

 winmostar チュートリアル

GAMESS

溶媒効果

V11.5.8

2023年12月12日 株式会社クロスアビリティ

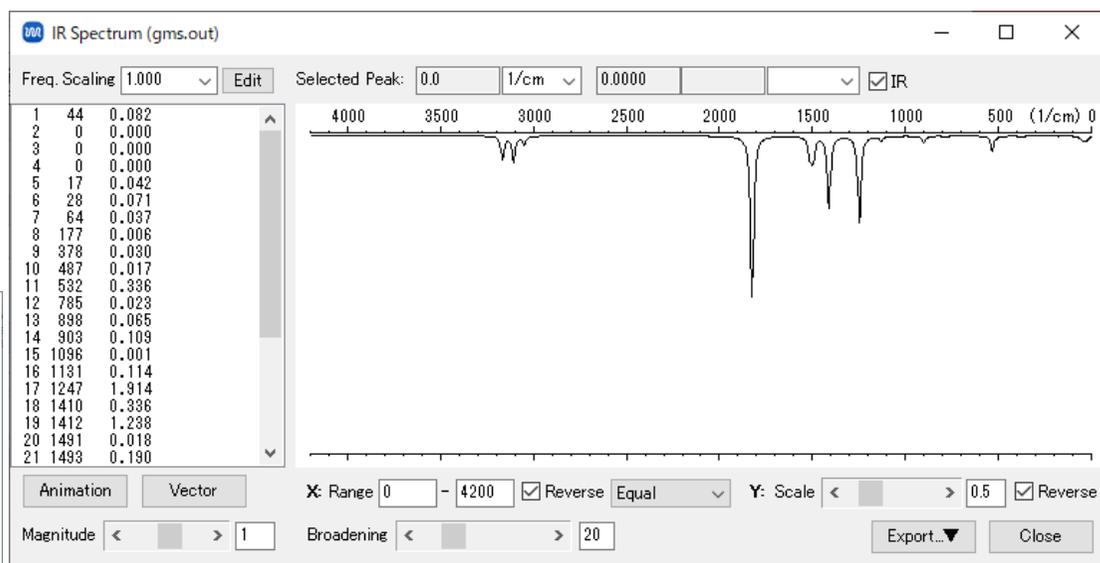
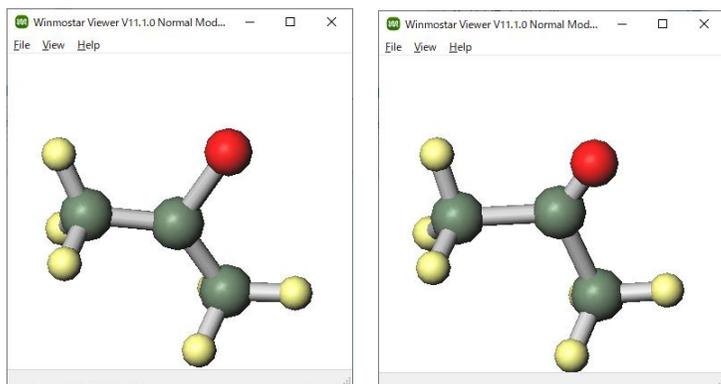
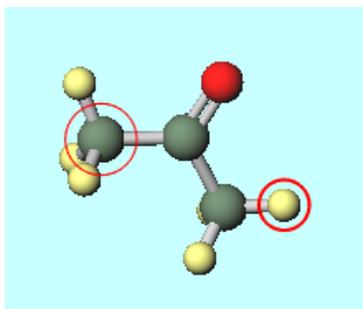
本書について

- 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

PCM法を用いて水溶液中のアセトン分子の構造最適化とIR計算をB3LYP/6-31G*レベルで計算します。PCM(polarizable continuum model、分極連続体モデル)法では、溶媒の誘電率を持った連続誘電体を溶質分子の周りに置き、近似的に溶媒効果を取り込みます。

比較のために、真空中で同様に構造最適化とIR計算をB3LYP/6-31G*レベルで計算し、親水基のC=O部分の伸縮振動、疎水基のC-H部分の変角運動がどのように変化するかを確認します。



