

 winmostar チュートリアル

GAMESS

2量体計算(分散力補正)

V11.1.0

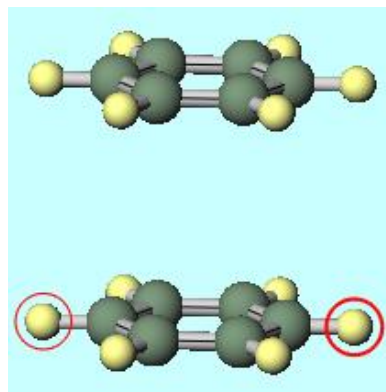
2022年4月22日 株式会社クロスアビリティ

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

- HF法や従来のDFT法(B3LYP、PBEなど)では、van der Waals力や π - π 相互作用などの分散力(いわゆる弱い相互作用)を取り扱うことはできません。分散力を適切に計算するためには、原子間の距離から分散力補正をする方法(B3LYP-D3など)、改良されたDFT汎関数(cam-B3LYP、M06系など)、高精度な2次の摂動(MP2)法などが必要となります。本チュートリアルでは、B3LYP-D3法によるベンゼン2量体の計算について説明します。



動作環境設定

- GAMESSの場合

GAMESSインストールマニュアル

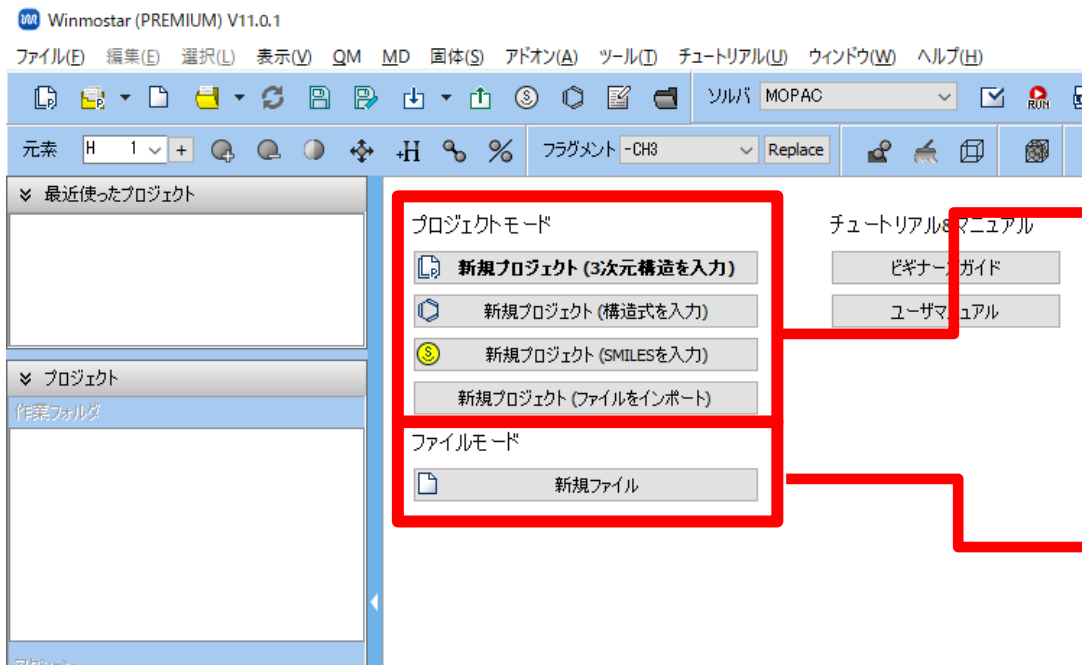
https://winmostar.com/jp/manual_jp/installation/GAMESS_install_manual_jp_win.pdfに従い、GAMESSをインストールしてください。

