



GAMESS 部分構造最適化計算

V11.15.0

2026年1月6日 株式会社クロスアビリティ

最適化フラグを変更機能を使ったCartesian座標一部固定の構造最適化はV11.15.0以降で実行可能です。
それ以前のバージョンでは、補足に書かれているキーワードを直接入力してください。

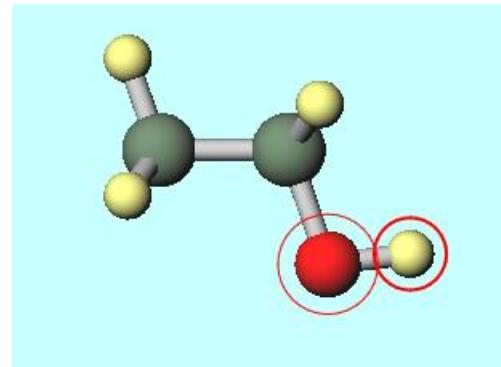
本書について

- ・ 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

エタノール分子を対象として、前半はCartesian (XYZ) 座標一部固定の構造最適化計算、後半は Delocalized座標 (DCL) を使った結合長、結合角、二面角一部固定の構造最適化計算を B3LYP/6-31G*レベルで行います。

前半は2つの炭素原子のCartesian座標を固定し、後半はO-H結合長、H-O-C結合角、H-O-C-C二面角を固定して構造最適化を行います。