動作環境設定

- GAMESSの場合

GAMESSインストールマニュアル

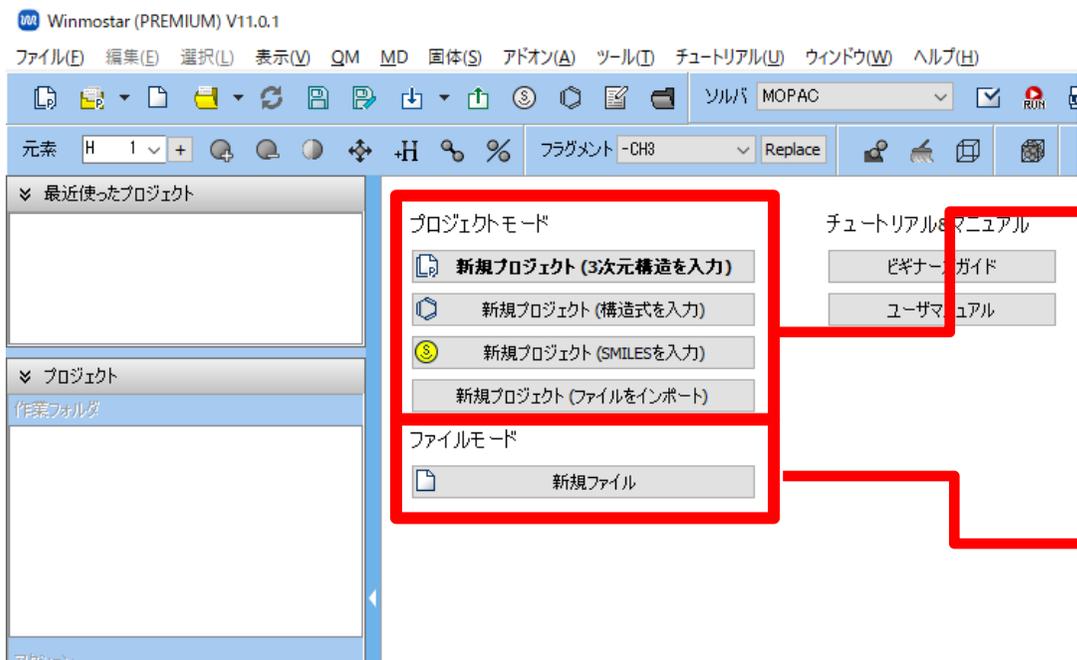
https://winmostar.com/jp/manual_jp/installation/GAMESS_install_manual_jp_win.pdfに従い、GAMESSをインストールしてください。

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

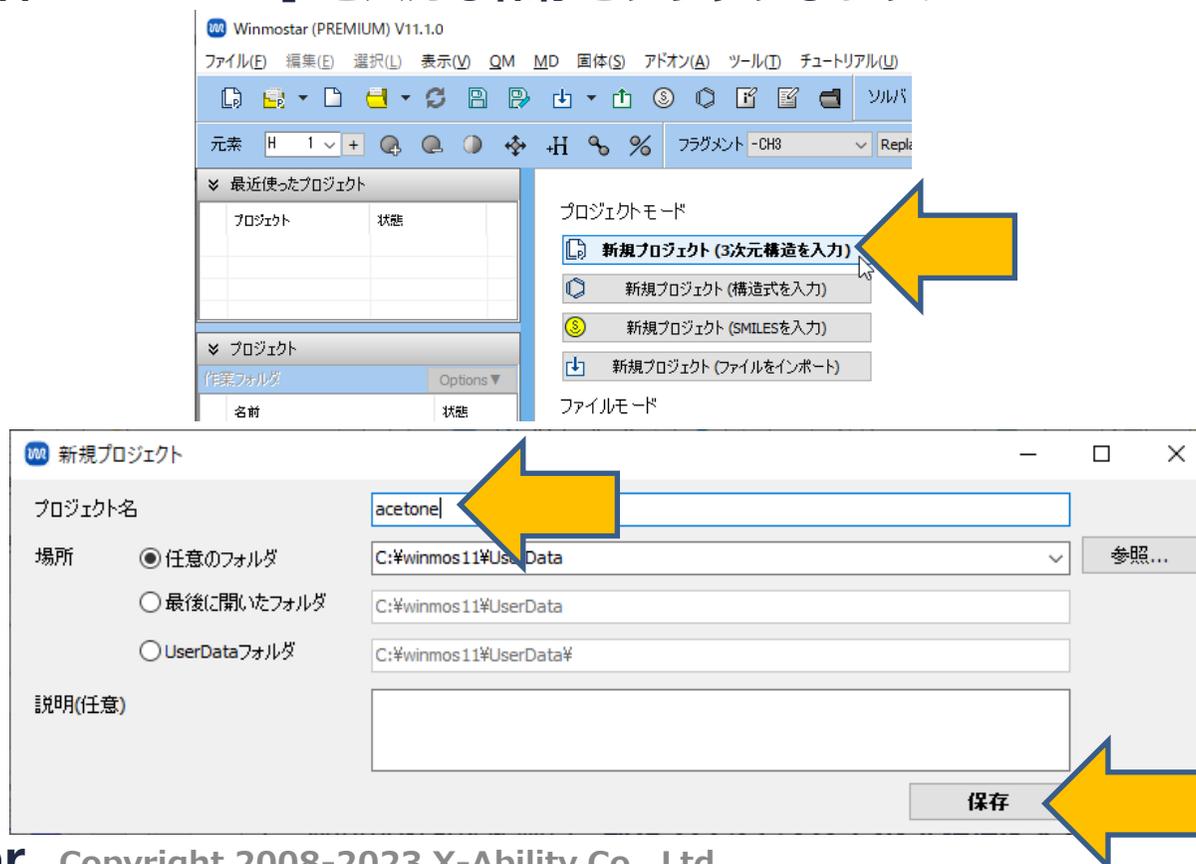
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