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

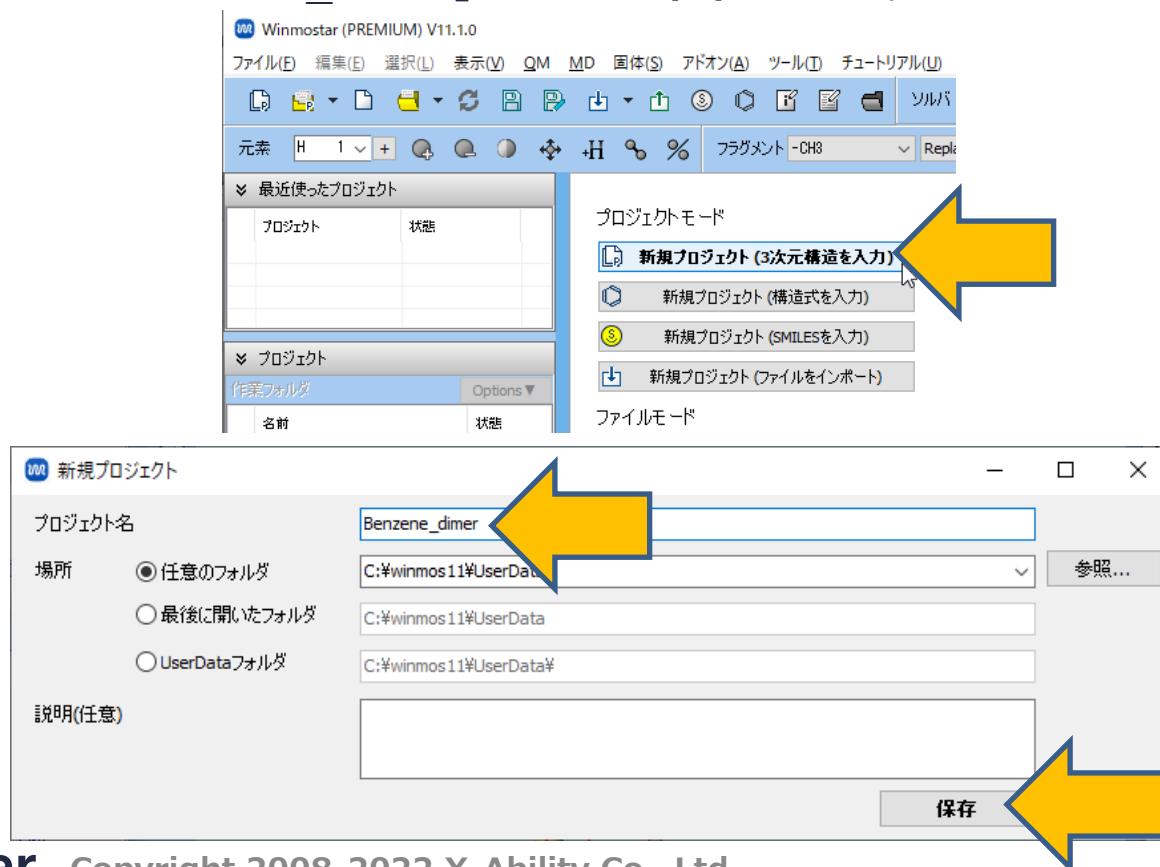
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はv10以前と一緒です。

