M winmostar チュートリアル

GAMESS基礎編

V11.9.5

2024年12月10日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



気相中の孤立したプロピレン分子の分子軌道、静電ポテンシャル、振動スペクトル(IR、ラマン)及びGibbs自由エネルギー、UV-VisスペクトルをGAMESSによる量子化学計算(B3LYP/6-31G*)から取得します。



- GAMESSのNMRスペクトルのDFT計算は対応していないため、手順はここでは示しません。
- ESPの表示には時間が掛かるため、ここでは静電ポテンシャルとして、簡易的に得られる電荷 解析(ラベル/電荷で指定していなければMulliken電荷)の結果を基にしたポテンシャル分布を表 示します。



• GAMESSの場合

GAMESSインストールマニュアル

<u>https://winmostar.com/jp/manual_jp/installation/GAMESS_install_manual_jp_win.p</u> <u>df</u>に従い、GAMESSをインストールしてください。

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<u>V10のGAMESSチュートリアル</u>を参照してください。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1





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先にファイル | 閉じるをクリックします。)
- 2. プロジェクト名に「propylene」と入力し保存をクリックします。



I. 系のモデリング

初期構造の作成方法の詳細は分子モデリング有機分子編チュートリアルを参照してください。 ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

- 1. ファイル | インポート | Samplesファイル | propylene.xyzをクリックします。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりにファイル | ファイルをインポートを使います。
- 2. ファイルをインポートダイアログで破棄して読み込みをクリックします。

3. 分子表示エリアに所望の分子が出現することを確認します。

C:¥winmos1101test1¥UserData¥propylene.wmpjdata¥propylene.wmpj - Winmostar (PREMIUM) V11.1.0

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 国体(S) アドオン(A) ツール(D チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)





- 1. ツールバーの**ソルバ**からGAMESSを選択します。
- 2. C (ワークフロー設定) をクリックします。



1. Presetから「Optimize+IR + TDDFT」を選択します。ラマンスペクトルも計算する場合は、「Optimize+IR + Raman + TDDFT」を選択します。

M GAMES	S Workflow Setup				_		×
Preset Opt	imize+IR + TDDFT				# of Jobs: +	2	-
	20			Enable	parameter scan	Config.	
1st job							
Task	Optimize+IR \lor	Method	B3LYP(same as Gaus: \vee	Basis set	6-31G*	\sim	
Charge	0 ~	Multiplicity	1 ~	Solvent	[None]	~	
					Details		
2nd job							
Task	TDDFT ~	Method	B3LYP(same as Gaus: \vee	Basis set	6-31G*	\sim	
Charge	0 ~	Multiplicity	1 ~	Solvent	[None]	\sim	
Same o	onditions as previous job	Continue fi	rom previous job \sim				
					Details		
Reset	Import 🔽	Export			ОК	Cance	:

1. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は1st jobのBasis setを「STO-3G」に変更します。そうでない場合は次のページに進みます。

GAMESS Workflow Setup		– 🗆 ×
Preset Optimize+IR + TDDFT	✓ (modified)	# of Jobs: + 2 -
		Enable parameter scan Config
1st job		
Task Optimize+IR ~	Method B3LYP(same as Gause $ \smallsetminus $	Basis set STO-3G
Charge 0 🗸	Multiplicity 1 V	Solvent [None]
		Details
2nd job		
Task TDDFT V	Method B3LYP(same as Gause $$	Basis set $$ STO-3G $$ $$ $$ $$
Charge 0 🗸	Multiplicity 1 \vee	Solvent [None] ~
Same conditions as previous job	Continue from previous job \sim	
		Details
Reset Import 🔽	Export	OK Cancel



今回のケースでは、①Optimize+IRの計算が実行された後に②TDDFTの計算が実行されます。連続して実行される計算の間で原子座標の情報は自動で引き継がれ、①の最終構造は②の初期構造と一致します。各計算は個別の作業フォルダの中で実行されます。