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

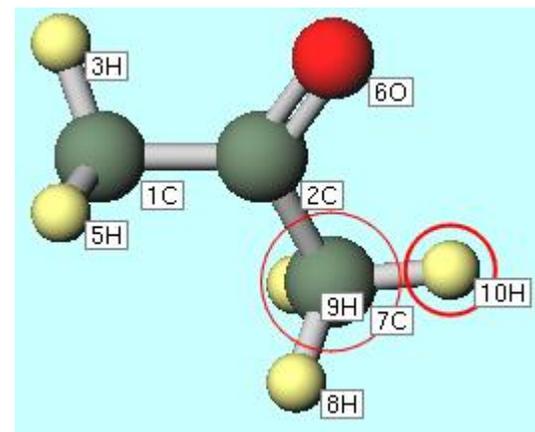
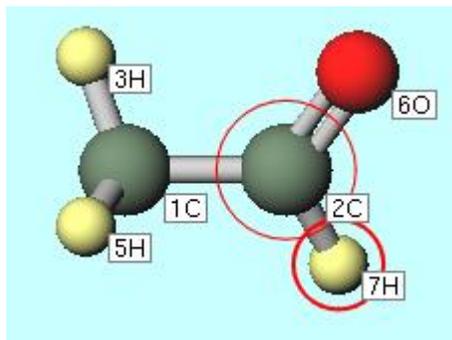
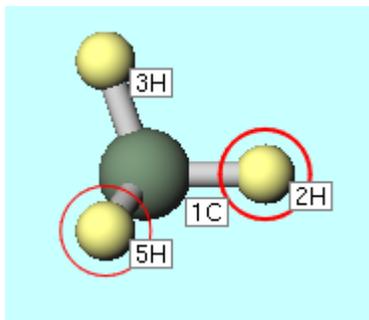
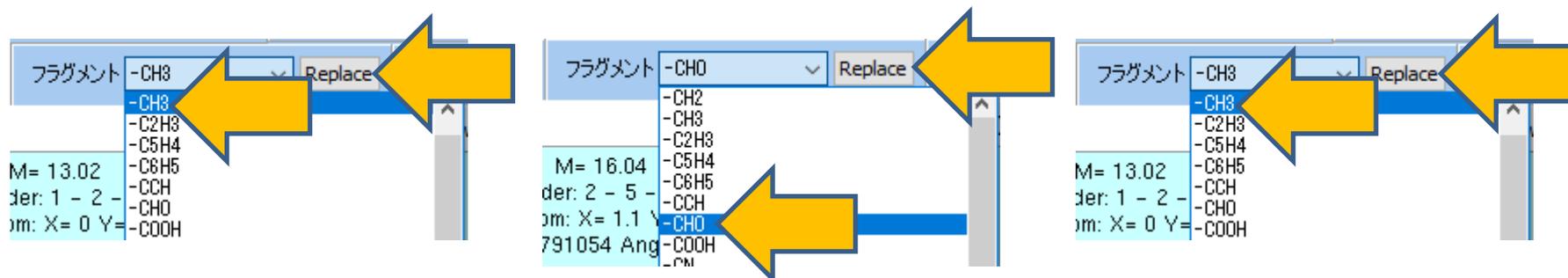
基本的な操作方法は[GAMESS基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

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「acetone」と入力し**保存**をクリックします。