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

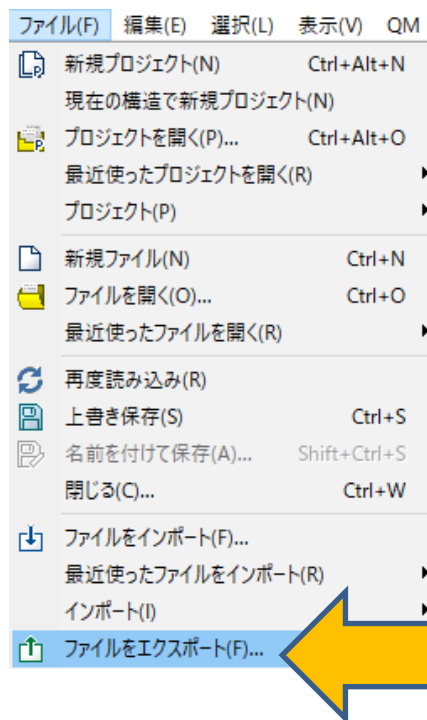
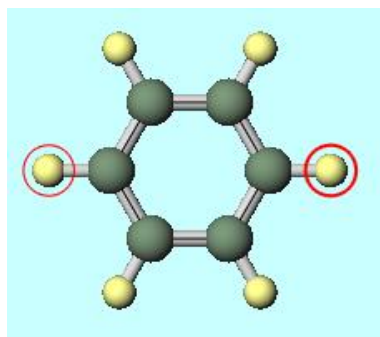
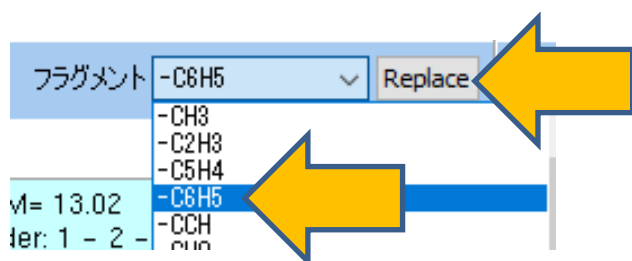
基本的な操作方法は[GAMESS基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

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「Benzene_dimer」と入力し**保存**をクリックします。




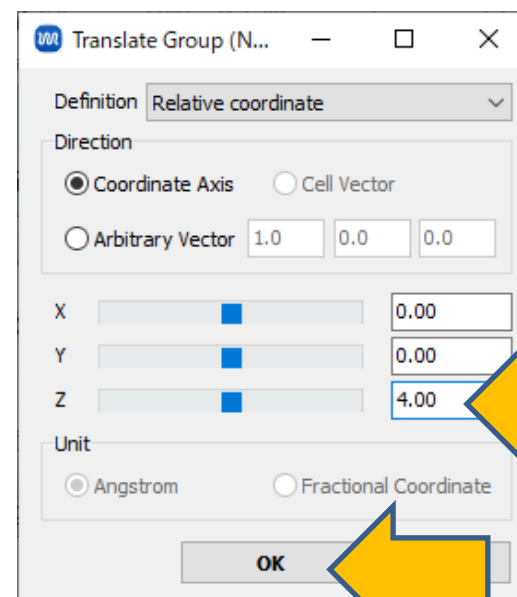
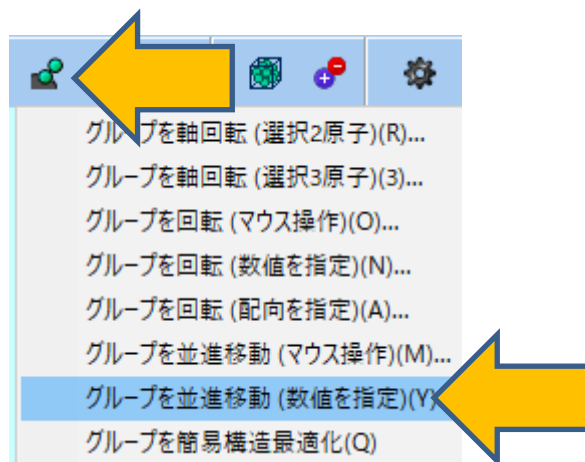
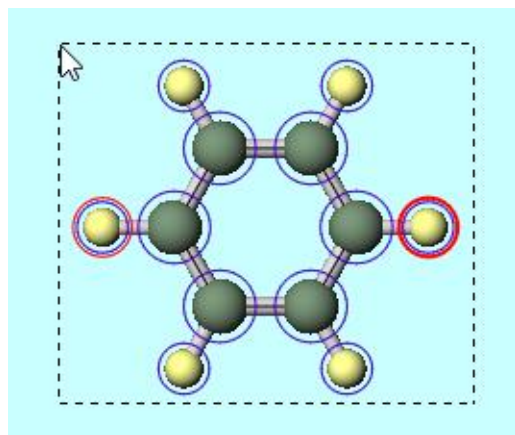
I. 系のモデリング

