

 winmostar チュートリアル

**GAMESS**

**元素ごとの基底関数・ECP設定**

V11.4.9

2023年9月20日      株式会社クロスアビリティ

# 本書について

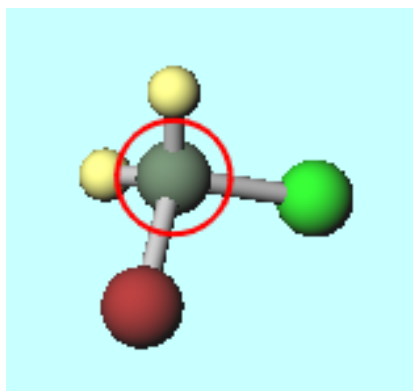
- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - [個別講習会](#)：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

ブロモクロロメタン( $\text{CH}_2\text{BrCl}$ )の元素ごとの基底関数の設定、基底関数及びECP（有効内殻ポテンシャル）の設定をします。

基底関数のみの設定      C,Cl,Br: 6-31G\*、H: STO-3G

基底関数及びECPの設定   C,H: 6-31G\*、Cl,Br: LANL2DZ(基底関数、ECP共に)



# 動作環境設定

- GAMESSの場合

GAMESSインストールマニュアル

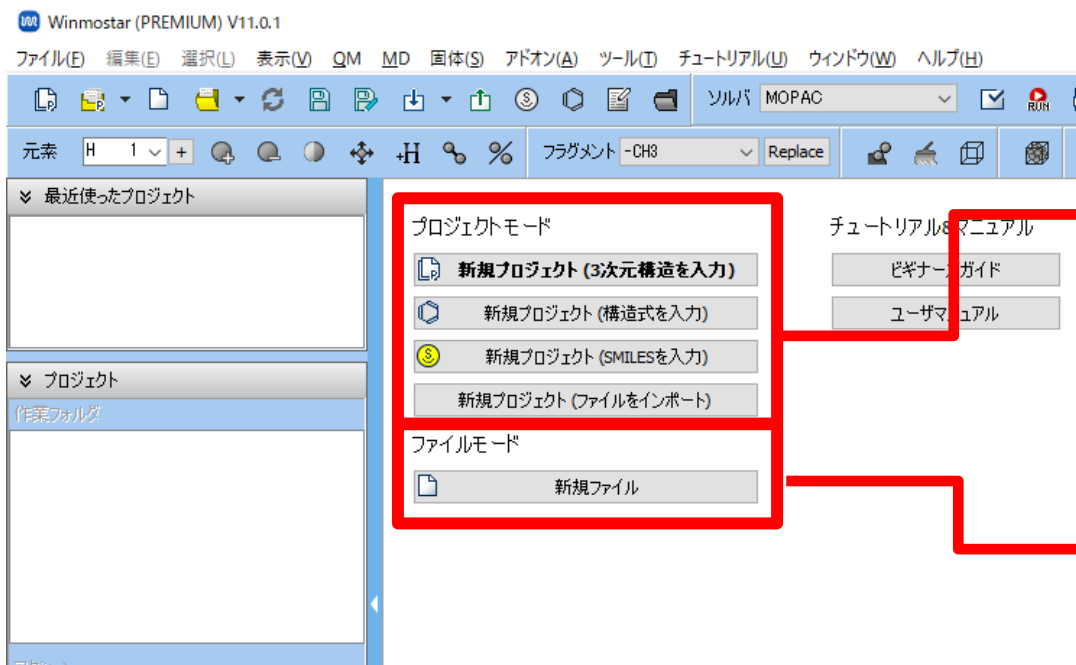
[https://winmostar.com/jp/manual\\_jp/installation/GAMESS\\_install\\_manual\\_jp\\_win.pdf](https://winmostar.com/jp/manual_jp/installation/GAMESS_install_manual_jp_win.pdf)に従い、GAMESSをインストールしてください。