🚾 game	ESS Workflow Setup				_		×
Preset Op	otimize + IR + TDDFT		~		# of Jobs: +	2	-
				Enable	parameter scan	Config]
1st job							
Task	Optimize +IR ~	Method	B3LYP(same as Gause $ \smallsetminus $	Basis set	6-31G*	~	
Charge	0 ~	Multiplicity	1 ~	Solvent	[None]	~	
					Details		
2nd job							
Task	TDDFT ~	Method	B3LYP(same as Gaus: $$	Basis set	6-31G*		
Charge	0 ~	Multiplicity	1 ~	Solvent	[None]		
Same 🤇	conditions as previous job	Continue	from previous job 🗸 🗸				
					Details		
Reset	Import 🔻	Export			ОК	Cano	el

(リモートジョブの場合は先に<u>こちら</u>に進んでください。)

- 1. GAMESS Workflow Setupウィンドウ右下のOKをクリックします。
- 2. ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします。バックグラウンドでWinmostar Job Managerが起動し、右図のような黒いコンソールウィンドウが出現し、計算が開始されます。

💹 ジョブの設定		_		×			
●このマシンでジョブを実行					回 選択Winnostar/JM propylene_Job1 2021/06/02 3:59:43 MCOD59=C+XUlsersYPuthLicYgamess=6/YsoratichYoronyuLene work/1 GMS OPT gms two E59	_	
 〇リモートマシンでジョブを実行 	Ŧ				MCDD60-C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_DPT_gms_tmp.F60 MCD661=C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_DPT_gms_tmp.F60		Î
プロファイル	pbs gamess V Config				MCDD62=C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_DPT_gms_tmp.F62 MCDB62=C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_DPT_gms_tmp.F62		
איוע	gamess 🗸				MCQD64=C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_OPT_gms_tmp.F64 MMCINTI=C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_OPT_gms_tmp.F64		
テンプレートスクリプト	(Default) V New	Edit			WMRINT=0:F0sers+rubilexgamess=04+scratch4propylene_work1_GMS_0PT_ams_tmp.F62 WMRINT2=0:¥Users¥Public4gamess=644scratch4propylene_work1_GMS_0PT_ams_tmp.F63		
オプション	-I nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC%			~	MRINT4-C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_OPT_ams_tmp.F64 MRINT4-C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_OPT_ams_tmp.F65		
	Test Connection				WMTINTS-C.:FUSErS#FUBIIC#gamess=04#scratch#propylene_work1_GMS_DPT_gms_tmp.F66 UMPTINTEC:#Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_DPT_gms_tmp.F67 DCPHF21=C:#Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_0PT_gms_tmp.F68 ELNUNT=C:#Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_0PT_gms_tmp.F67		
接続情報					NUNUINT=C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_0PT_gms_tmp.F68 3WPT=C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_0PT_gms_tmp.F69 NUMCAS=C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_0PT_gms_tmp.F70 NUELCAS=C:¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_0PT_gms_tmp.F72		
□ファイルの保存後ジョブを実	行しない				RTYMRT-C: ¥Users¥Public¥gamess=04+scratch¥propylene_work1_GMS_0PT_gms_tmp.f52 NT2A=C: ¥Users¥Public¥gamess=04¥scratch¥propylene_work1_GMS_0PT_gms_tmp.f52		
並列擞					(113A-C:#Users#Fublic#gamess=64#scratch#propylene_work1_ums_UF1_gms_tmp.F35 RIT2B=C:#Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_0PT_gms_tmp.F54		
# of MPI Procs 1	# of Threads / MPI Proc 1 ~				1135-0:#Users#rubilc#gamess=64#scratch#propylene_work1_uMs_UP1_gams_tmp.F70 JEN2P1=0:#Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_OPT_gams_tmp.F70 JEN2P2=C:#Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_OPT_gams_tmp.F71		
作業フォルダ名	work		Λ	-	JENZr3-U:#USers#ruDiic#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_OPT_gms_tmp.r/2 JEN2P4=C:#Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_OPT_gms_tmp.F73 JEN2NM=C:#Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_OPT_gms_tmp.F74 -		
		13-1					

補足:入力ファイルを自分で修正したい場合やリモートサーバに自分でコピーして使用したい場合は、ジョブの設 定ウィンドウでファイルの保存後ジョブを実行しないにチェックを入れ実行をクリックします。保存後に計算を実 行したい場合はファイル | プロジェクト | 選択された作業フォルダ | Runをクリックします。