1. メインウィンドウ上部の**フラグメント**を選択から**-C6H5**を選択し、**Replace**ボタンを1回クリックして、ベンゼンを作成します。
2. **ファイル | ファイルをエクスポート**をクリックして、ファイル名を「benzene」として**保存**ボタンをクリックします。「正常にbenzene.wmmをエクスポートしました」と表示されたら、**OK**をクリックします。これで、このベンゼンの構造のファイルへの保存が完了しました。




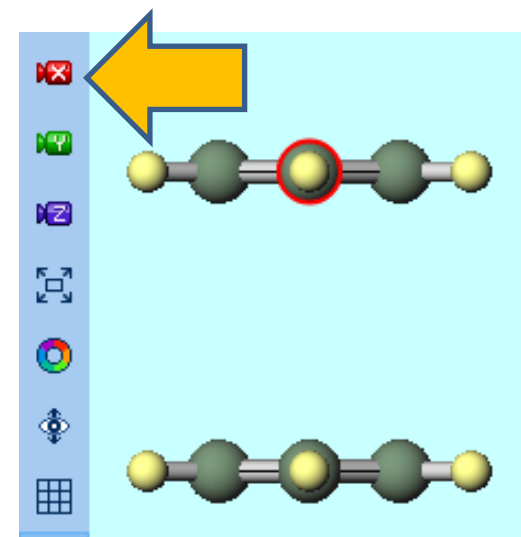
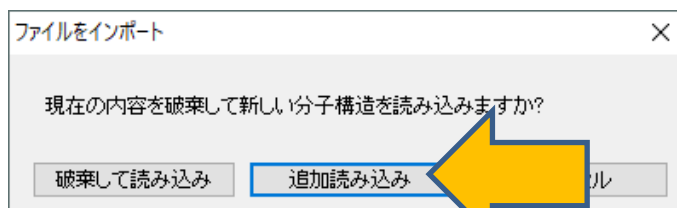
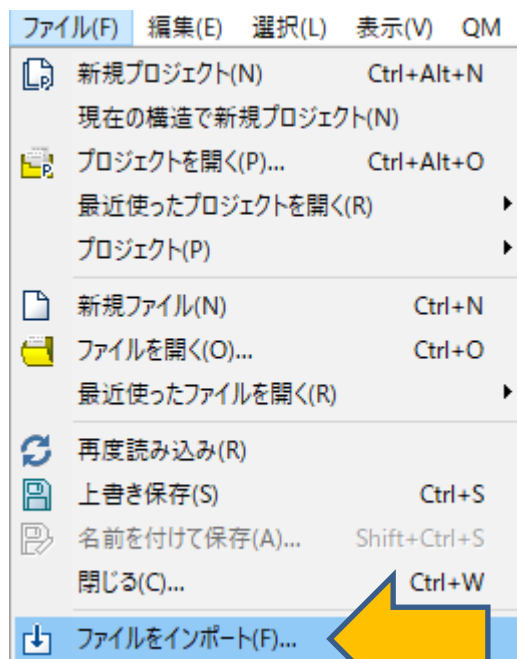
I. 系のモデリング

1. **Ctrl**を押しながらベンゼン全体をドラッグし、全原子をグループ選択します。
2.  (グループ編集) をクリックし、**グループを並進移動(数値を指定)**を選択します。
3. **Translate Group**ウィンドウで、**Z**の欄に**4.0**を入力して、**OK**をクリックします。



