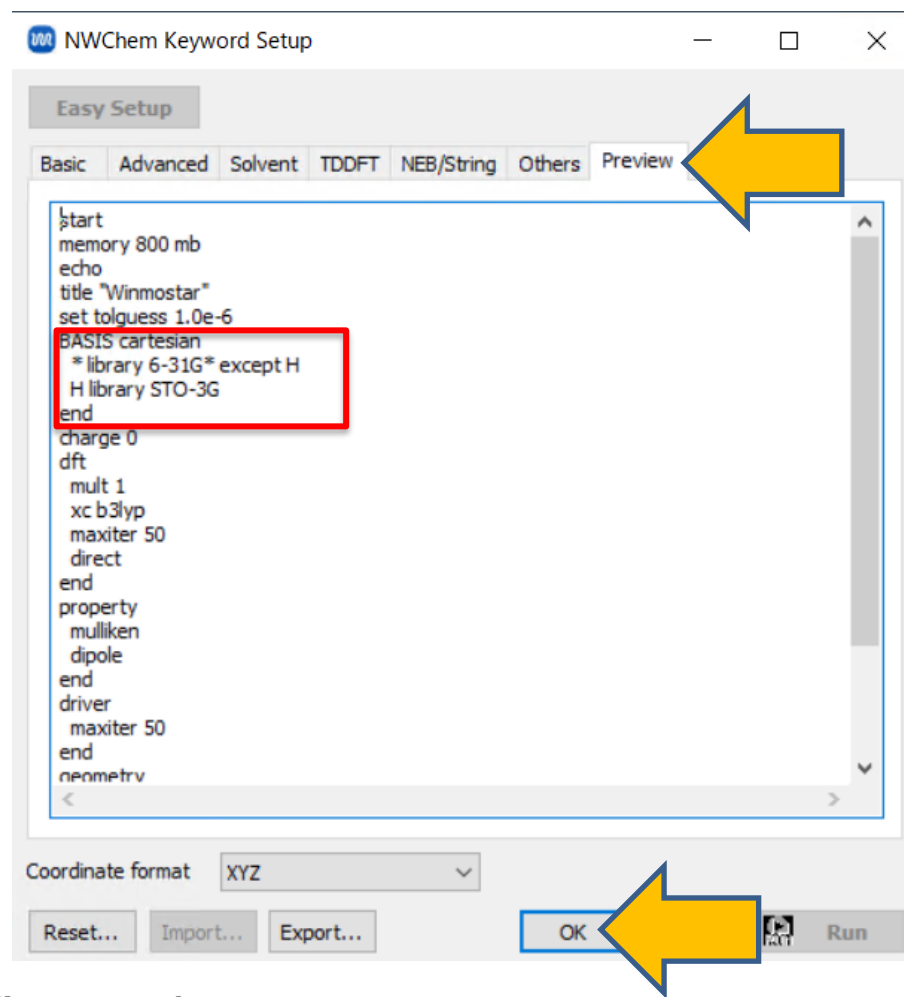
## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