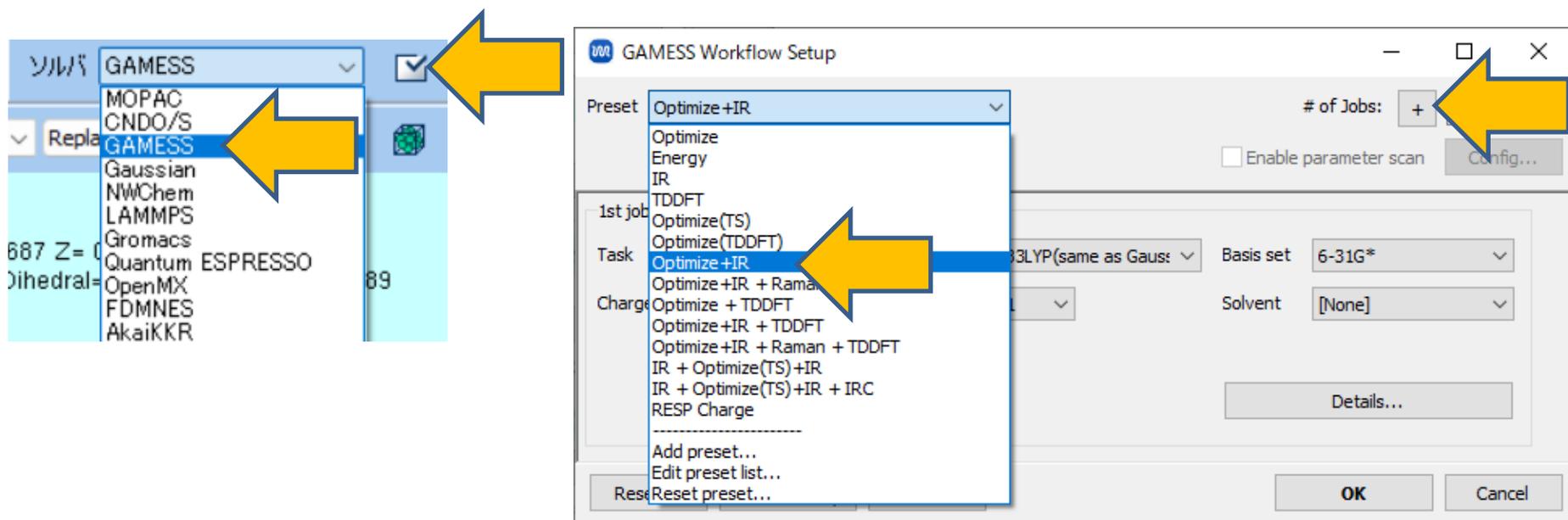
I. 系のモデリング

1. メインウィンドウ上部の**フラグメントを選択**から**-CH3**を選択し、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックして、メタンを作成します。
2. **フラグメントを選択**から**-CHO**を選択し、**Replace**ボタンを1回クリックし、アセトアルデヒドを作成します。
3. 再度**-CH3**ボタンを選択し、**Replace**ボタンを1回クリックし、アセトンを作成します。



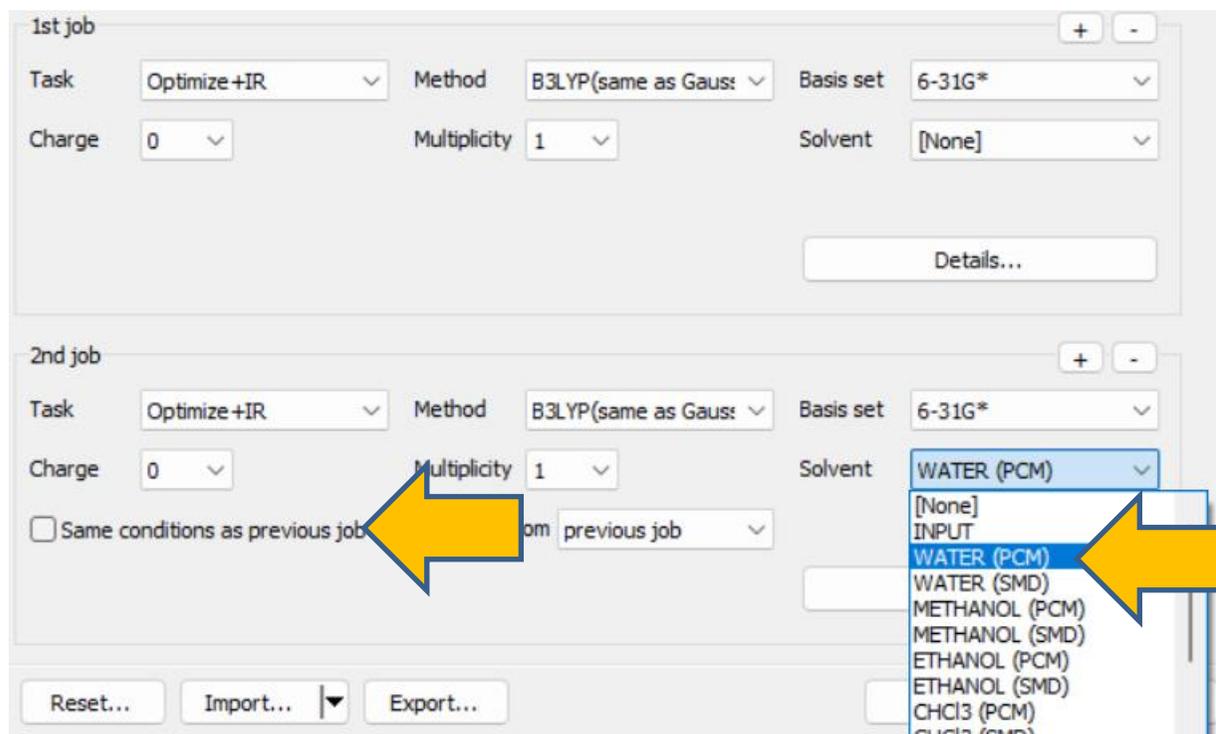
II. 計算の実行

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+IR**に変更します。
 - 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。
3. **# of Jobs**の**+**ボタンをクリックします。