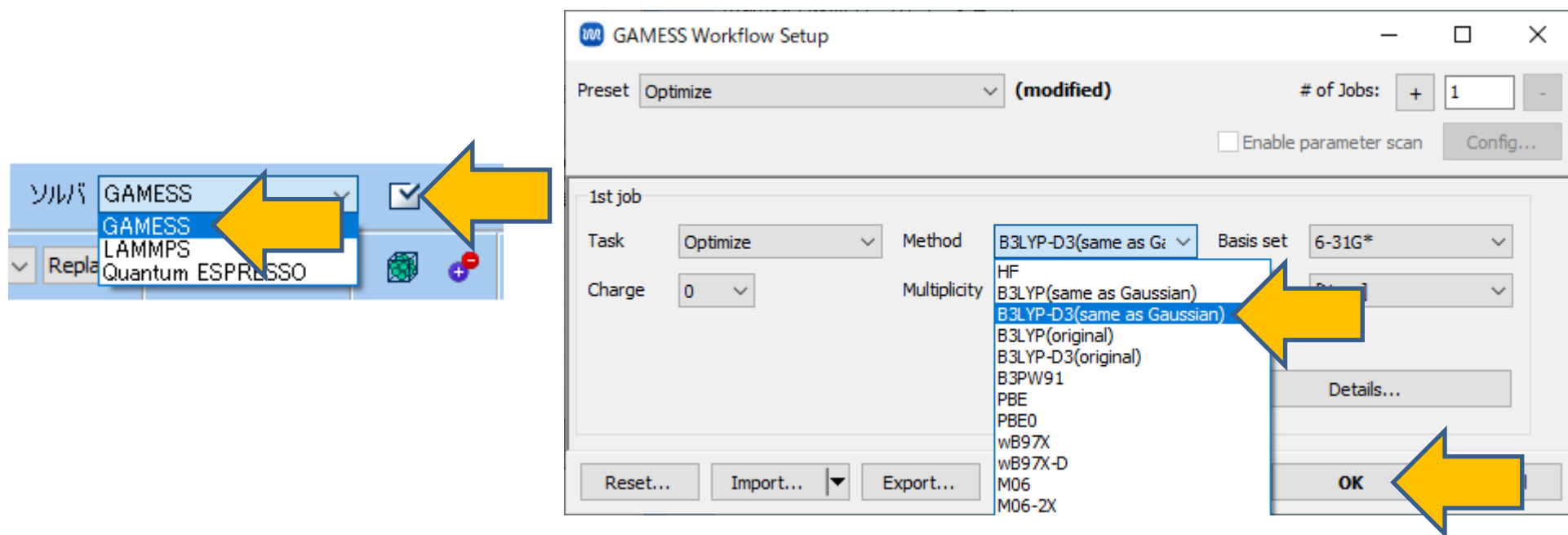
I. 系のモデリング

1. **ファイル | ファイルをエクスポート**をクリックして、ファイル名にp.7で保存した「benzene.wmm」を選択して、**開く**をクリックします。
2. 「現在の内容を破棄して新しい分子構造を読み込みますか」と表示されたら、**追加読み込み**をクリックします。
3.  (**X軸方向からの表示**) をクリックして、ベンゼン2量体が作成できていることを確認します。



