

 winmostar チュートリアル

GAMESS

蛍光スペクトル計算

V11.1.0

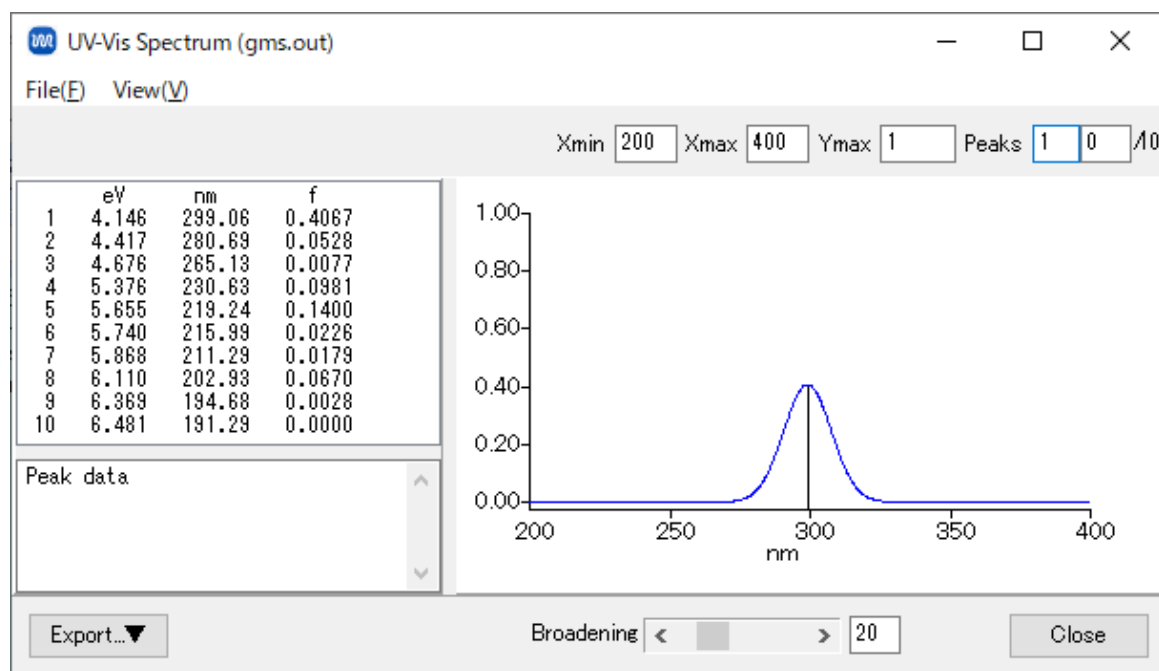
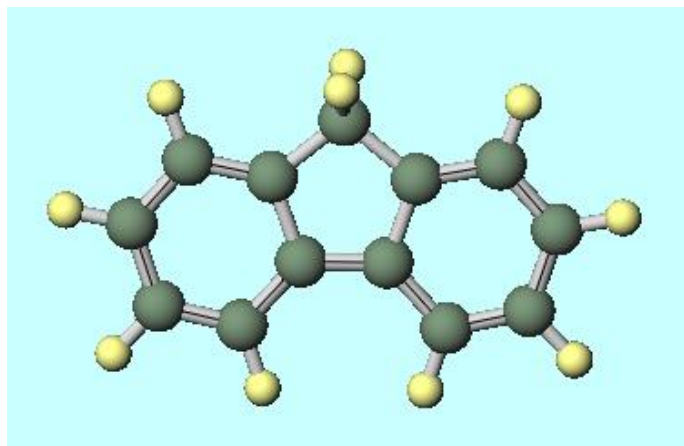
2020年4月21日 株式会社クロスアビリティ

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

- フルオレン(C₁₃H₁₀)分子の蛍光スペクトル計算をGAMESSを用いて実行します。第一励起状態の構造最適化計算をTDDFT(B3LYP/6-31G*)レベルで実行し、蛍光スペクトルを表示します。