### 1. Previewタブをクリックして、Basisの記述が

\* Library 6-31G\* except H  
H library STO-3G

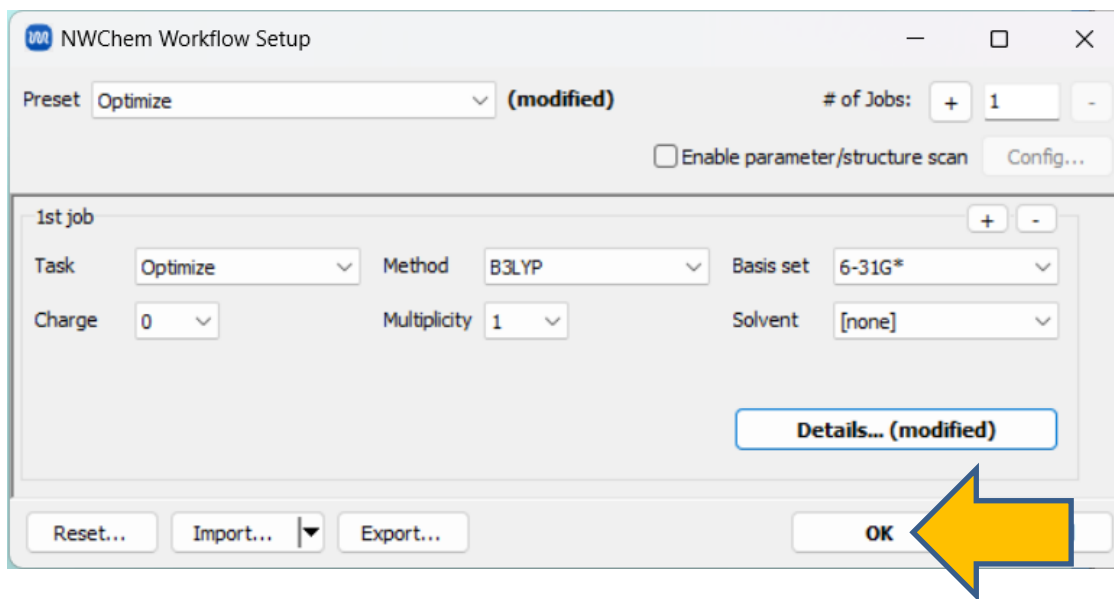
となっていることを確認してください。

### 2. 右下の**OK**ボタンをクリックします。



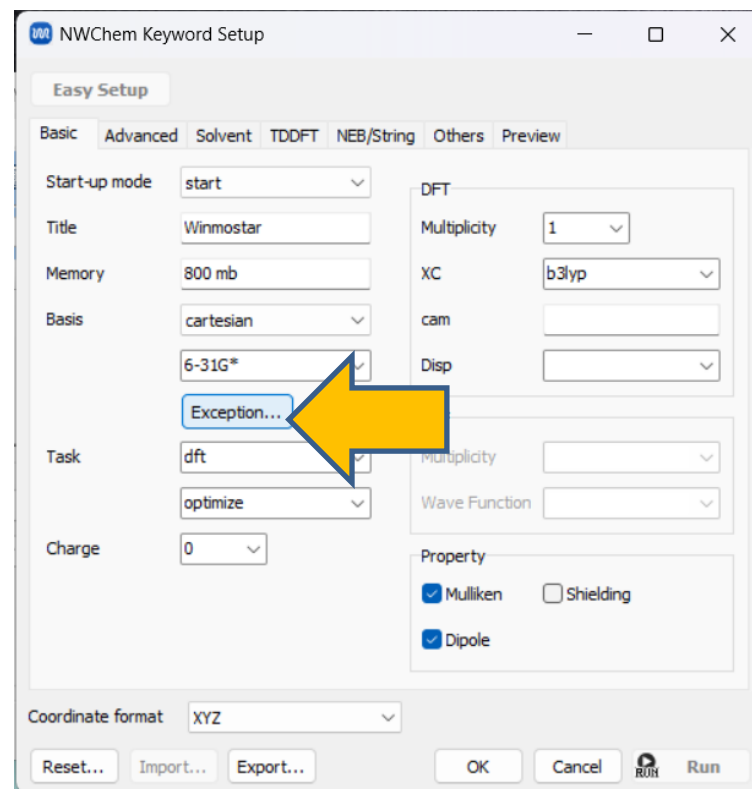
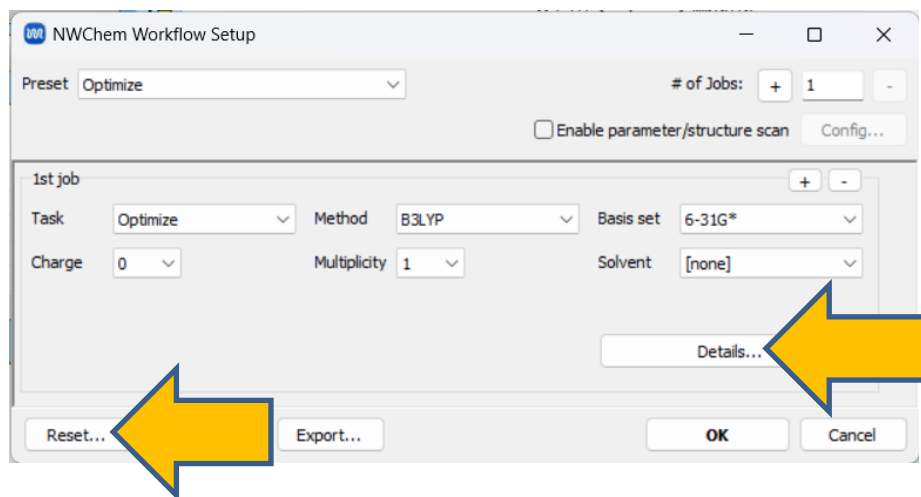
## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