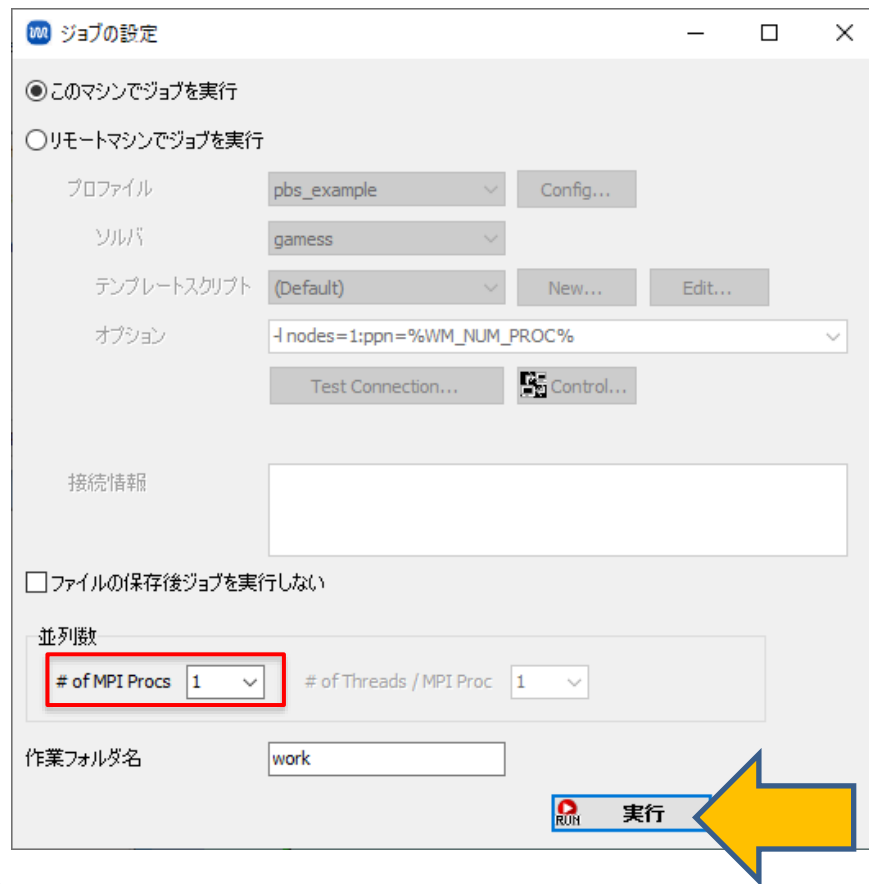
II. 計算の実行

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、**Method**を**B3LYP-D3(same as Gaussian)**に変更します。
3. **OK**ボタンをクリックします。
 - 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。




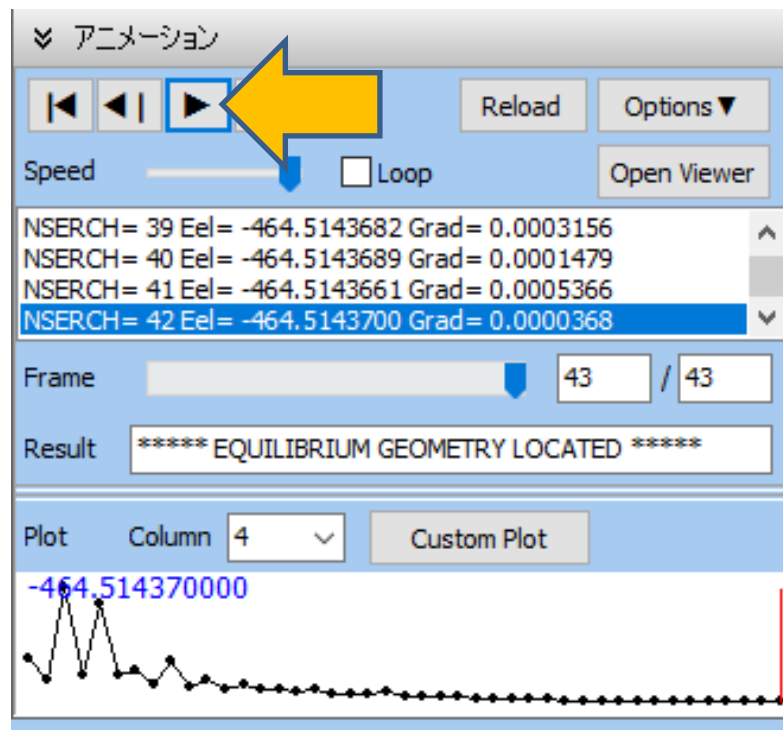
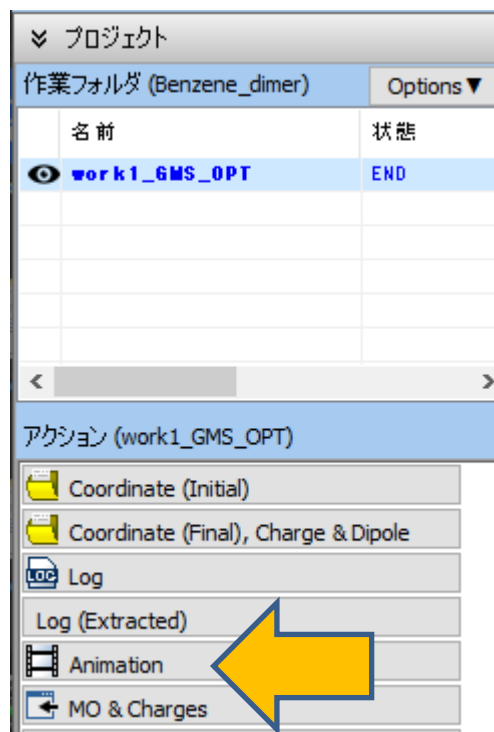
II. 計算の実行