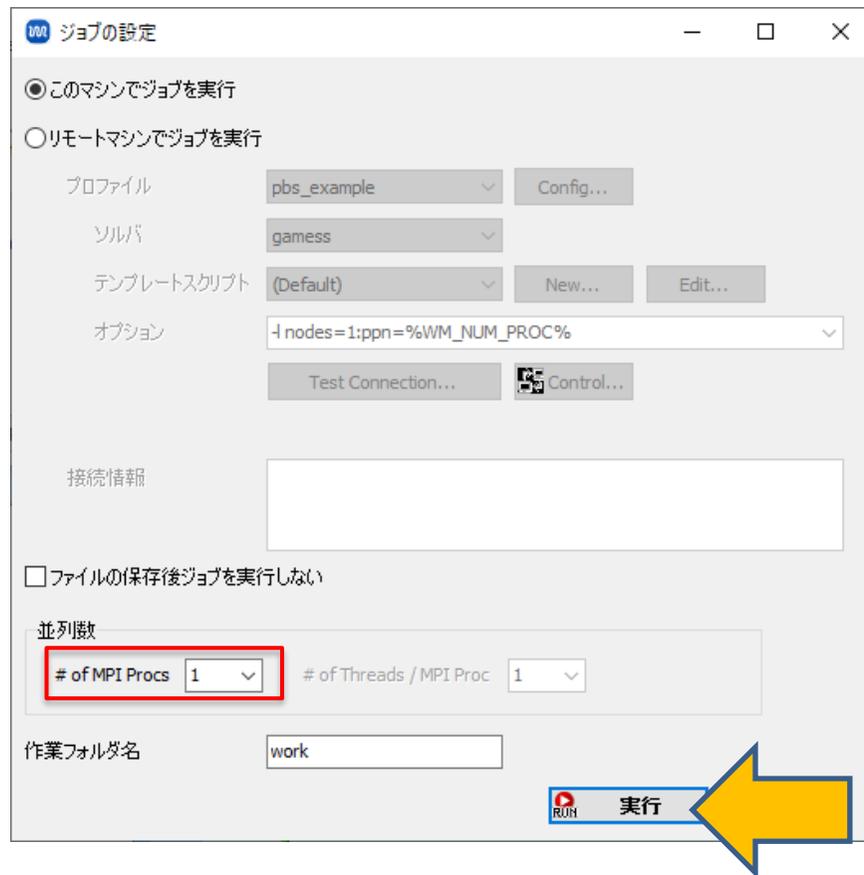
II. 計算の実行

1. 新たに表示された**2nd job**の**Same conditions as previous job**のチェックを外します。
 2. **2nd job**の**Solvent**を**WATER (PCM)**に変更します。
 3. **OK**ボタンをクリックします。
- 1st jobは真空中の構造最適化+IR計算、2nd jobは水溶液中の構造最適化+IR計算となります。