- メインウィンドウに戻ると(計算実行中でも構いません)、プロジェクト表示エリアにGAMESS Workflow Setupウィンドウの各ジョブに対応する2つの作業フォルダの親子関係がツリー状に表示されます。
- 2. 分子表示エリアには自動的に最初の作業フォルダ(work1_GMS_OPT-IR)の入力ファイルが開かれます。分子表示エリアの上部でもそのことを確認できます。

ファイル(F) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(T) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)								
	□ 🔄 ▼ 🗋 ♥ 🗳 ♥ 🖞 ▼ 🟦 ③ ① 📝 🖆 ♥ 🛃 🚽 УЛИХ GAMESS 🔷 🗹 🎧 🔤 🛱 🗹 💽 ラベル/電荷を隠す) 🗸							
元素 📙 1 🗸 🕂 🔍 🧔 🧔 🎸	元素 H 1 🗸 + 🔍 🔍 🕩 🕂 💊 % 75岁メント -CH3 🗸 🗸 Replace 🔐 🚄 佰 🎒 🥐 🍪 🛱							
≥ 最近使ったプロジェクト	work1_GMS_OPT-IR 入力ファイル (gms.inp)	≫ アニメーション						
プロジェクト 状態 ⊙ propylene RUN(1)	□ N= 9 C3H6 M= 42.08 Marked Order: 9 - 1 - 2 - 0 Marked Abov 0 201017 M 1 2020171 Z 0 2020222	≫ キーワード						
	Length= 3.207932 Angle= 28.61726 Dihedral= * Lper= *	★ 座標						
	13	表示形式						
≥ プロジェクト		Elem X Y Z						
作業フォルダ (propylene) Options ▼		2 C 1.3310 0.0000 0.0000 9 C 2 1.22 1.220 0.0000						
名前 状態		4 H -0.5861 -0.9279 -0.0003 5 H -0.5946 0.9279 -0.0003						
work1_GMS_OPT-IR RUN		6 H 1.8972 -0.9471 0.0004 7 H 2.8225 -0.9434						
• WOTKZ_GMS_IDDFT PEND	0	8 H 1.5394 2.1481 -0.0043 9 H 2.8180 1.2395 0.9080						

Winmostar Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

🚾 C:¥winmos1101test1¥UserData¥propylene.wmpjdata¥propylene.wmpj - Winmostar (PREMIUM) V11.1.0

- 計算の進行状況に応じて、プロジェクト表示エリアで各作業フォルダの状態がPEND(黒) →RUN(緑)→END(青)と変化します。
- 2. 全ての作業フォルダの状態がEND(青)に変化するまで待ちます。この際最近使ったプロ ジェクトの「propylene」の状態もALL END(青)に変化します。

≥ 最近使ったプロジェクト			*	最近使ったプロジェクト				≽	最近使ったプロジェクト			
	プロジェクト	状態			プロジェクト	状態				プロジェクト	状態	
0	propylene	RUN(1)		0	propylene	RUN(1))		0	propylene	ALL EN	ND
												
									<u> </u>	1		
♥ プロジェクト			≽	プロジェクト			\square	≽	プロジェクト			
作詞	業フォルダ (propylene)		Options V	作業	美フォルダ (propylene)		Options ▼		作到	幕フォルダ (propylene)		Options 🔻
	名前		状態		名前		状態			名前		状態
O	work1_GMS_OPT-I	R	RUN	0	work1_GMS_OPT-I	R	END		o	work1_GMS_OPT-1	[R	END
	work2_GMS_TDD)FT	PEND		work2_GMS_TDD)FT	RUN			work2_GMS_TD	DFT	END

- 1. 各計算のログの主要な内容を見たい場合は、プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象と なる計算の作業フォルダをクリックして選択し、アクションのLog (Extracted)をクリック します。(プロフェッショナル版プレミアム限定の機能です)
- 2. 完全なログを見たい場合はLogをクリックします。