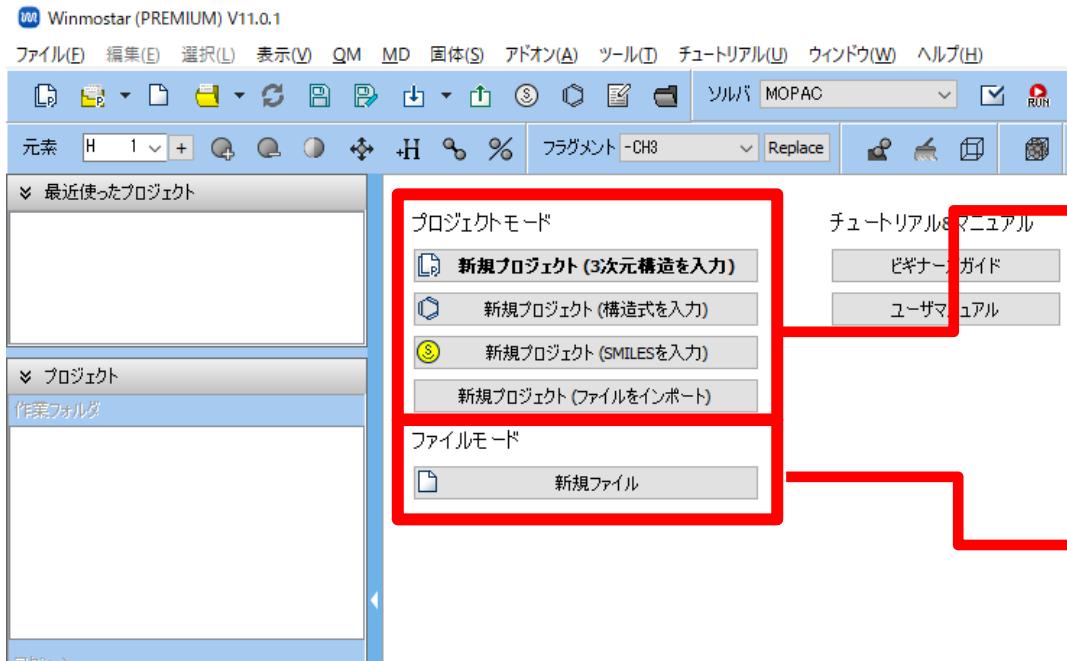


Winmostar V11の動作モード

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

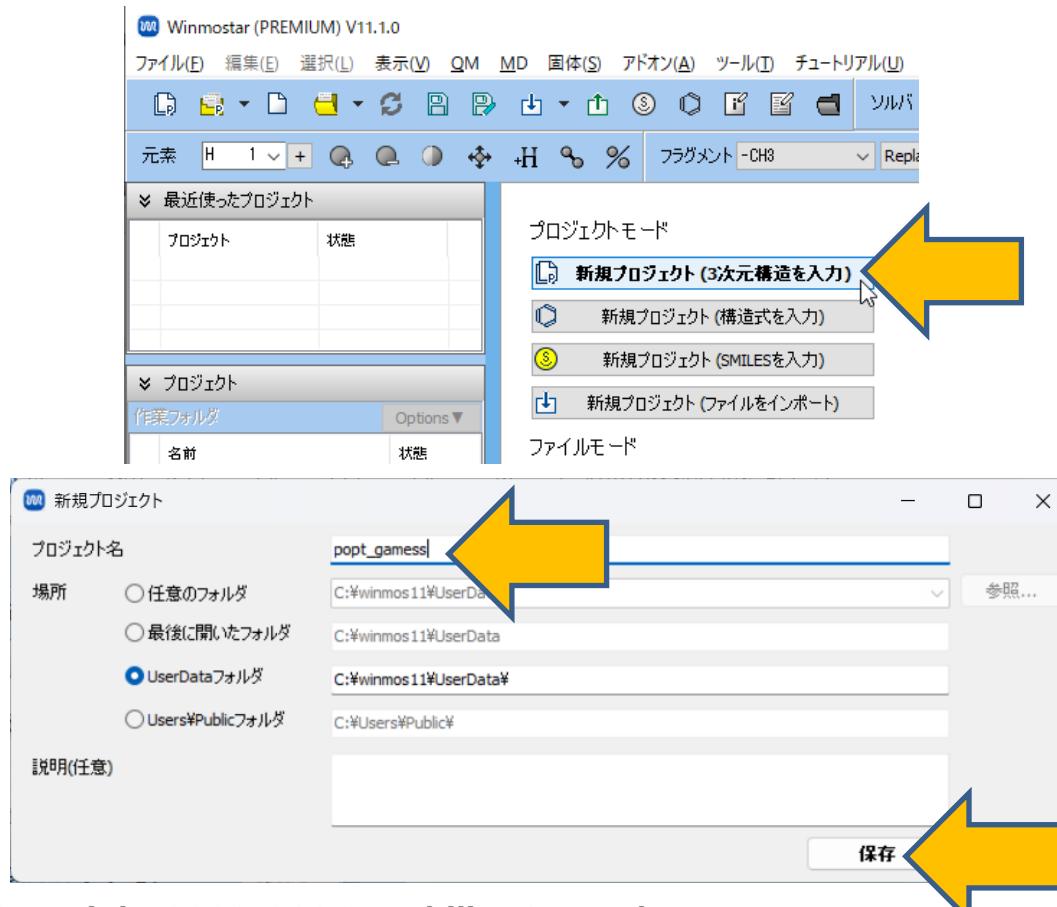
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、
管理します。操作方法はv10以前と一緒に
です。

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。

1. Cartesian座標一部固定構造最適化

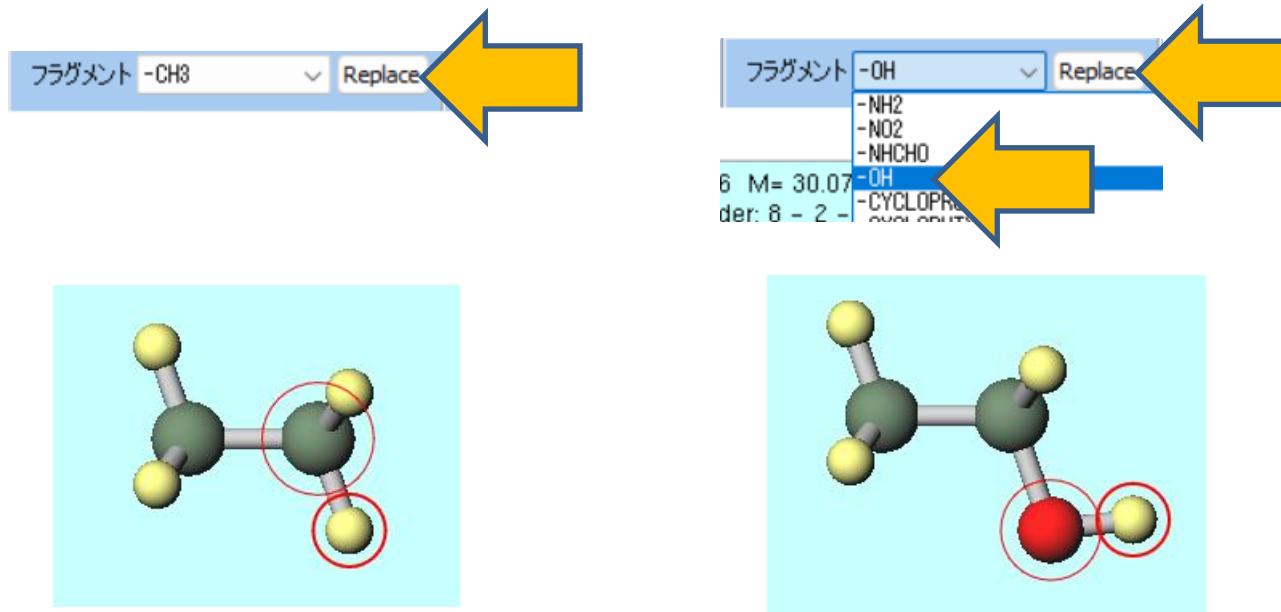
I. 系のモデリング

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「popt_gamess」と入力し**保存**をクリックします。