動作環境設定

- GAMESSの場合

GAMESSインストールマニュアル

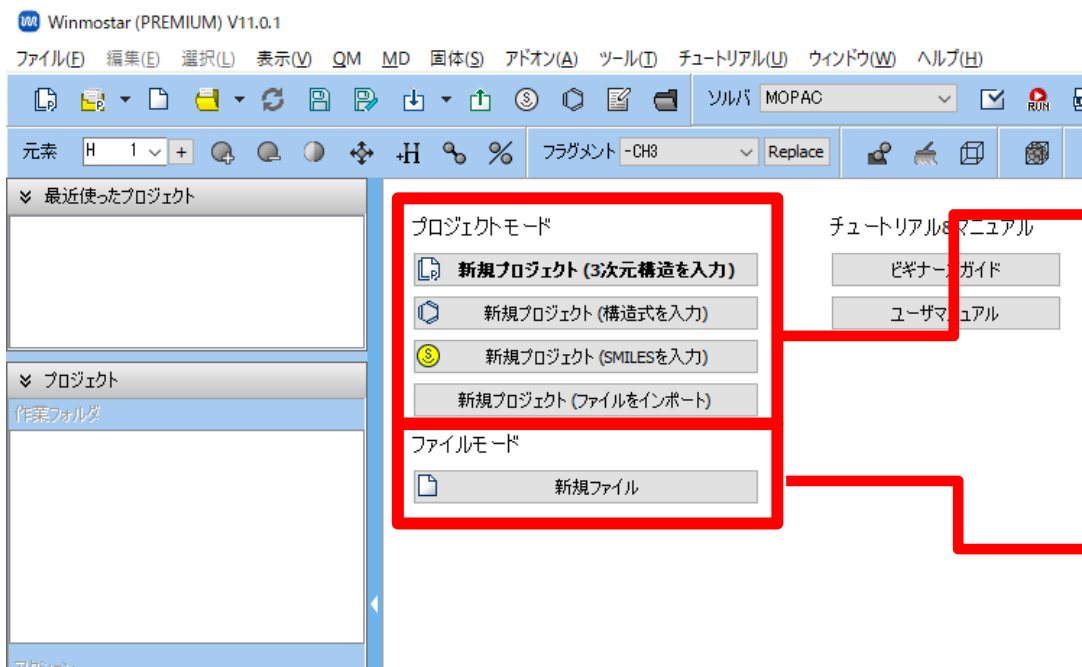
https://winmostar.com/jp/manual_jp/installation/GAMESS_install_manual_jp_win.pdfに従い、GAMESSをインストールしてください。

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[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。

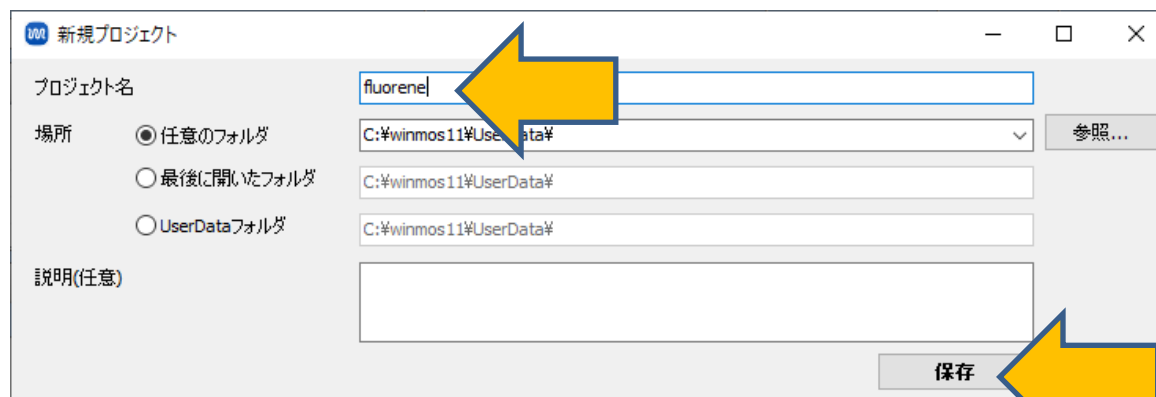
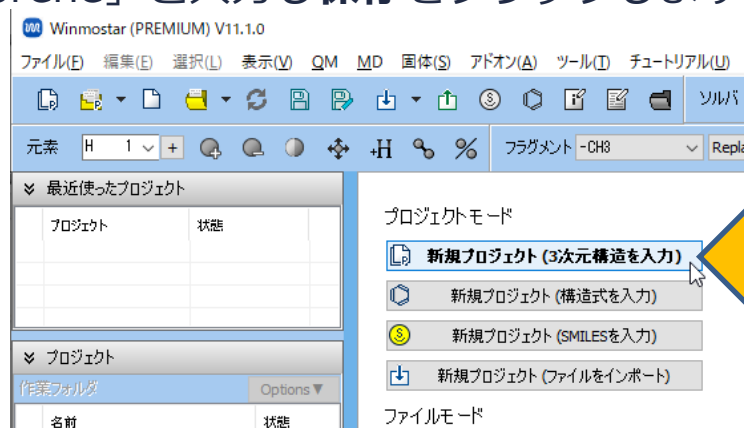
ファイルモード
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