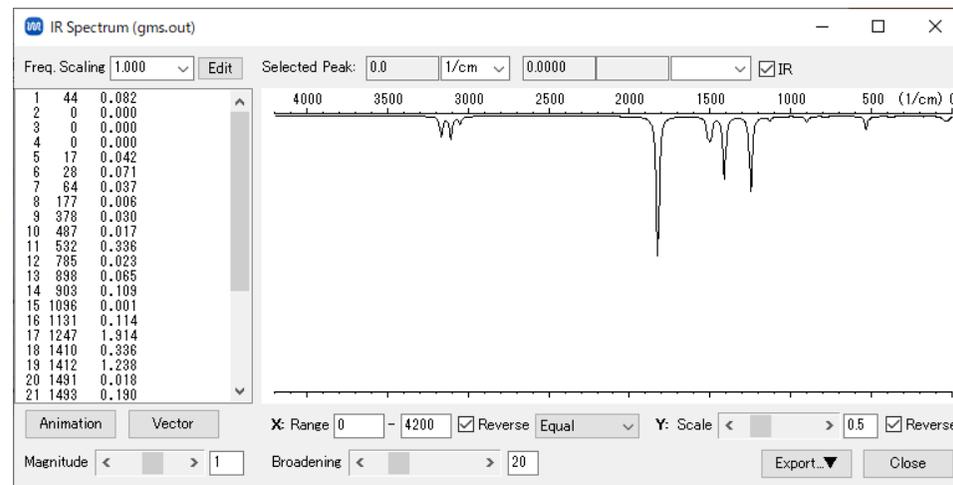
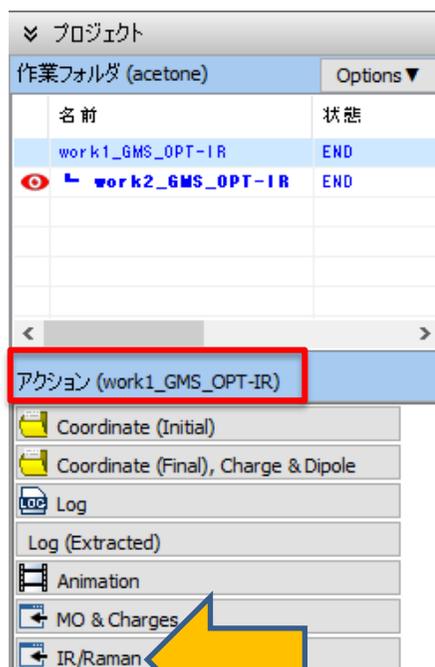
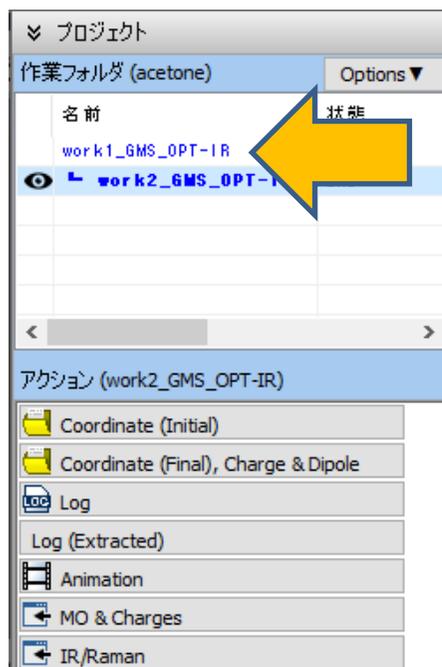
II. 計算の実行

1. 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. 結果解析

1. 計算が終了してwork2_GMS_OPT-IRの作業フォルダの状態が**END**もしくは**END(-)**に変化した後、作業フォルダエリアのwork1_GMS_OPT-IRをクリックします。
2. アクションの()内がwork1_GMS_OPT-IRに変わったことを確認して、**IR/Raman**をクリックして、真空中の**IR Spectrum**ウィンドウを表示します。