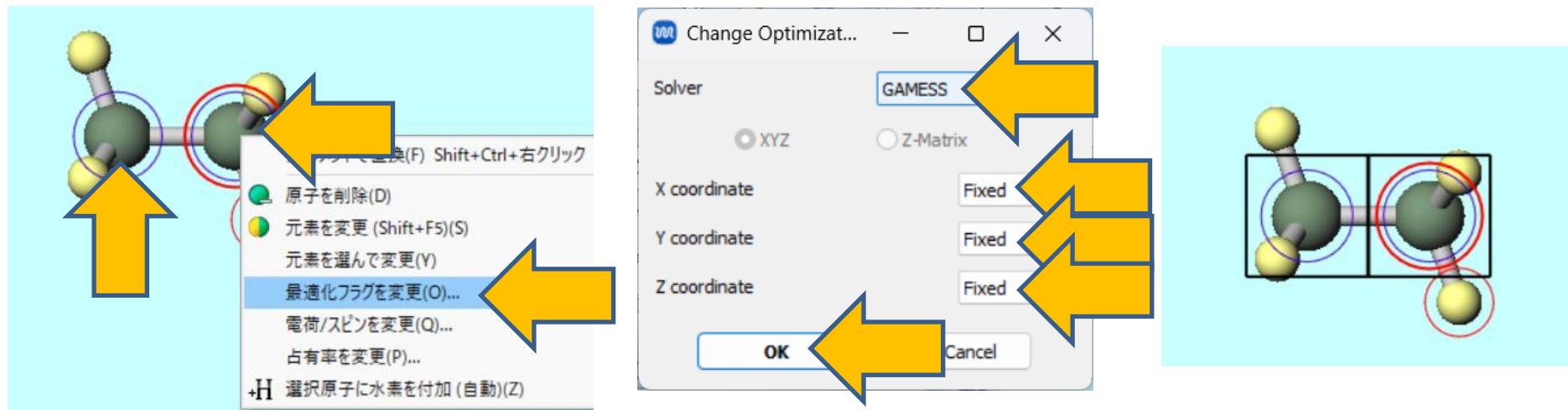
I. 系のモデリング

1. フラグメントを選択はCH3のまま、その右にあるReplaceボタンを2回クリックします。
2. フラグメントを選択を-OHに変更して、その右にあるReplaceボタンを1回クリックします



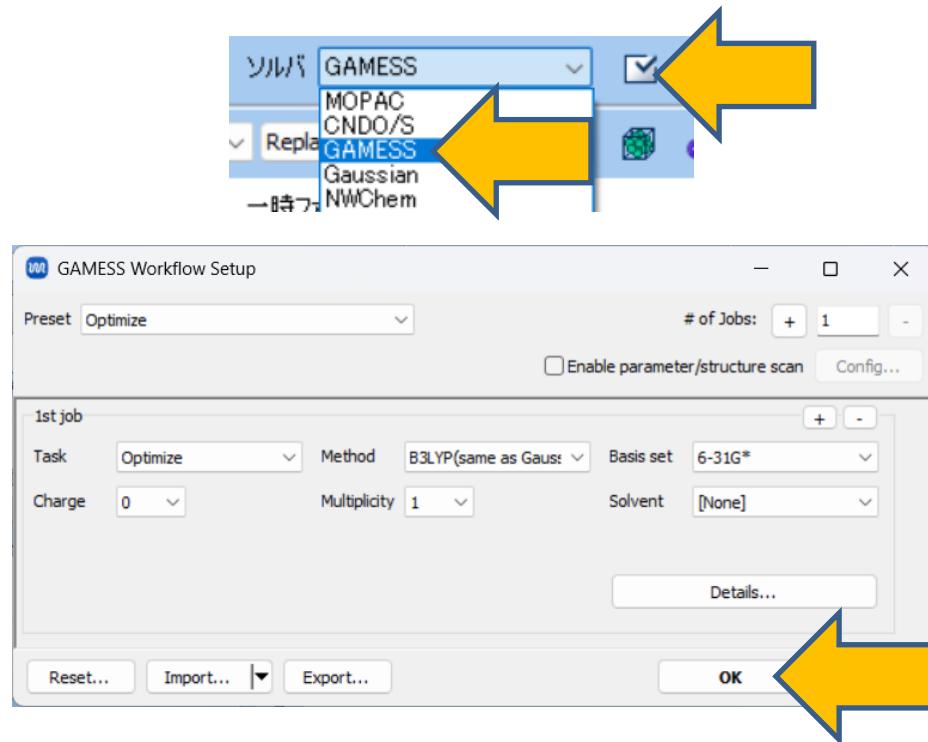
I. 系のモデリング

1. Ctrlボタンを押したまま2つの炭素原子を左クリックして、炭素原子2つを青丸が付いた選択状態にします。
 2. どちらかの炭素原子を右クリックして、**最適化フラグを変更**を選択します。
 3. **Solver**を**GAMESS**、**X**、**Y**、**Z Coordinate**を全て**Fixed**に変更して、OKボタンをクリックします。正常に設定されると、座標固定が設定された原子に黒い四角の枠が追加されます。
- GAMESSはX、Y、Z個別の固定が可能です。