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

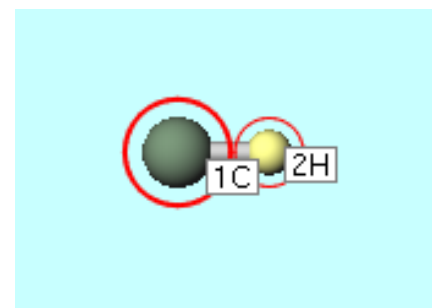
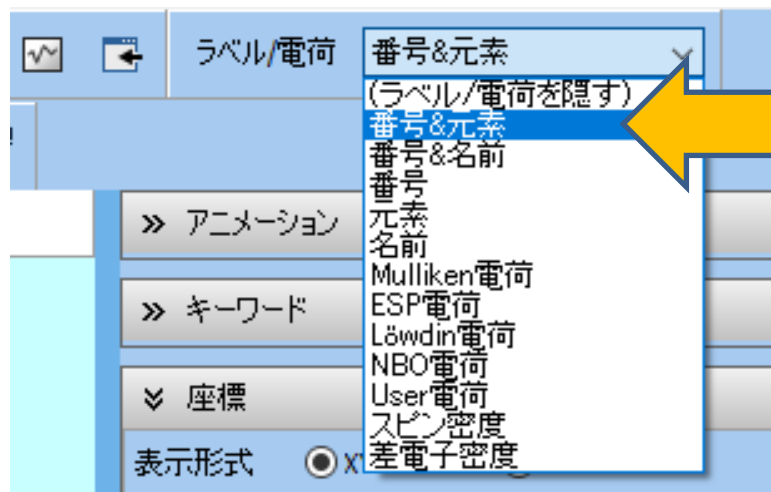
基本的な操作方法は[GAMESS基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

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「fluorene」と入力し**保存**をクリックします。



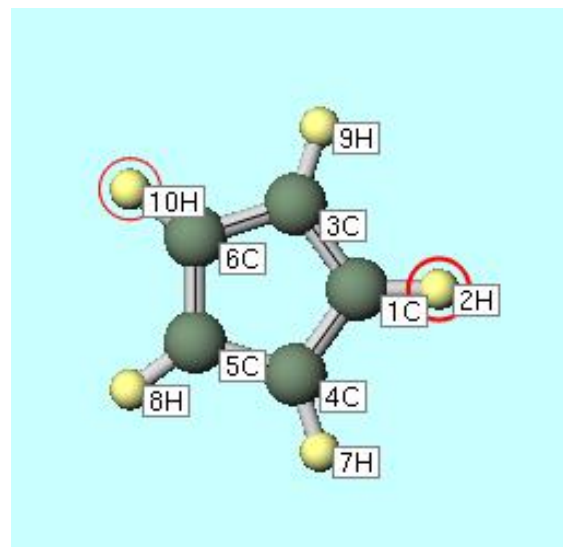
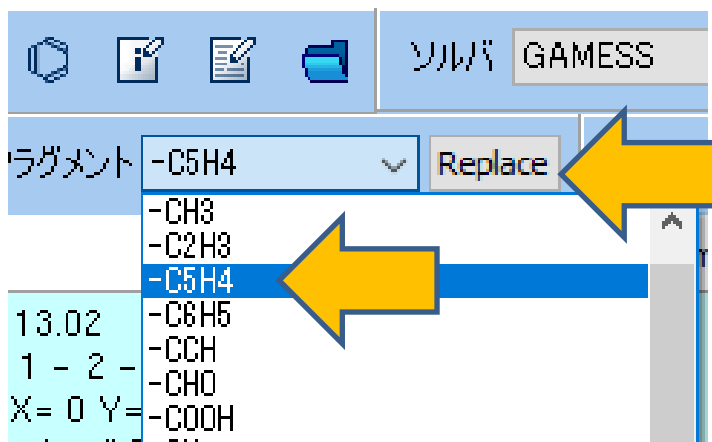
I. モデルの作成