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。




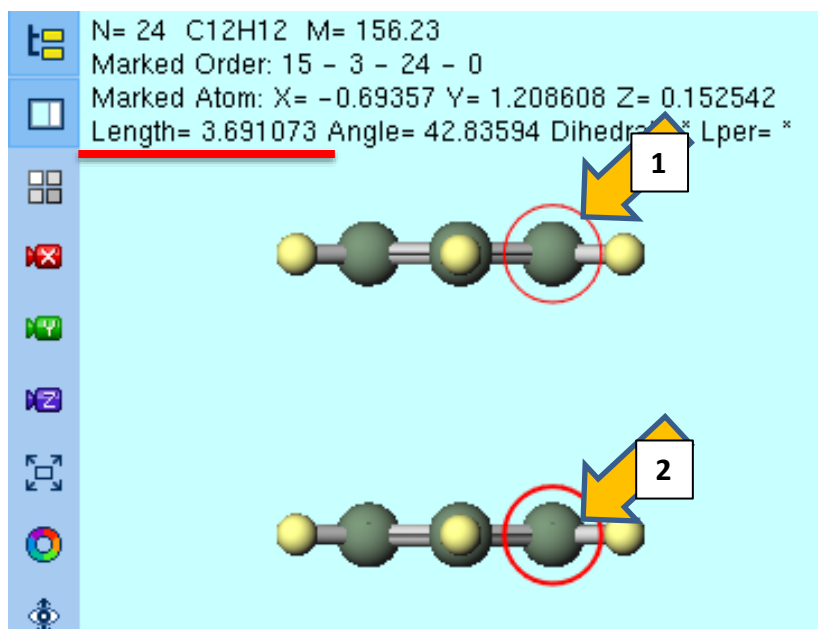
III. 計算解析

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**Animation**をクリックすると、アニメーションエリアに構造最適化計算の結果が表示されます。
2.  **(再生)** ボタンをクリックしてアニメーションを再生し、最後の最適化構造を表示します。