# 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

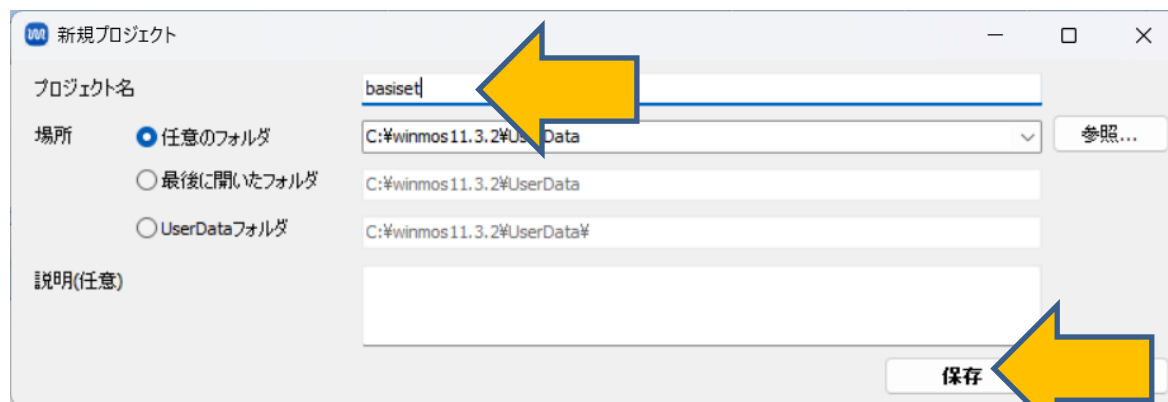
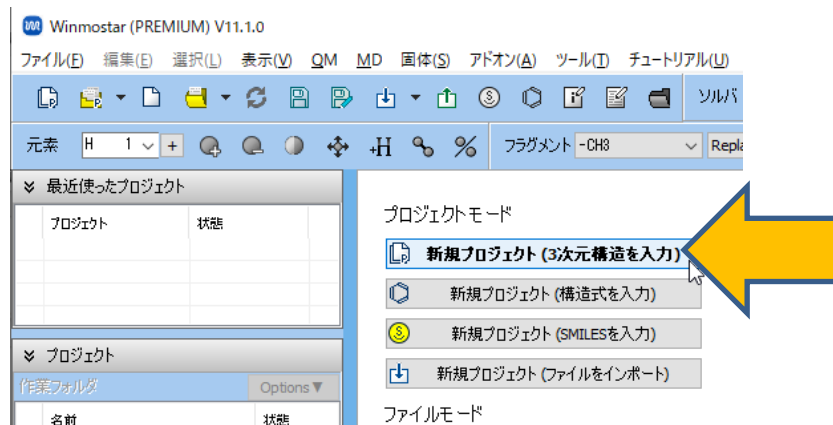
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

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

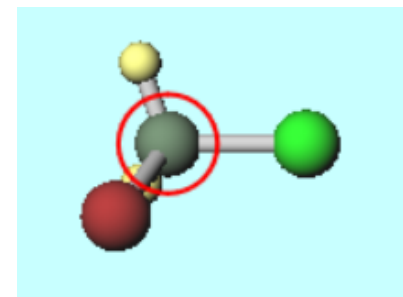
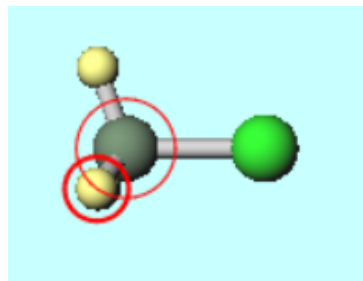
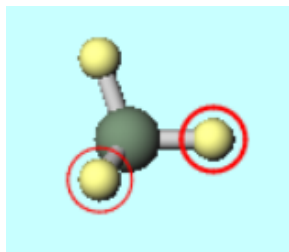
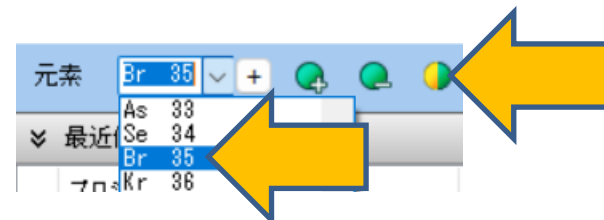
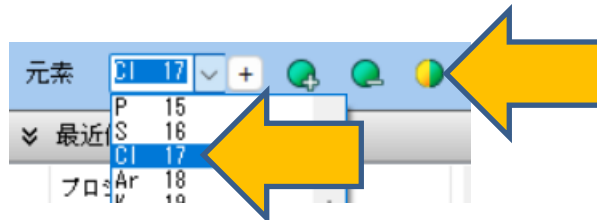
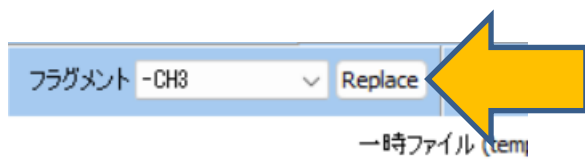
基本的な操作方法は[GAMESS基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