メインウィンドウ右上のラベル/電荷メニューから番号&元素を選択し、分子表示エリアで各原子の名前を表示します。



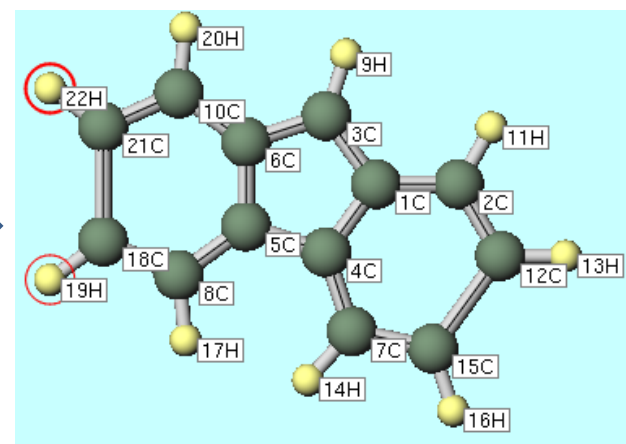
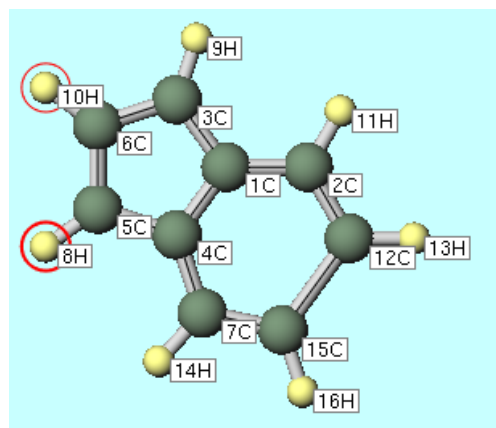
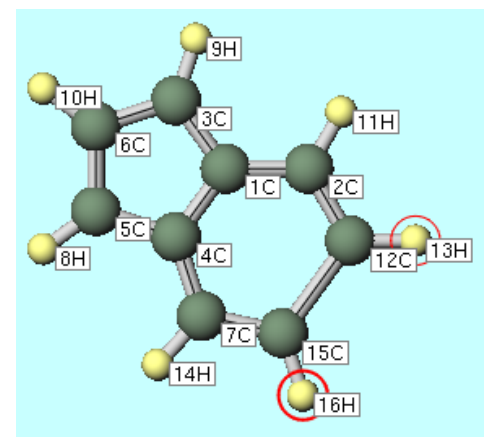
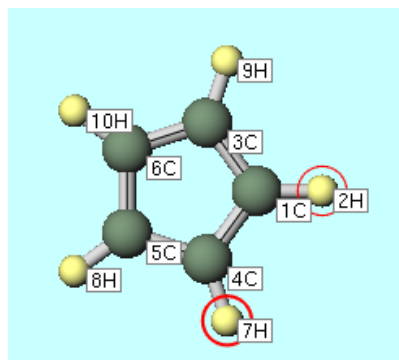
I. モデルの作成

1. メインウィンドウ上部の**フラグメント**を選択から**-C5H4**を選択し、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックします。