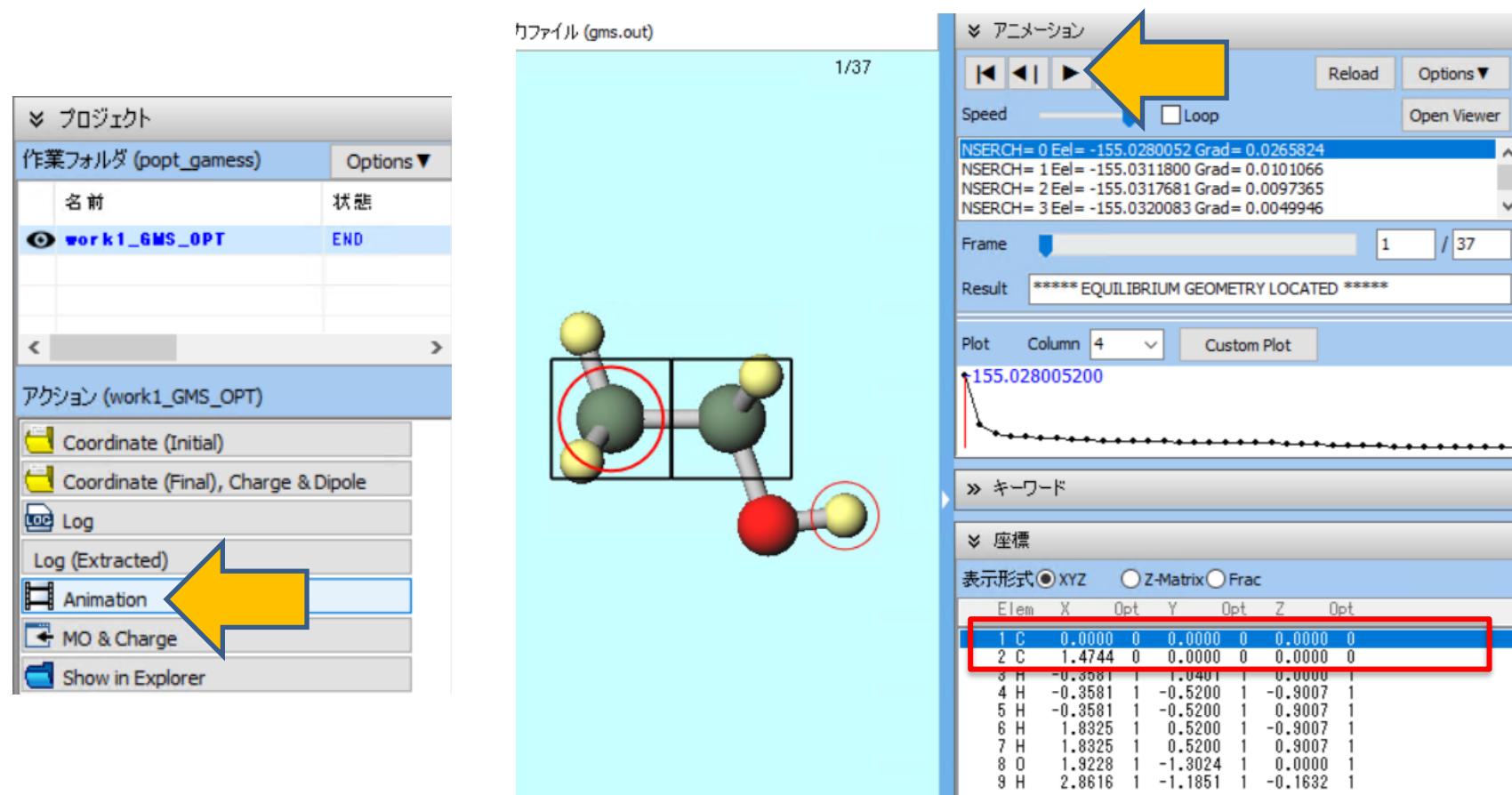
II. 計算の実行

1. ソルバを選択メニューで**GAMESS**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. **GAMESS Workflow Setup**ウィンドウで**OK**ボタンをクリックします。
3. ジョブの設定ウィンドウで使用計算機に応じて**# of MPI Procs**を設定して、**実行**ボタンをクリックします。



III.結果解析

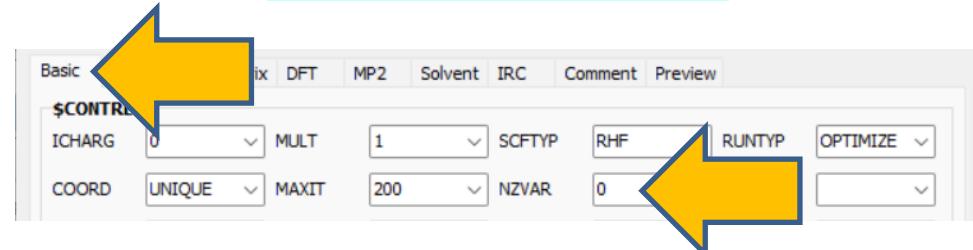
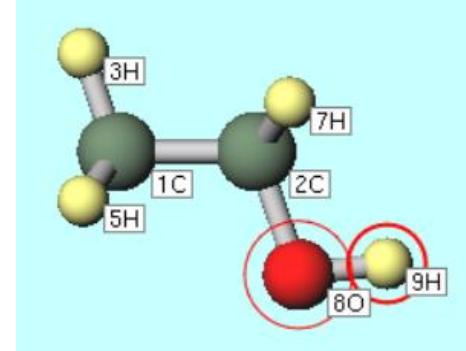
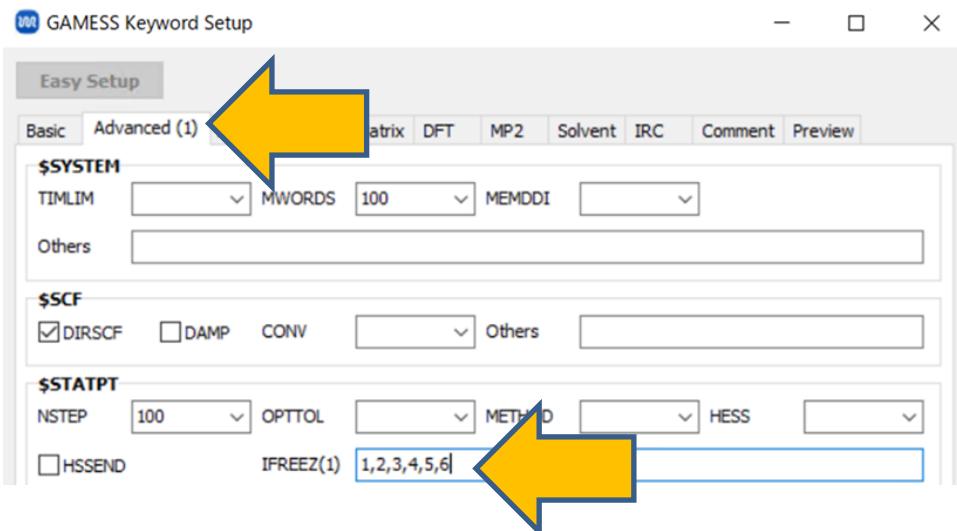
- 計算が終了して**work1_GMS_OPT**の作業フォルダの状態が**END**に変化した後、**アクション**の**Animation**をクリックします。アニメーションエリアの再生ボタンをクリックして、構造最適化の経過で固定した2つの炭素原子(**1C**及び**2C**)の座標が変わらないことを確認します。