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「basiset」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が-CH<sub>3</sub>の状態で、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、メタンを作成します。
2. 水素原子が太い赤丸で選択された状態で、メインウィンドウ上部の**編集操作向けの元素を選択**メニューから**Cl 17**を選択し、**元素を変更**ボタンをクリックして、クロロメタンを作成します。
3. 別の水素原子が太い赤丸で選択された状態で、**編集操作向けの元素を選択**メニューから**Br 35**を選択し、**元素を変更**ボタンをクリックして、ブロモクロロメタンを作成します。



## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

Basis Set Exchangeウェブサイト(<https://www.basissetexchange.org/>)から、基底関数の数値を取得します。

1. 基底関数では6-31G\*を選択、元素ではC、Cl及びBrを選択、FormatではGAMESS USを選択して、Get Basis Setをクリックします。
2. 新たに表示されたウィンドウの基底関数の情報をメモに取ります。

The screenshot shows the Basis Set Exchange website interface. On the left, a list of basis sets is displayed, with 6-31G\* highlighted. In the center, the periodic table is shown with Carbon (C), Chlorine (Cl), and Bromine (Br) highlighted. On the right, the selected basis set information is displayed for Carbon, Chlorine, and Bromine. At the bottom, the Format is set to GAMESS US, and the Get Basis Set button is highlighted.

Left sidebar (Basis Set List):

- 6-311G
- 6-311G(d,p)
- 6-311G\*
- 6-311G\*\*
- 6-31G
- 6-31G(d,p)
- 6-31G\*
- 6-31G\*\*
- AHGBS-5
- AHGBS-7
- AHGBS-9
- AHGBSP1-5
- AHGBSP1-7
- AHGBSP1-9
- AHGBSP2-5
- AHGBSP2-7
- AHGBSP2-9
- AHGBSP3-5
- AHGBSP3-7
- AHGBSP3-9
- Ahlrichs pVDZ
- Ahlrichs TZV
- Ahlrichs VDZ

Periodic Table (Highlighted Elements):

- Carbon (C)
- Chlorine (Cl)
- Bromine (Br)

Right Panel (Basis Set Data):

CARBON

S	6		
1	0.3047524880E+04	0.1834737132E-02	
2	0.4573695180E+03	0.1403732281E-01	
3	0.1039486850E+03	0.688426226E-01	
4	0.2921015530E+02	0.2321844432E+00	
5	0.928662960E+01	0.4679413484E+00	
6	0.3163926960E+01	0.3623119853E+00	

L 3

1	0.7868272350E+01	-0.1193324198E+00	0.6899906659E-01
2	0.1881288540E+01	-0.1608541517E+00	0.3164239610E+00
3	0.5442492580E+00	0.1143456438E+01	0.7443082909E+00

L 1

1	0.1687144782E+00	0.1000000000E+01	0.1000000000E+01

D 1

1	0.8000000000E+00	1.00000000	

CHLORINE

S	6		
1	0.2518010000E+05	0.1832959848E-02	
2	0.3780350000E+04	0.1403419883E-01	
3	0.8604740000E+03	0.6909739426E-01	
4	0.2421450000E+03	0.2374519803E+00	
5	0.7733490000E+02	0.4830339599E+00	
6	0.2624700000E+02	0.3398559718E+00	

L 6

1	0.4917650000E+03	-0.2297391417E-02	0.3989400879E-02
2	0.1169840000E+03	-0.3071371894E-01	0.3031770668E-01
3	0.3741530000E+02	-0.1125280694E+00	0.1298800286E+00
4	0.1378340000E+02	0.4501632776E-01	0.3279510723E+00
5	0.5452150000E+01	0.5893533634E+00	0.4535271000E+00
6	0.2225880000E+01	0.4652062868E+00	0.2521540556E+00