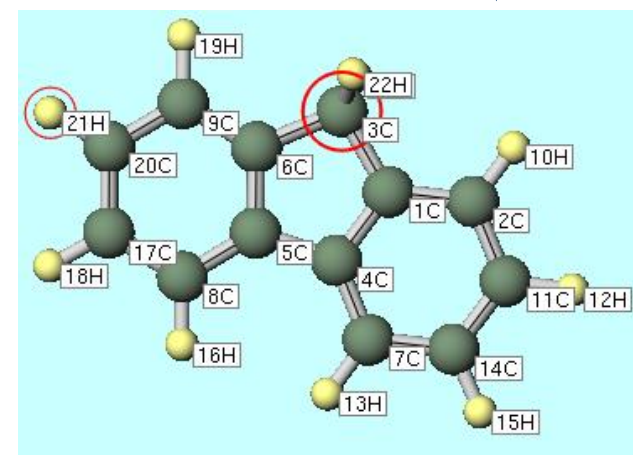
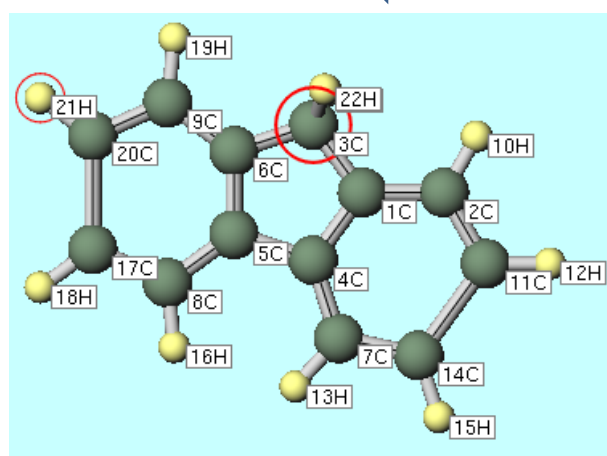
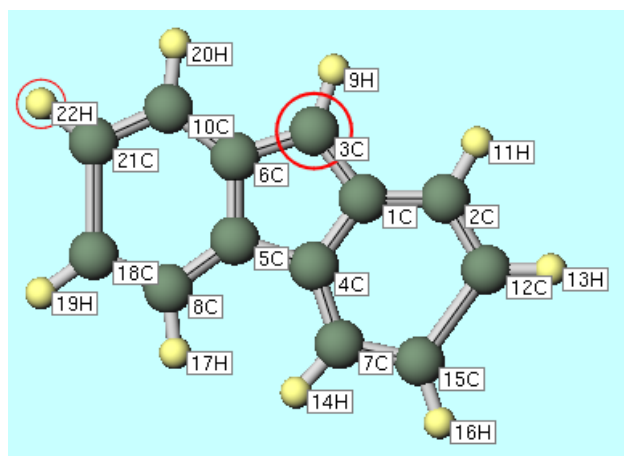
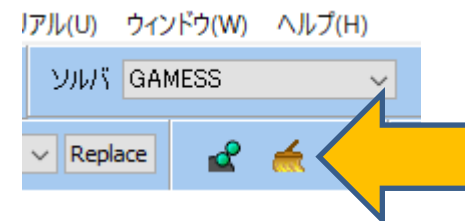
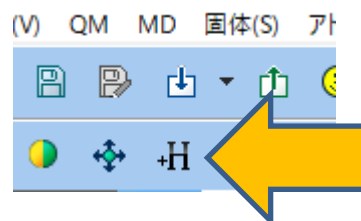
I. モデルの作成

1. 2Hと7H原子をクリックして2つの原子が赤丸でマークされた状態で、**編集 | 環構築**を選択します。
2. 8Hと10H原子をクリックして2つの原子が赤丸でマークされた状態で、**編集 | 環構築**を再度選択します。