補足計算の継続

7777 W

本書では本ページの操作は不要です。

- 1. すでに完了した計算から最終状態の原子座標を引き継いで計算を開始したいときは、まず **(ワークフロー設定)**をクリックします。
- 2. 情報ダイアログではいをクリックします。
- 3. ジョブの継続元の作業フォルダを選択で継続元の作業フォルダを選択してからOKをクリック します。
- 4. GAMESS Workflow SetupウィンドウでP.9-10と同様に設定を行い計算を開始します。

※ファイルモードのように継続元ジョブの最終構造をメインウィンドウに表示しておく必要はありません。

	ジョブの維続元の作業フォル	ダを選択して	ください	
	名前	状態	วือว ู 4ル	出力ファイル場所
~	work1_GMS_OPT-IR	END		Local
	L work2_GMS_TDDFT	END	$\boldsymbol{\boldsymbol{X}}$	Local
継続ジョブを実行しますか? いいえの場合は表示中の構造で新規ジョブが作成されます。				-
はい(Y) いいえ(N) キャンセル				
				ок
Ostar Copyright 2008-2024 X-Ability Co.	, Ltd.			

補足計算の継続

本書では本ページの操作は不要です。

すでに完了した計算の最終状態の分子構造を編集してから計算を開始する方法を紹介します。

- プロジェクト表示エリアの作業フォルダで編集元構造の作業フォルダをクリックし、アクションでCoordinate (Initial)(初期構造を編集する場合)またはCoordinate (Final)(最終構造を編集する場合)をクリックします。
- 2. 各種ツールボタンや**編集**メニュー以下の機能を利用して分子構造を編集します。「…出力可能 なファイル形式に編集し続行しますか?」と表示されたら**はい**をクリックします。
 - 一旦作業を中断したい場合は、 (L書き保存)ボタンをクリックすると構造が保存され、Winmostarの再起動後でもプロジェクトを開きなおすと編集中の構造が再び出現します。または、 (Cアイルをエクスポート)をクリックし構造ファイルとして保存し、必要な段階で (Cアイルをインポート)をクリックして保存した構造ファイルの構造を読み込みます。

III.結果解析 構造最適化アニメーション

以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

- **1. プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で構造最適化計算の作業フォルダ (work1_GMS_OPT-IR)をクリックします。
- 2. アクションでAnimationをクリックすると、メインウィンドウ右側にアニメーション操作エ リアが出現します。 ▶ ボタンをクリックすると、構造最適化の過程がアニメーション表示 されます。
- 3. アニメーション表示エリア下部には、その上のリスト内のColumnで選ばれた列の値がグラフ で表示されます。

♥ プロジェクト	work1_GMS_OPT-IR 出力ファイル (gms.out)	★ 7二メーション				
作業フォルダ (propylene) Options ▼		I I ► Reload Options ▼				
名前 状態	= 1.239451 Z= 0.908002	Speed Deen Viewer				
● work1_GMS_OPT-IR END work2_GMS_TDDF 「分子表示Tリアに表	Lper= "	NSERCH= 0 Eel= -117.9057150 Grad= 0.0194816 ^ NSERCH= 1 Eel= -117.9074774 Grad= 0.0024231 ^ NSERCH= 2 Eel= -117.9075123 Grad= 0.0012434 ^ NSERCH= 3 Eel= -117.9075192 Grad= 0.0003424 ~				
アクション (work1_GMS_OPT-IR)		Frame				
Coordinate (Initial)		Result ***** EQUILIBRIUM GEOVETRY LOCATED *****				
Coordinate (Final), Charge & Dipole		Plot Column 4				
Log (Extracted)		117.905715000				
MO & Charges		≫ キーワード				
Show in Explorer		★ 座標				

III.結果解析 分子軌道

- **1. プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で構造最適化計算の作業フォルダ(work1_GMS_OPT-IR)をクリックします。
- 2. アクションでMO & Chargesをクリックすると、Energy Level Diagramウィンドウと Surface Setupウィンドウが表示されます。Energy Level Diagramウィンドウでは各分子軌 道のエネルギーやHOMO-LUMOギャップを確認できます。(STO-3Gの場合は値が異なります)