L 3

1	0.3186490000E+01	-0.2518280280E+00	-0.1429931472E-01

Download basis set

Format: GAMESS US

Get Basis Set



## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

1. 基底関数/ECPではSTO-3Gを選択、元素ではHを選択、FormatではGAMESS USを選択して、Get Basis Setをクリックします。
2. 新たに表示されたウィンドウの基底関数の情報をメモに取ります。

Scaled MINI  
sigmaDZHF  
sigmaSZHF  
sigmaTZHF  
STO-2G  
**STO-3G**  
STO-4G  
STO-5G  
STO-6G  
SV (Dunning-Hay)  
SVP (Dunning-Hay)  
SVP + Diffuse (Dunning-Hay)  
TZ (Dunning-Hay)  
TZP-ZORA  
UGBS  
un-ccemd-ref  
un-pcemd-ref  
x2c-JFIT  
x2c-JFIT-universal  
x2c-QZVPall  
x2c-QZVPall-2c  
x2c-QZVPall-2c-s  
x2c-QZVPall-s  
x2c-QZVPall-11

search basis sets...

References for selected basis  
Plain Text **Get References**

Download basis set  
Format **GAMESS US** **Get Basis Set**

Periodic table showing element H (Hydrogen) selected.

```
$DATA
HYDROGEN
S 3
1 0.3425250914E+01 0.1543289673E+00
2 0.6239137298E+00 0.5353281423E+00
3 0.1688554040E+00 0.4446345422E+00
$END
```

## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

Basis Set Exchangeウェブサイトで得られたデータを入力形式に合うように全ての元素の基底関数について修正します。ここでは炭素のデータ(CARBONから空行まで)を例に説明します。

1. 元素名のCARBONを「 \$C」と変更します。冒頭に空白を一つ必ず入れてください。\$の後の文字が各元素の基底関数のキーワードで、キーワード名は任意です。本チュートリアルでは文字数を少なくするため、元素記号をキーワードとしました。
2. 最後の空行の後(空行は残してください)に「 \$END」を追加してください。同様に冒頭に空白を一つ必ず入れてください。なお、GAMESSの入力に太文字小文字の区別はありません。