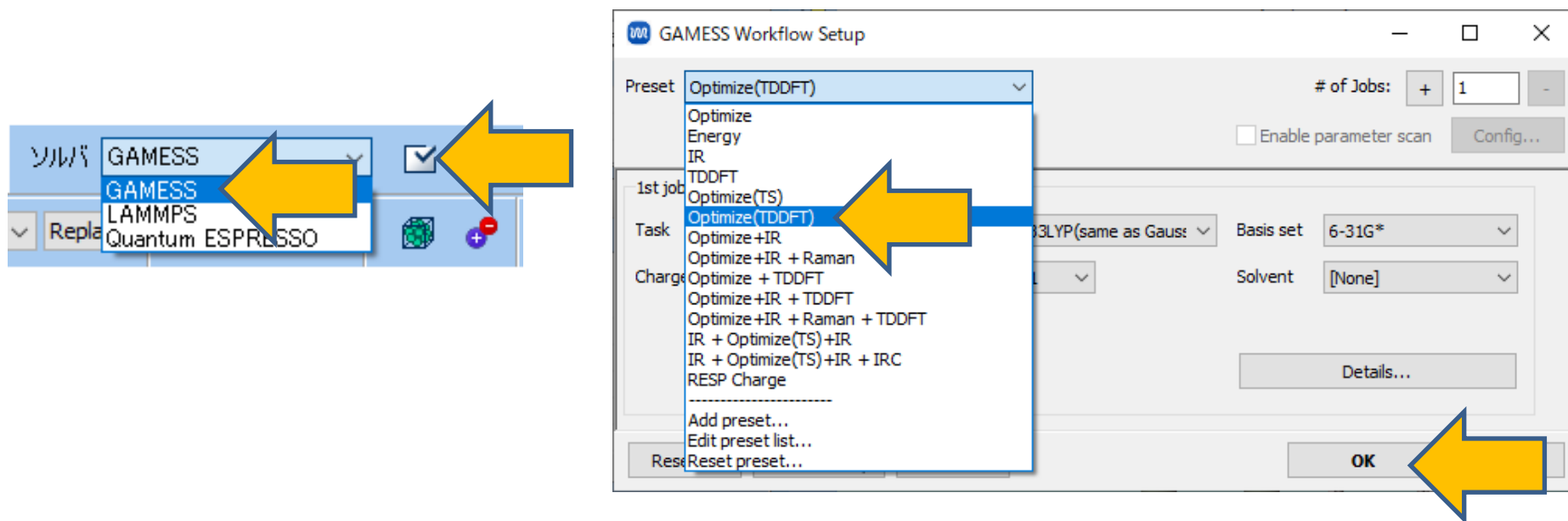
I. モデルの作成

1. 3C原子をクリックして、**選択原子に水素を付加**を1回クリックします。
2. **簡易構造最適化**ボタンをクリックします。これで9H-フルオレン分子の初期構造が完成します。



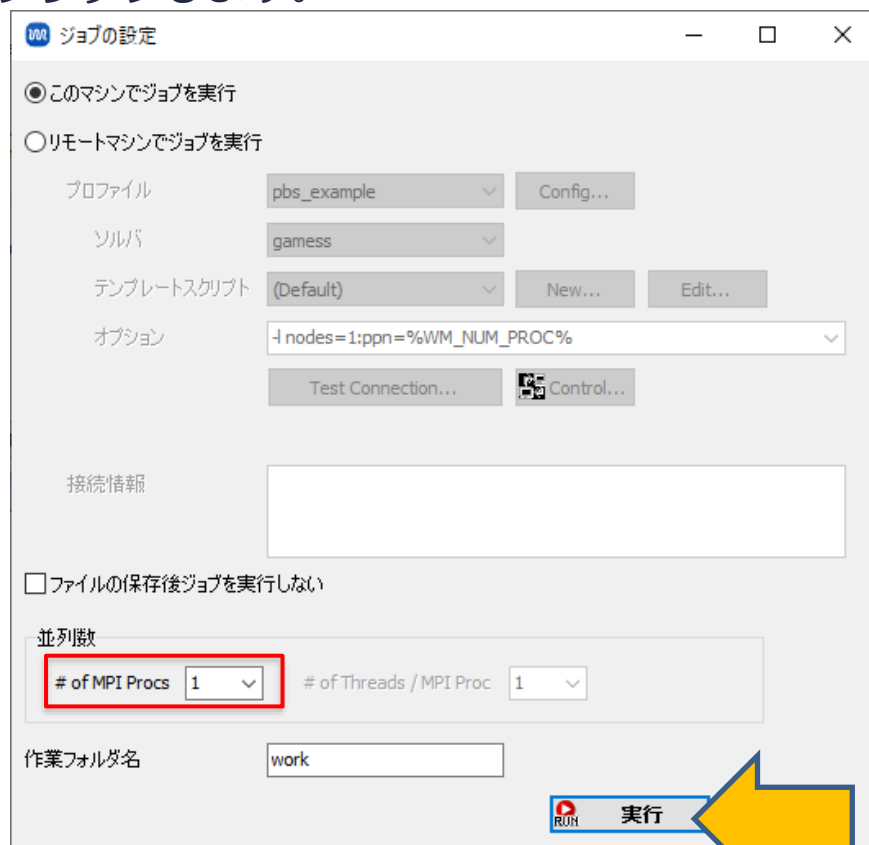
II. 計算の実行

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、**Preset**を**Optimize(TDDFT)**に変更します。
3. **OK**ボタンをクリックします。
 - デフォルトの設定では第1励起状態の構造最適化が行われます。
 - 計算精度を落として計算を早く終わらせたい場合は、**Basis set**を**STO-3G**に変更します。