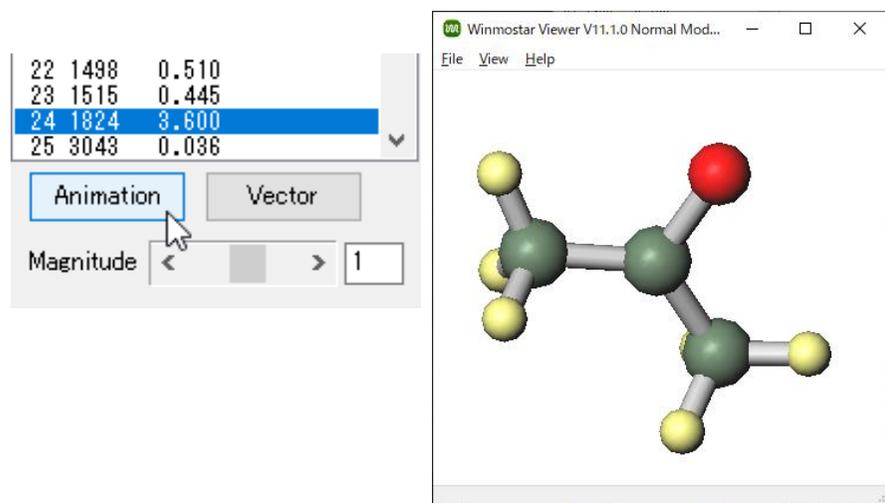


III. 結果解析

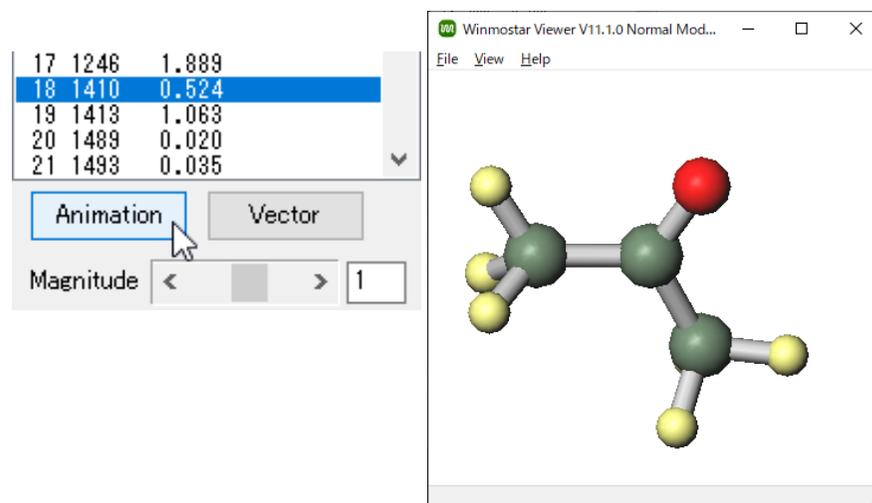
真空中のC=O伸縮振動とC-H変角振動を確認します。B3LYP/STO-3Gで計算した場合、数値が異なります。

1. 24番目 1824cm⁻¹をクリックして、**Animation**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動します。このピークがC=O部分の伸縮振動であることが分かります。
2. 18番目 1410cm⁻¹もしくは19番目 1413cm⁻¹をクリックして、**Animation**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動し、C-H部分の変角振動であることが分かります。

C=O伸縮振動

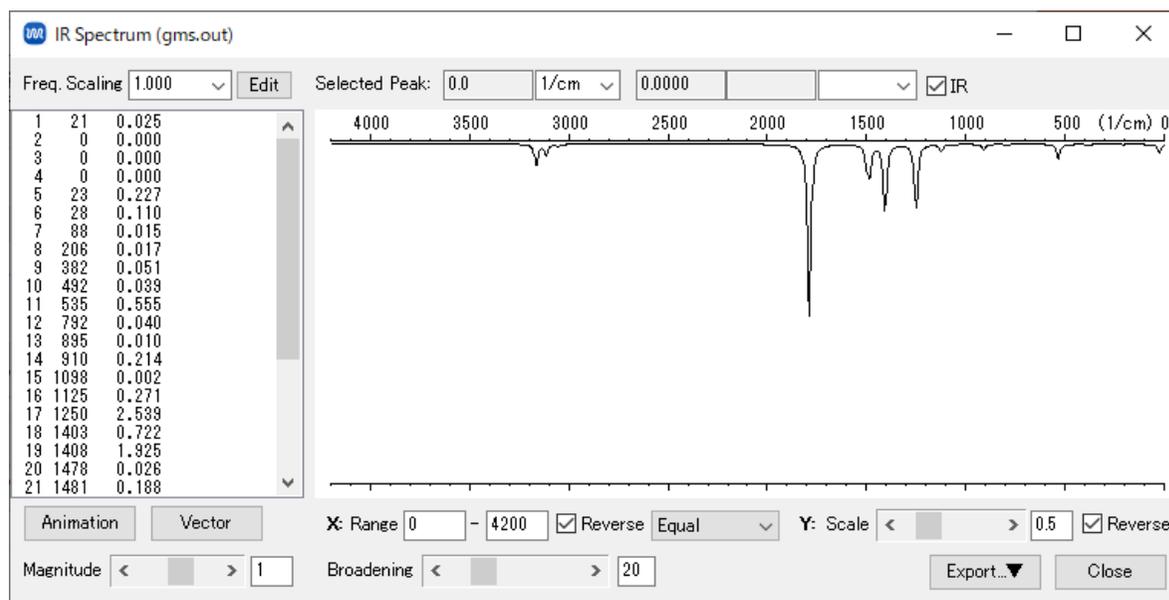
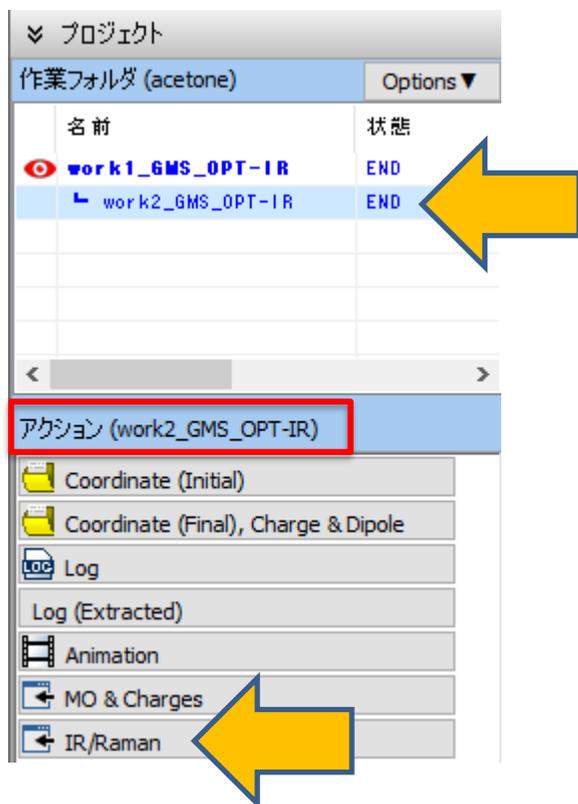