1. NWChem Workflow Setupウィンドウで**OK**ボタンをクリックします。
2. ジョブの設定ウィンドウで**実行**ボタンをクリックします。



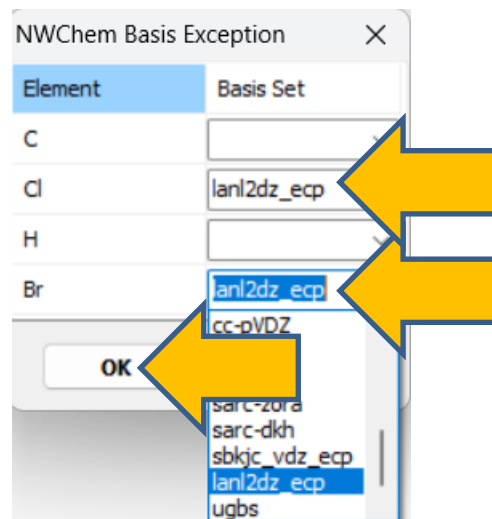
# III. 計算の実行（基底関数及びECPの設定）

1. NWChem Workflow SetupウィンドウでResetボタンをクリックして、「変更を破棄してリセットしますか？」の質問で「はい」をクリックします。
2. Detailsボタンをクリックします。
3. NWChem Keyword SetupウィンドウでBasisのExceptionボタンをクリックします。



# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

1. NWChem Basis ExceptionウィンドウでCl及びBrをlanl2dz\_ecpに変更して、OKボタンをクリックします。これで基底関数部分は、CとHは6-31G\*、ClとBrはLanL2DZとなります。

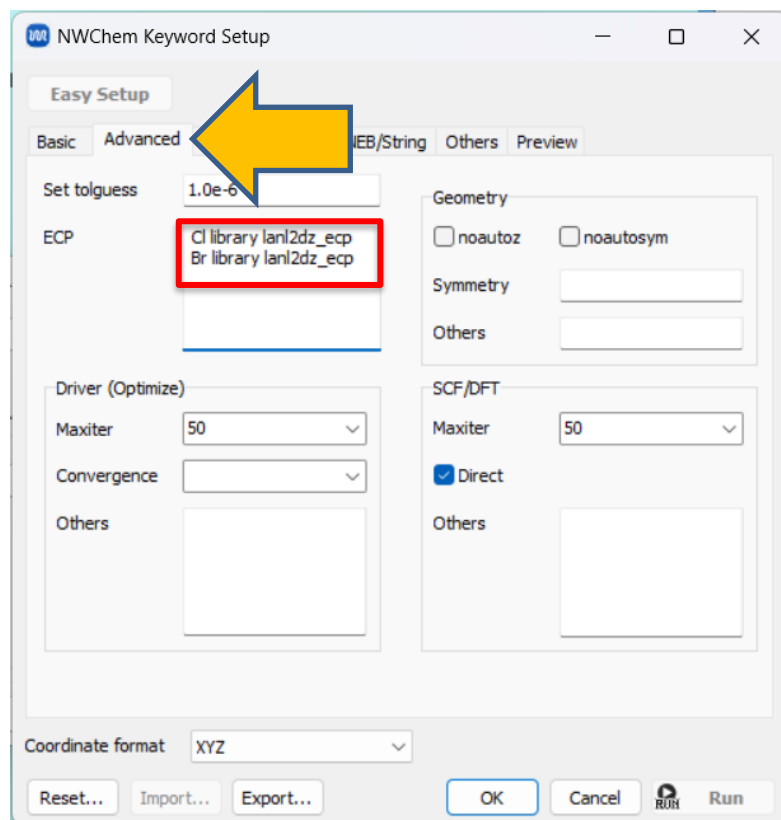


# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

## 1. Advancedタブをクリックして、ECP欄に

```
Cl library lanl2dz_ecp  
Br library lanl2dz_ecp
```

と記入します。ECP欄にはECPを使う元素のみ記入します。



# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

## 1. Previewタブをクリックして、Basisの記述が

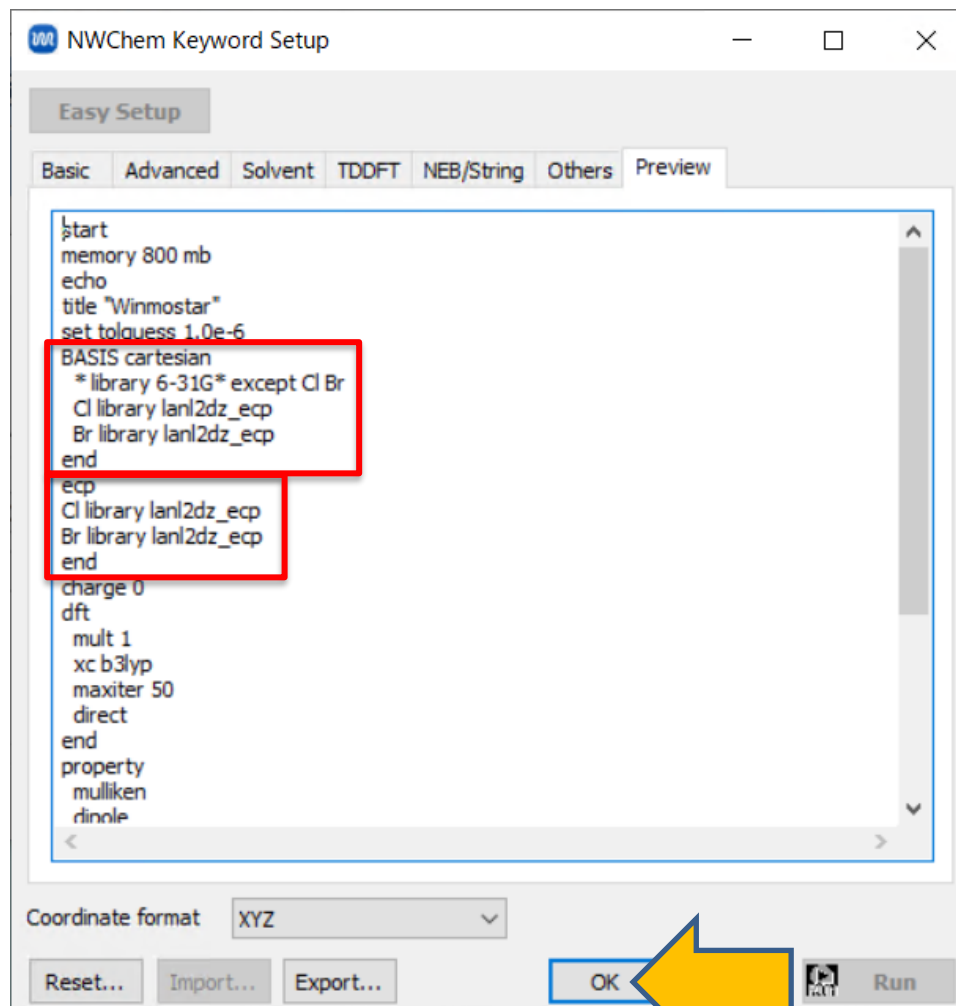
```
* Library 6-31G* except Cl Br  
Cl library lanl2dz_ecp  
Br library lanl2dz_ecp
```