補足1:イオン化ポテンシャルの簡便な近似値は、HOMOエネルギーの符号を反対にした値となります。

補足2:XPSのピークの簡便な近似値は、内殻の軌道エネルギーの符号を反対にした値となります。どの原子の ピークであるかは、次のページの手順で分子軌道を図示して確認してください。

	Budth- * Anglo- * Lubodrol-	1 por- 1	
♥ プロジェクト	🚾 Energy Level —		Surface Setup - 🗆 🗙
作業フォルダ (propylene) Options ▼	HOMO: 12 n	it:⊚au.⊖eV	File(F)
	HOMO-LUMO Gap: 0.2781 a.u.	foot	C:¥winmos11pb1¥UserData¥propylene.wmpjdata¥work1_GMS_OPT-IR¥gms.out
	LUMO Energy:	> >	
WORK1_GMS_OPT-IR	HOMO Energy:	ale	Selected MO 12 Show Diagram
「分子表示」リアに表	-0.2498 a.u.	>	
	22 0.4992 21 0.3776		Parameters
アクション (work1_GMS_OPT-IR)	20 0.2867 19 0.1932		Draw Style Smooth V Draw boundary Dump cube file
Coordinate (Initial)	18 0.1804 17 0.1756 16 0.1505		Transparency 0.2 V Draw contour map
Coordinate (Final), Charge & Dipole	15 0.1354 14 0.1138 13 0.0283		Isosurface Value 0.03
	12 -0.2498 11 -0.3422		Points 50 Scale 1.5
	10 -0.3682 9 -0.4085		
Log (Extracted)	8 -0.4159 7 -0.4615		Evnort T Draw Close
Animation	6 -0.5502 5 -0.6804		
+ MO & Charges	4 -0.7796 3 -10.1731		
	2 -10.1805 1 -10.1872		
	Excel	Close	
		memi: 11.355 Lieby	n (Qtot=0.00,Qrms= 0.229), Lowdin (Qtot=0.00,Qrms= 0.230) 中国 中国 中国

III.結果解析 分子軌道

- Energy Level Diagramウィンドウで3D表示したい軌道をクリックして選択し(デフォルト では電子が入っている軌道の中で最もエネルギーが高いHOMOが選択されます)、Surface SetupウィンドウのDrawボタンをクリックします。
- 2. Winmostar Viewerが起動し、1で選択された分子軌道が3D表示されます。

		Winmostar Viewer V11.1.0 gms.out MO #12 isoval=0.03 — 🛛 🗙
🚾 Energy Level — 🗆 🕆	w surrace setup — L X	File View Help
HOMO: 12 Unit:⊚au.⊝eV	File(<u>F</u>)	the test of
HOMO-LUMO Gap: 0.2781 a.u. LUMO Energy: 0.0283 a.u. HOMO Energy: -0.2498 a.u. 22 0.4992 21 0.3776 20 0.2867 19 0.1332 18 0.1804 17 0.1756 16 0.1505 15 0.1354 14 0.1138 13 0.0283 12 -0.2492 14 -0.2492 15 -0.2492 15 -0.2492 16 -0.2492 17 -0.2492 17 -0.2492 18 -0.2492 10 -0.2492 10 -0.2492 10 -0.2492 10 -0.2492 11 -0.2492 12 -0.2492 12 -0.2492 12 -0.2492 12 -0.2492 12 -	C:¥winmos11pb1¥UserData¥propylene.wmpjdata¥work1_GMS_OPT-IR¥gms.out Quantity Selected MO 12 Show Diagram Parameters Draw Style Smooth Draw boundary Dump cube file Transparency 0.2 Draw contour map Isosurface Value 0.03 Points 50 Scale 1.5	
10 -0.3882 9 -0.4085 8 -0.4159 7 -0.4815 6 -0.5502 5 -0.6804 4 -0.7796 3 -10.1731 2 -10.1805 1 -10.1872	Export▼ Draw 表示項目 [編 an (Qtot=0.00,Qrms= 0.230) mme 2.3*	

III.結果解析 静電ポテンシャル

- **1. Surface Setup**ウィンドウのQuantityでESP(Population Charge)/Surfaceを選択し、 右下のGenerate Cubeをクリックします。
- 2. Cube Plotウインドウが出現したらDrawをクリックします。Winmostar Viewerが起動し、 Mulliken電荷から計算された近似的な静電ポテンシャルを分子表面にマッピングした様子が表示されます。