補足 キーワードを直接入力する方法

最適化フラグを変更機能を使わずに設定する場合：

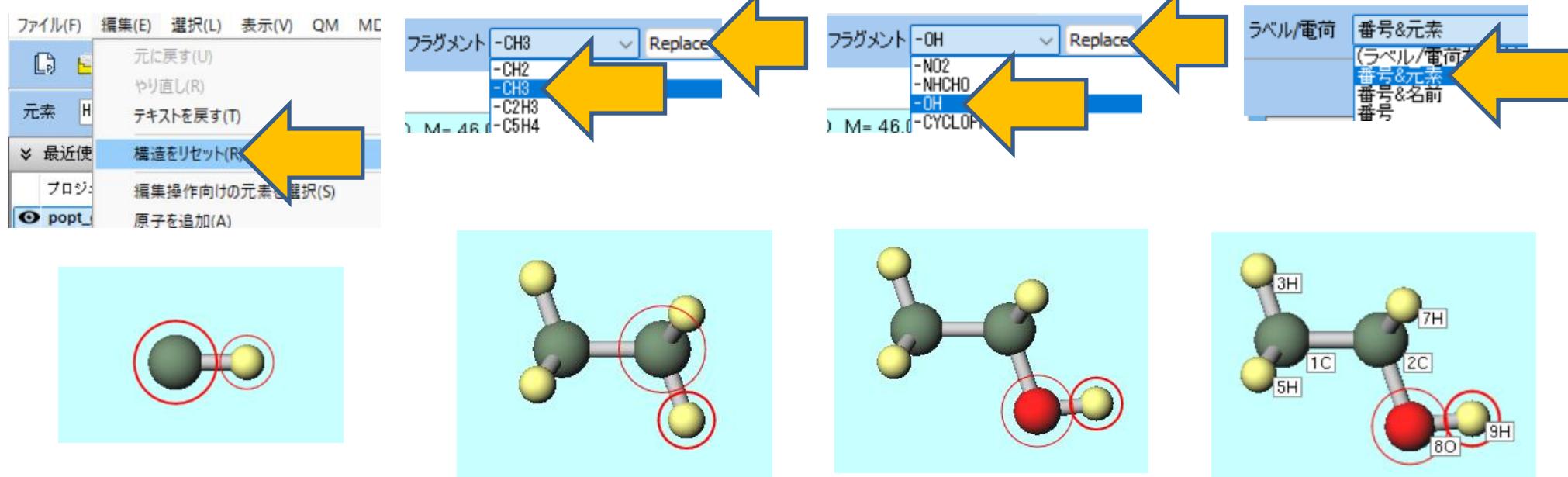
1. GAMESS Workflow Setupウィンドウで**Details**ボタンをクリックします。
2. 2つの炭素原子（**1C**と**2C**の1番目と2番目の原子）を固定する場合、**GAMESS Keyword Setup**ウィンドウで**Advanced(1)**タブの\$STATPTの**IFREEZ(1)**欄に1,2,3,4,5,6を記入します。V11.14.3以前のバージョンでは、**Advanced**タブの\$STATPTの**Others**欄に1,2,3,4,5,6を記入して、さらに**Basic**タブの\$CTRLの**NZVAR**を0にしてください。
- 記入する数値の意味は、1が1番目の原子のX座標、2が1番目の原子のY座標、3が1番目の原子のZ座標、4が2番目の原子のX座標、…です。