ecpの記述が

```
Cl Library lanl2dz_ecp  
Br library lanl2dz_ecp
```

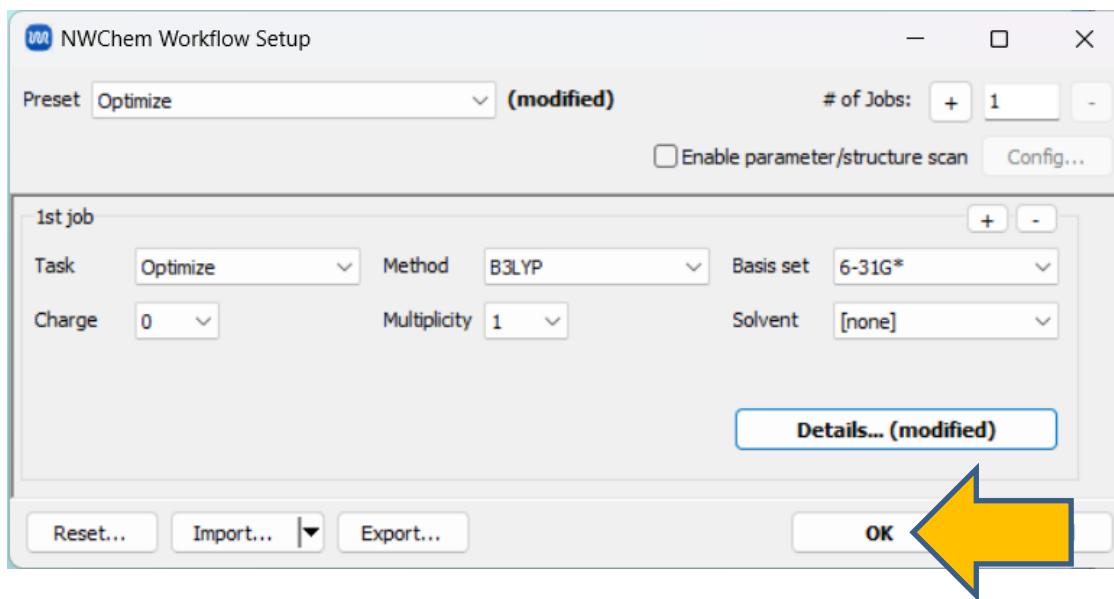
となっていることを確認してください。

## 2. 右下のOKボタンをクリックします。



# III. 計算の実行（基底関数及びECPの設定）

1. NWChem Workflow Setupウィンドウで**OK**ボタンをクリックします。
2. ジョブの設定ウィンドウで**実行**ボタンをクリックします。



# 補足 リストにない基底関数・ECP指定方法

NWChemの利用可能な基底関数及びECP一覧

(<https://nwchemgit.github.io/AvailableBasisSets.html>)に書かれているものは、基底関数関数・ECP名をBasis欄・ECP欄に記入してください。一覧にない場合は、Basis Set Exchangeウェブサイト(<https://www.basissetexchange.org/>)から、基底関数・ECPの数値を取得して、記入してください。ただし、数値を書いた場合は、分子軌道、静電ポテンシャルなどの描画はできません。