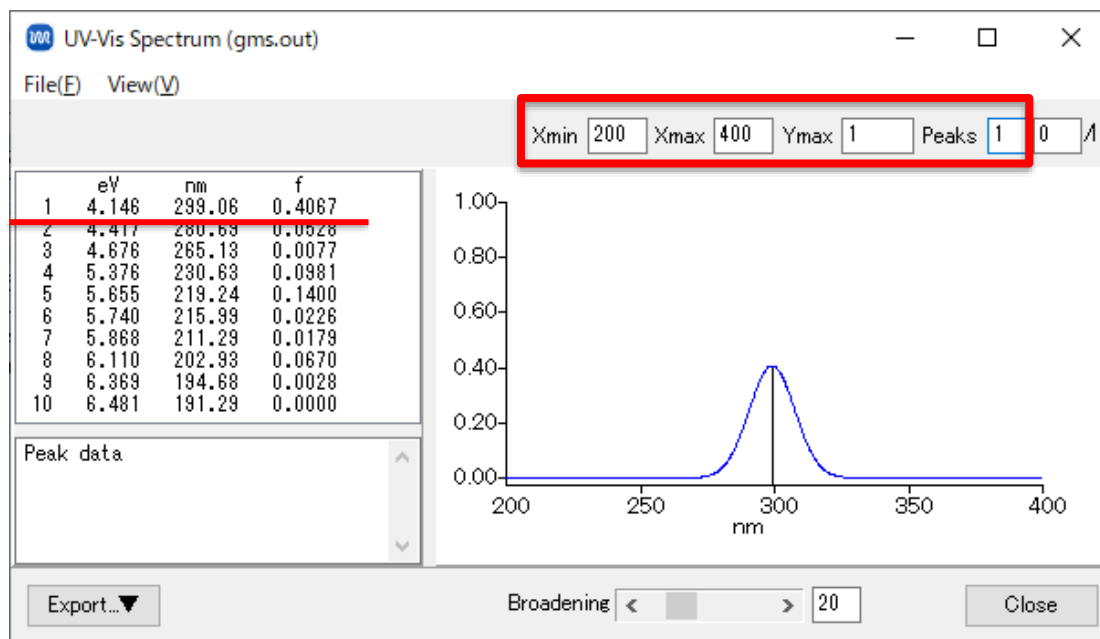
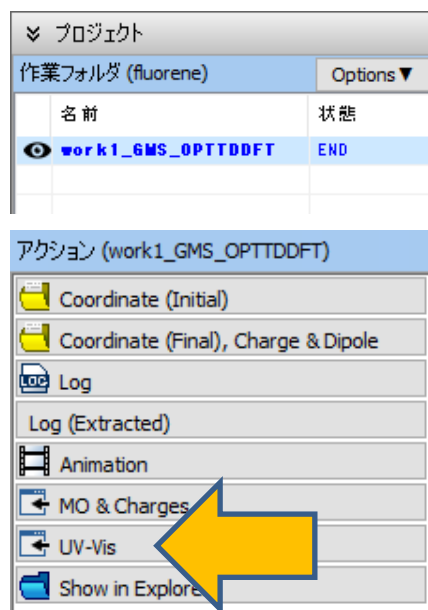
II. 計算の実行

1. 20原子程度のフルオレン分子でも、B3LYP/6-31G*レベルでは1CPUコアで10時間程度かかるため、計算機のコア数に応じて# of MPI Procsを設定します。リモートマシンで実行する際は、プロファイル等の設定も行います。
2. **実行ボタン**をクリックします。



III. 計算解析

1. 計算が終了して作業フォルダの状態が**END**もしくは**END(-)**に変化した後、メインウィンドウ右下のアクションエリアの**UV-Vis**をクリックすると、第一励起状態最適化構造でのUV-Visスペクトルが表示されます。
2. スペクトルを見やすくするため、**Xmin**を**200**、**Xmax**を**400**、**Ymax**を**1**に変更します。
3. 今回の計算で意味があるのは基底状態と第一励起状態のエネルギー差であることと、蛍光のほとんどは第一励起状態から起こる(カシャの法則)ことから、余分なピークを削除するためPeaksの右横の数値を1にします。蛍光波長はUV-Visスペクトルウィンドウの左欄リスト1番目の299.06 nmとなります。



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。



[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