2. Delocalized座標(DLC)を使った結合長・結合角・二面角一部固定構造最適化

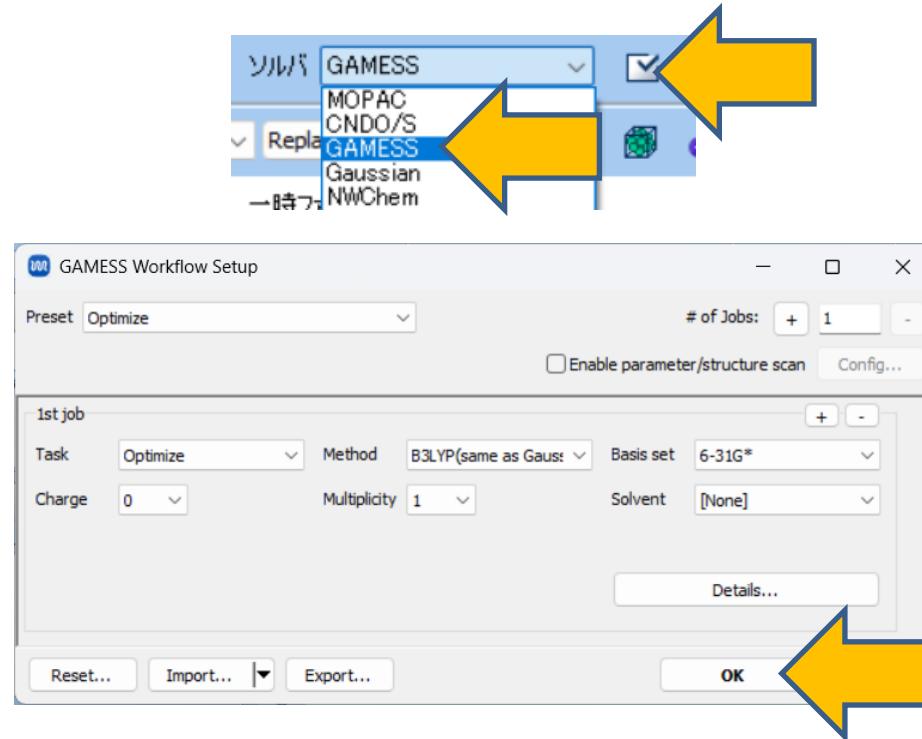
IV. 系のモデリング

1. 編集 | 構造をリセットをクリックして、初期状態のCHの状態に戻します。
2. フラグメントを選択を-CH₃に変更して、その右にあるReplaceボタンを2回クリックします。
3. フラグメントを選択を-OHに変更して、その右にあるReplaceボタンを1回クリックします。
4. ラベル/電荷を番号&元素に変更します。



V. 計算の実行

1. ソルバを選択メニューで**GAMESS**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. **GAMESS Workflow Setup**ウィンドウで**Details**ボタンをクリックします。



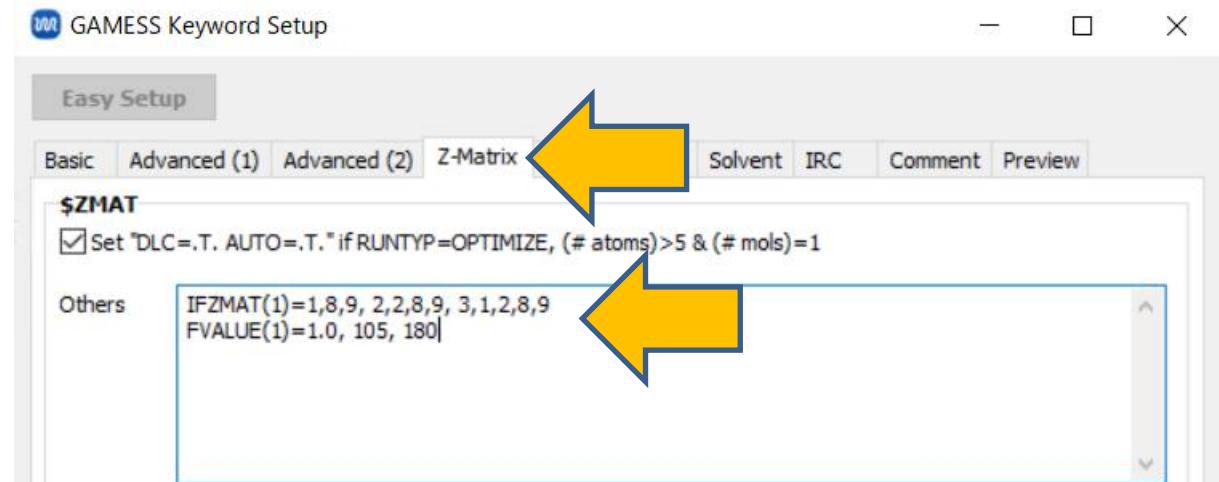
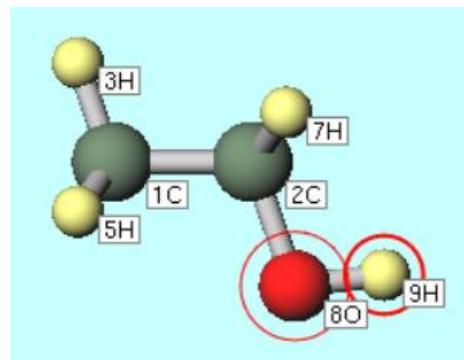
V. 計算の実行

1. **8O-9H**の結合長を1.0 Å、**2C-8O-9H**の結合角を105°、**1C-2C-8O-9H**の二面角を180°に固定するため、**GAMESS Keyword Setup**ウィンドウの**ZMAT**タブの**\$ZMAT**の**Others**欄に