C及びClのLanl2dzの場合：

1. 基底関数(LANL2DZ)を選択
2. 元素(C,Cl)を選択
3. フォーマット(NWChem)を選択
4. Get Basis Setをクリック

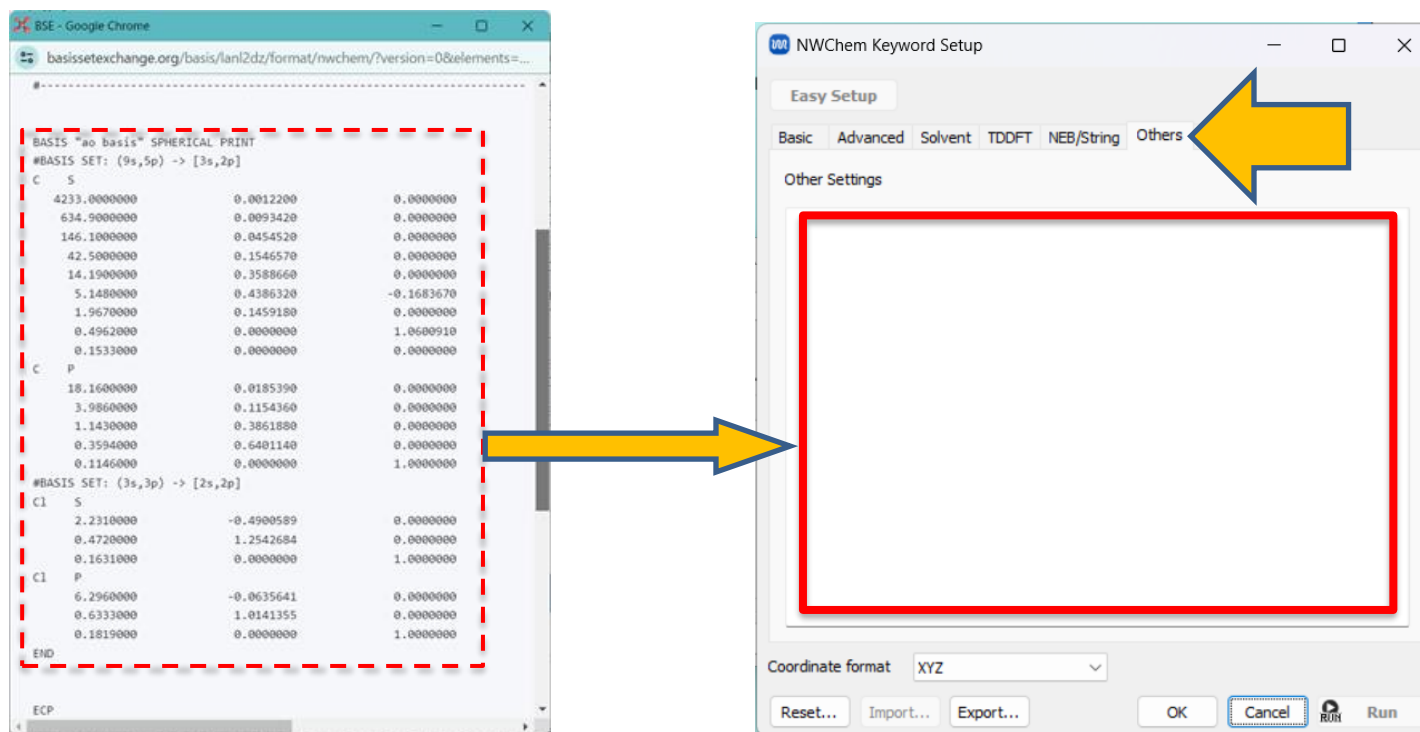
The screenshot shows the Basis Set Exchange website interface. On the left, a list of basis sets is displayed, with 'LANL2DZ' highlighted by a blue arrow labeled '1'. Below the list is a search bar and a 'References for selected basis' section with a 'Get References' button. On the right, a periodic table is shown with 'C' and 'Cl' highlighted by blue arrows labeled '2'. Below the table is a 'Download basis set' section with a 'Format' dropdown menu set to 'NWChem' (highlighted by a blue arrow labeled '3') and a 'Get Basis Set' button (highlighted by a blue arrow labeled '4').



# 補足 リストにない基底関数・ECP指定方法

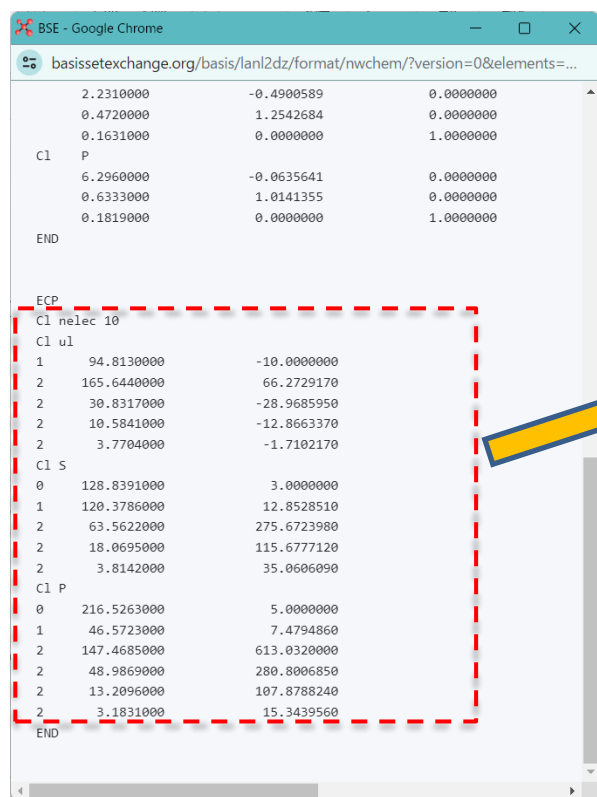
新たに表示されたウィンドウの基底関数・ECPの情報をNWChem Keyword Setupウィンドウに記入します。