C-H変角振動



III.結果解析

1. 作業フォルダエリアのwork2_GMS_OPT-IRをクリックします。
2. アクションの()内がwork2_GMS_OPT-IRに変わったことを確認して、**IR/Raman**をクリックして、水溶液中の**IR Spectrum**ウィンドウを表示します。

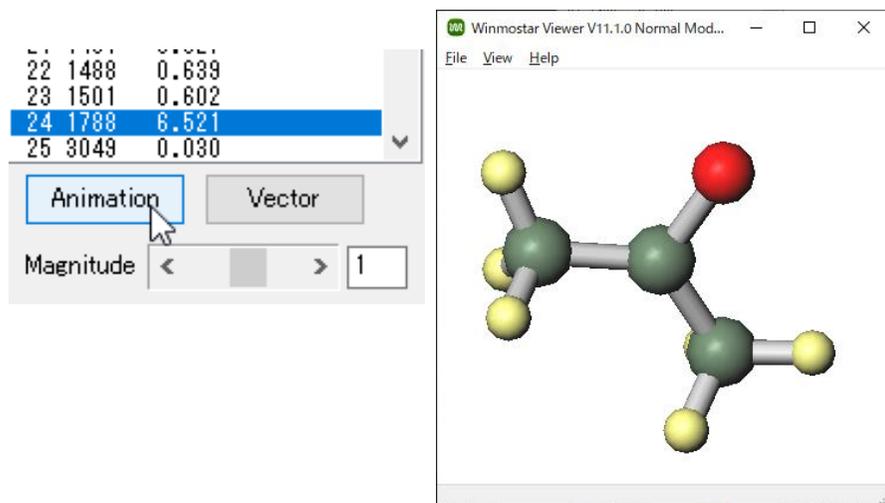


III. 結果解析

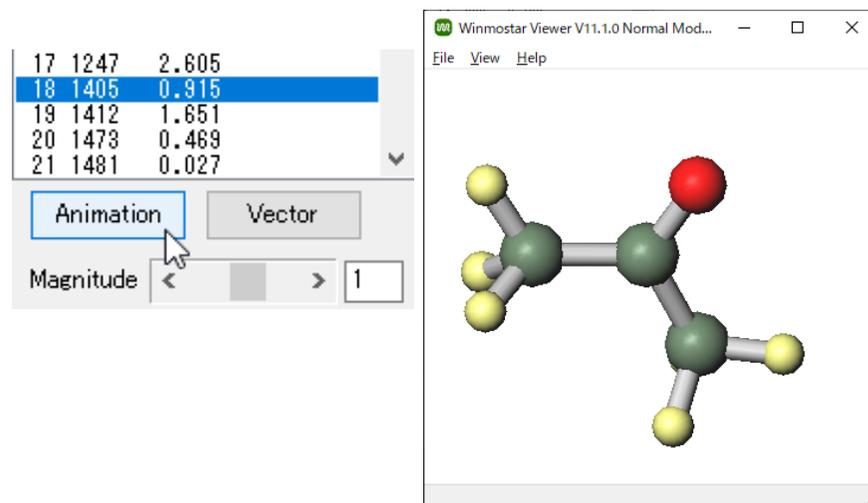
水溶液中のC=O伸縮振動とC-H変角振動を確認します。

1. 24番目 1788 cm^{-1} をクリックして、**Animation**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動し、C=O部分の伸縮振動であることが分かります。
2. 18番目 1405 cm^{-1} もしくは19番目 1412 cm^{-1} をクリックして、**Animation**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動し、C-H部分の変角振動であることが分かります。

C=O伸縮振動



C-H変角振動



III.結果解析

親水基のC=O部分の伸縮運動では、真空中と水溶液中で 36cm^{-1} の差があり、疎水基のC-H部分の変角振動では 5cm^{-1} 以下の差しかありませんでした。このように溶媒効果を含めた計算を行うことにより、溶媒がどの部分に大きく影響するかを計算から理解することができます。

アセトンの振動数(cm^{-1})

	真空中	水溶液中
C=O伸縮運動	1824	1788
C-H変角振動	1410 1413	1405 1412

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