IFZMAT(1)=1,8,9, 2,2,8,9, 3,1,2,8,9

FVALUE(1)=1.0, 105, 180

を記入します。

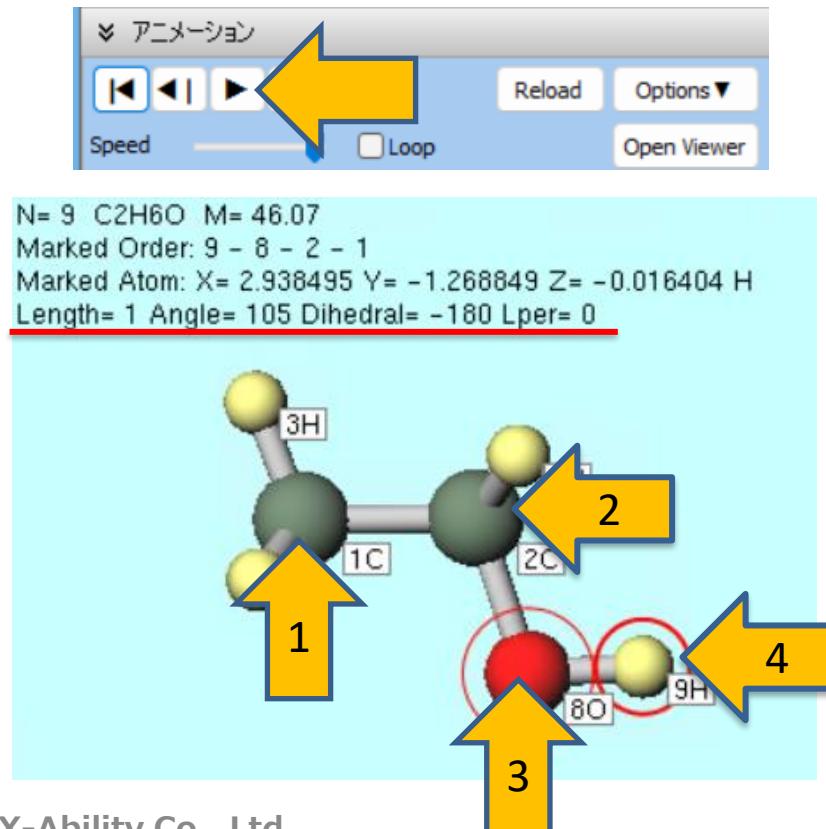
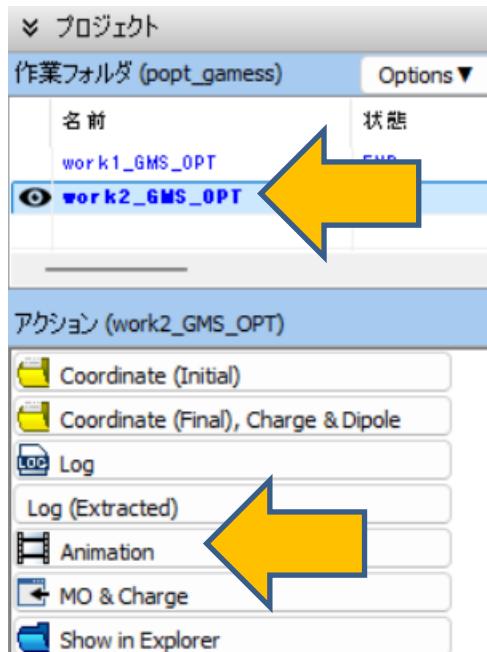


V. 計算の実行

1. GAMESS Keyword Setup ウィンドウで **OK** ボタンをクリックします。
2. GAMESS Workflow Setup ウィンドウで **OK** ボタンをクリックします。
3. ジョブの設定 ウィンドウで 使用計算機に応じて **# of MPI Procs** を設定して、**実行** ボタンをクリックします。

VI. 結果解析

- 計算が終了して **work2_GMS_OPT** の作業フォルダの状態が **END** に変化した後、**work2_GMS_OPT** をクリックしてアクションの **Animation** をクリックします。 **1C**、**2C**、**8O**、**9H** の原子を順にクリック後、アニメーションエリアの再生ボタンをクリックします。構造最適化の経過で固定した **8O-9H** の結合長 (Length) 、**2C-8O-9H** の結合角 (Angle) 、**1C-2C-8O-9H** の二面角 (Dihedral) が変わらないことを確認します。



補足 結合長・結合角・二面角固定の指定方法

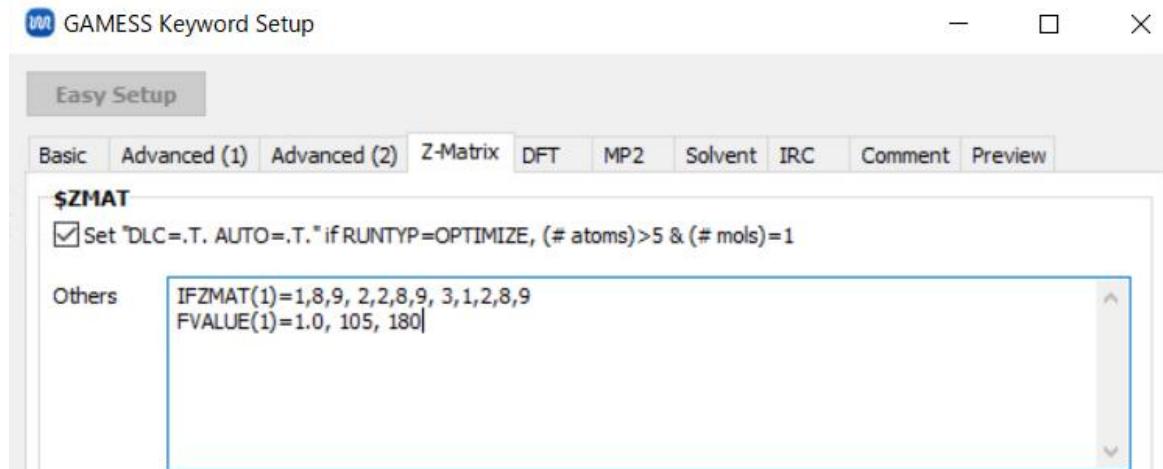
- IFZMAT(1)で固定部分を指定します。初めの数値は1が結合長、2が結合角、3が二面角で、続けて結合長は2つの原子の番号、結合角の場合は3つの原子の番号、二面角の場合は4つの原子の番号を記入します。
- IFZMAT(1)で指定した結合長・結合角・二面角の固定値をFVALUE(1)で指定します。分子表示エリアの構造よりも、FVALUE(1)の値が優先されます。