1. NWChem Keyword Setupウィンドウで、OthersタブをクリックしてOther Settings欄に基底関数のデータ(BASISからENDまで)を貼り付けます。



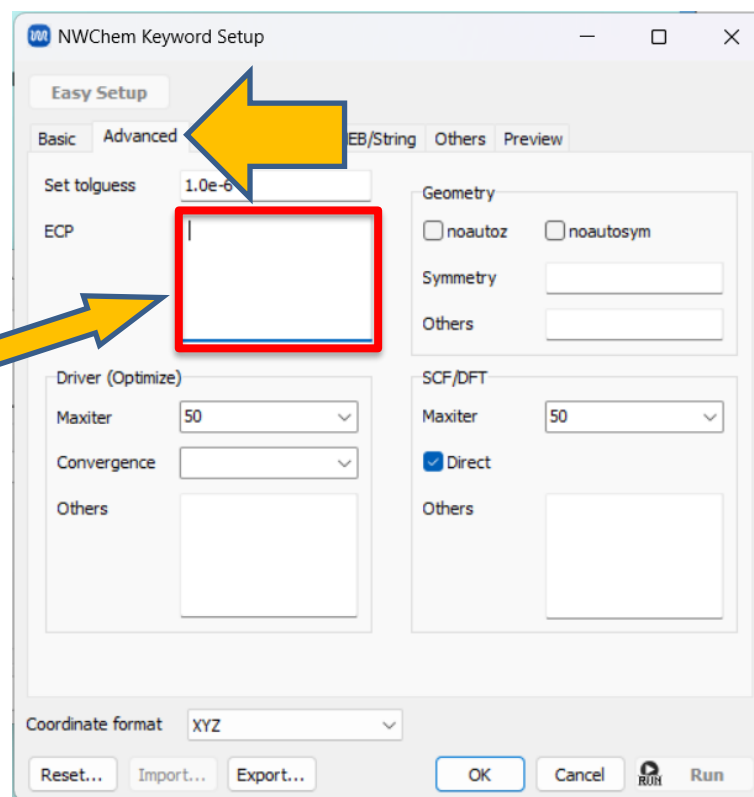
# 補足 リストにない基底関数・ECP指定方法

1. NWChem Keyword Setupウィンドウで、AdvancedタブをクリックしてECP欄にECPのデータ(ECPの次の行からENDの前の行まで)を貼り付けます。



```
2.2310000 -0.490589 0.0000000
0.4720000 1.2542684 0.0000000
0.1631000 0.0000000 1.0000000
C1 P
6.2960000 -0.0635641 0.0000000
0.6333000 1.0141355 0.0000000
0.1819000 0.0000000 1.0000000
END

ECP
C1 nelec 10
C1 u1
1 94.8130000 -10.0000000
2 165.6440000 66.2729170
2 30.8317000 -28.9685950
2 10.5841000 -12.8663370
2 3.7704000 -1.7102170
C1 S
0 128.8391000 3.0000000
1 120.3786000 12.8528510
2 63.5622000 275.6723980
2 18.0695000 115.6777120
2 3.8142000 35.0606090
C1 P
0 216.5263000 5.0000000
1 46.5723000 7.4794860
2 147.4685000 613.0320000
2 48.9869000 280.8006850
2 13.2096000 107.8788240
2 3.1831000 15.3439560
END
```



# 最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



## [ユーザマニュアル](#)



## [Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar導入講習会](#)、[Winmostar基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上