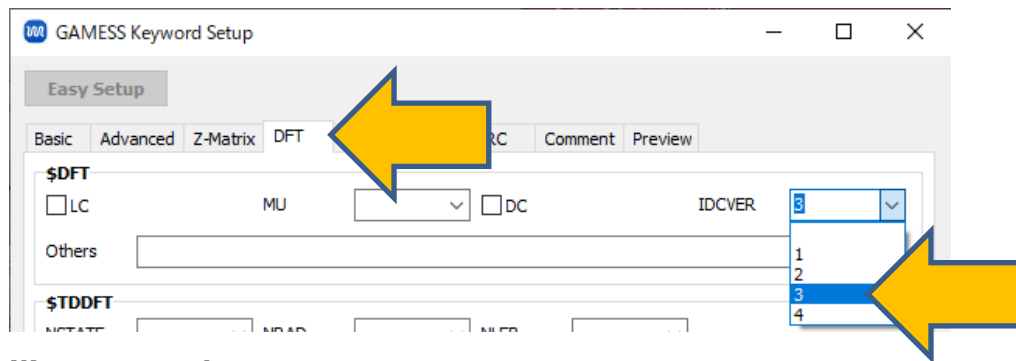
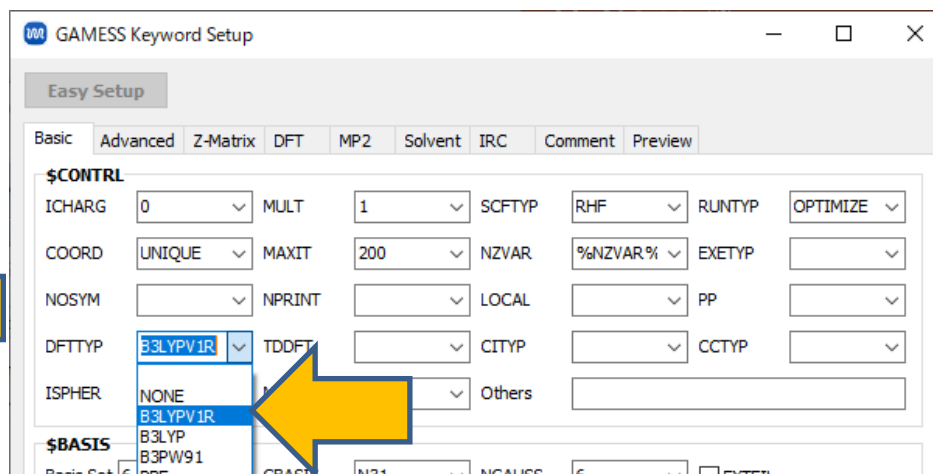
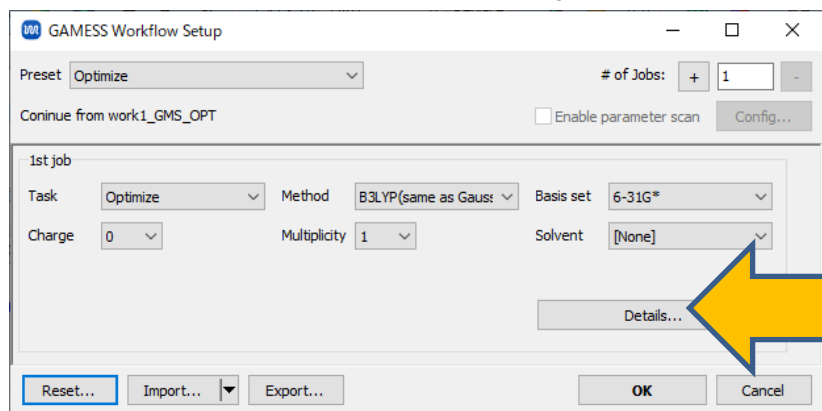
III. 計算解析

1.  (X軸からの表示) をクリックした後、ベンゼン環を上から見て重なる位置にある炭素原子2つを続けてクリックします。ベンゼン2量体の平面の距離となるLengthの値が3.7 Å程度であることを確認します。
- (比較) P.10のMethodを**B3LYP-D3**ではなく**B3LYP**で構造最適化計算を行った場合は、2つのベンゼンが離れるほど安定になり、6 Å程度でエネルギー変化がほとんど無くなり計算は終了します。



補足 その他の汎関数での-D3指定方法

1. GAMESS Workflow Setupウィンドウで、Detailsボタンをクリックします。
2. GAMESS Keyword Setupウィンドウで、\$CONTRL欄のDFTTYPを使用したい汎関数に変更します。
3. DFTタブをクリックし、\$DFT欄のIDCVERを3に変更します。



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