例：8番目-9番目の原子の結合長を1.0 Å、2番目-8番目-9番目の原子の結合角を105°、1番目-2番目-8番目-9番目の原子の二面角を180°に固定する場合

IFZMAT(1)=1,8,9, 2,2,8,9, 3,1,2,8,9

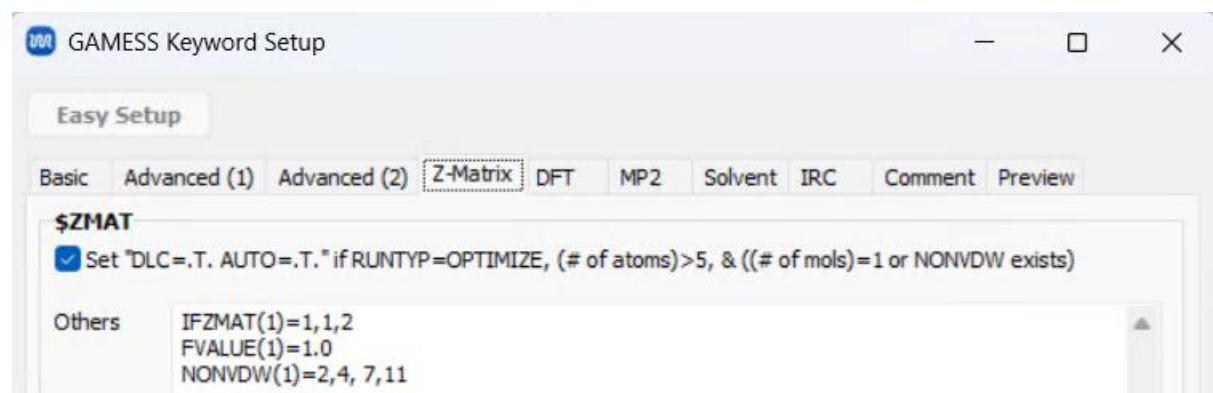
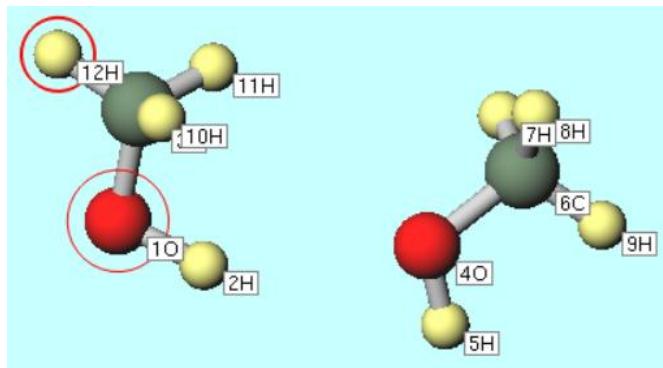
FVALUE(1)=1.0, 105, 180

を\$ZMATのOthers欄に記入します。,の後の空白、改行は任意です。



補足 複数分子での結合長・結合角・二面角固定の指定方法

- **IFZMAT(1)、FVALUE(1)**を使った部分構造最適化計算では、全ての原子がvan der Waals半径以下でつながっていることが前提となります。複数分子などでつながっていない場合、ERROR: BAD DELOCALIZED COORDINATES GENERATED!!!とエラーが出ます。
- つながっていない場合、キーワード**NONVDW(1)**を使って接続情報を追加します。接続する2つの原子の番号を\$ZMATの**Others**欄に記入します。複数の接続の記入が可能で、空白は任意です。
- 最近接の2原子のNONVDW(1)記入だけでERROR: BAD DELOCALIZED COORDINATES GENERATED!!!とエラーが出た場合、他の2原子を追加してください。左下のエタノール2分子の場合、2番目と4番目の原子のみではエラーが出たため、7番目と11番目の原子を追加しています。



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。

The screenshot shows the Winmostar User Manual website's search bar and table of contents. The table of contents includes:

- はじめに
- インストール方法
- 画面の説明・操作方法
- 基本的な操作の流れ
- 初期構造の作成方法
- 各種メニュー・ウィンドウ
- リモート游戏操作
- アドオン
- その他のトピック
- 既知の不具合
- よくある質問・トラブルショーティング



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