· Surface Setup − □ ×	🚳 Cube Plot — 🗆 🗙	Winmostar Viewer V11.1.0 on Charge)/Surface isoval=0.03 — X File View Help
File(<u>F</u>)	File(<u>F</u>)	
C:¥winmos11pb1¥UserData¥propylene.wmpjdata¥work1_GWPT_TD¥eme_out OuantityESP(Population Charge)/Surface	$C: \verb"winmos11pb1$UserData$propylene.wmpjdata$work1_GMS_OPT-IR$winmos_surestimate{theta} and the the the the the the the the the the$	
Selected MO 12 Show Diagram	cube Manipulation map V File 1 winmos_surf.cube	
	File 2 winmos_esp2.cube	0.04298
Parameters	Parameters	
Draw Style Smooth V Draw boundary Dump cube file	Draw Style Smooth 🗸 🗌 Draw boundary	
Transparency 0.2 V Draw contour map	Transparency 0.2 V Draw contour map	
Isosurface Value 0.03	Isosurface Value 0.03 Use absolute value	
Points 50 Scale 1.5	Min -999 Max 999	
F-max,F-min 0.263374001 -0.273030996	Original File: gms.out	-0.07519
Export V MO #12 Generate Cube	Export ESP(Population Charge)/Surface Draw	

III.結果解析 IR/ラマンスペクトル

- **1. プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で振動計算の作業フォルダ(work1_GMS_OPT-IR) をクリックします。(ラマンの時はwork2_GMS_RAMAN)
- 2. アクションでIR/Ramanをクリックすると、スペクトルが出現します。
- 計算手法と基底関数に応じた波数のスケーリングを行う場合は、Freq. Scalingから該当する ものを選択してください。



III.結果解析 IR/ラマンスペクトル

- 振動モードを可視化する場合は、可視化したいピークをグラフ中でクリックし、Animation ボタンをクリックしてください。Winmostar Viewerが起動し、対応する振動モードのアニ メーションが表示されます。
- 2. アニメーションを確認した後は、Winmostar Viewerを×ボタンで終了し、IR Spectrum ウィンドウをCloseボタンで閉じてください。



III.結果解析 Gibbs自由エネルギー

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで振動計算の作業フォルダ(work1_GMS_OPT-IR) をクリックし、アクションでLog(Extracted)をクリックします。(プロフェッショナル版プ レミアムのみ、その他のライセンスではLogをクリック)
- 構造最適化の最終DFTエネルギー(FINALから始まる最後の行の5つ目の項、単位はHartree)、 その下の表形式のTOTAL行G列の値(kJ/molとkcal/molそれぞれの単位での値、144.706 kJ/mol = 34.586 kcal/mol = 0.055116 Hartree)を足し合わせた値(-117.907563 Hartree + 0.055116 Hartree = -117.852447 Hartree)がGibbs自由エネルギーとなります。 ツール | 単位を変換を選択すると、単位変換ウィンドウが出現します。



III.結果解析 UV-Visスペクトル

- **1. プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**でTDDFT計算の作業フォルダ (work2_GMS_TDDFT)をクリックします。(ラマンも計算したときは work3 GMS TDDFT)
- 2. アクションでUV-Visをクリックすると、UV-Visスペクトルが表示されます。左上の欄には、 各ピークの吸収エネルギー(eV)、吸収波長(nm)、強度が表示されます。(B3LYP/STO-3Gの 場合は値が異なります)



III.結果解析 UV-Visスペクトル

- 1. グラフ表示部上のピーク、もしくは左上欄のリスト中のピークをクリックすると、そのピークの励起の内容(励起元と励起先の軌道番号とその係数)が左下欄に表示されます。係数の絶対値が大きいほど重要な励起配置となります。12、13番目の軌道はHOMOとLUMOであることから(P.19参照)、第1ピークはHOMOからLUMOへの励起であることがわかります。
- 2. UV-Vis SpectrumウィンドウもCloseボタンをクリックして閉じます。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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<u>よくある質問</u>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