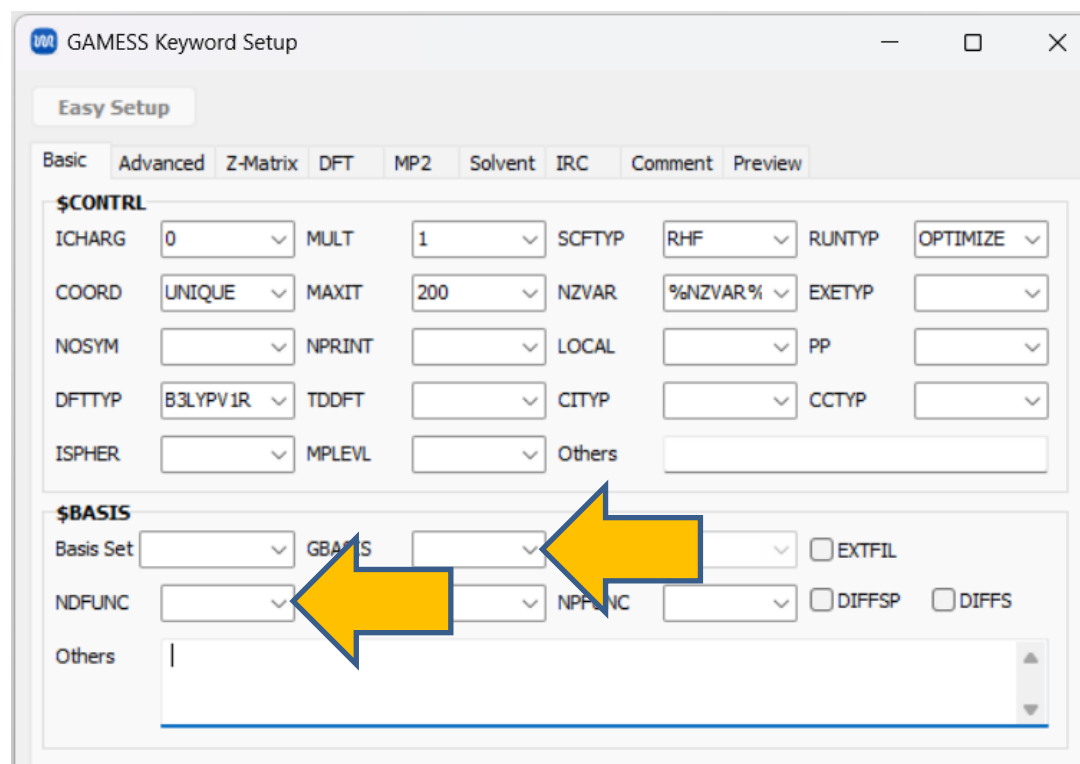
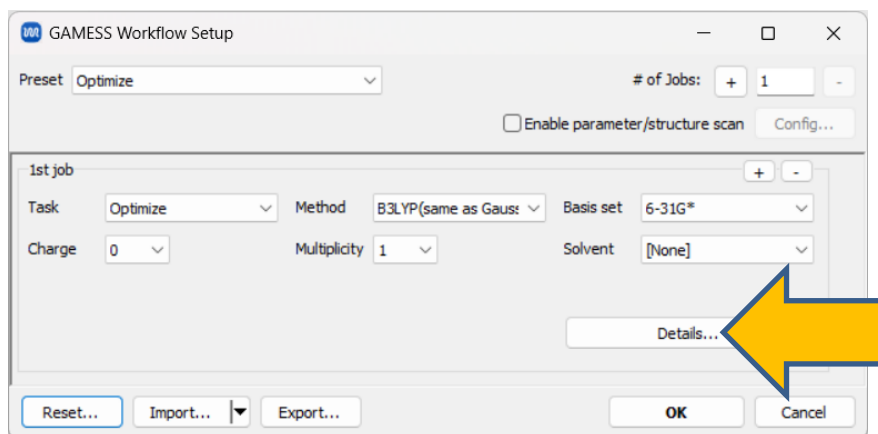
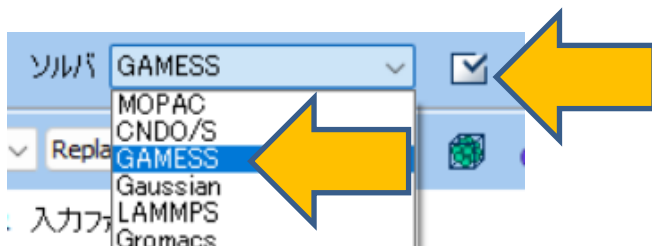
```
CARBON
S 6
1 0.3047524880E+04 0.1834737132E-02
2 0.4573695180E+03 0.1403732281E-01
3 0.1039486850E+03 0.6884262226E-01
4 0.2921015530E+02 0.2321844432E+00
5 0.9286662960E+01 0.4679413484E+00
6 0.3163926960E+01 0.3623119853E+00
L 3
1 0.7868272350E+01 -0.1193324198E+00 0.6899906659E-01
2 0.1881288540E+01 -0.1608541517E+00 0.3164239610E+00
3 0.5442492580E+00 0.1143456438E+01 0.7443082909E+00
L 1
1 0.1687144782E+00 0.1000000000E+01 0.1000000000E+01
D 1
1 0.8000000000E+00 1.00000000
```

```
 $C
S 6
1 0.3047524880E+04 0.1834737132E-02
2 0.4573695180E+03 0.1403732281E-01
3 0.1039486850E+03 0.6884262226E-01
4 0.2921015530E+02 0.2321844432E+00
5 0.9286662960E+01 0.4679413484E+00
6 0.3163926960E+01 0.3623119853E+00
L 3
1 0.7868272350E+01 -0.1193324198E+00 0.6899906659E-01
2 0.1881288540E+01 -0.1608541517E+00 0.3164239610E+00
3 0.5442492580E+00 0.1143456438E+01 0.7443082909E+00
L 1
1 0.1687144782E+00 0.1000000000E+01 0.1000000000E+01
D 1
1 0.8000000000E+00 1.00000000

$END
```

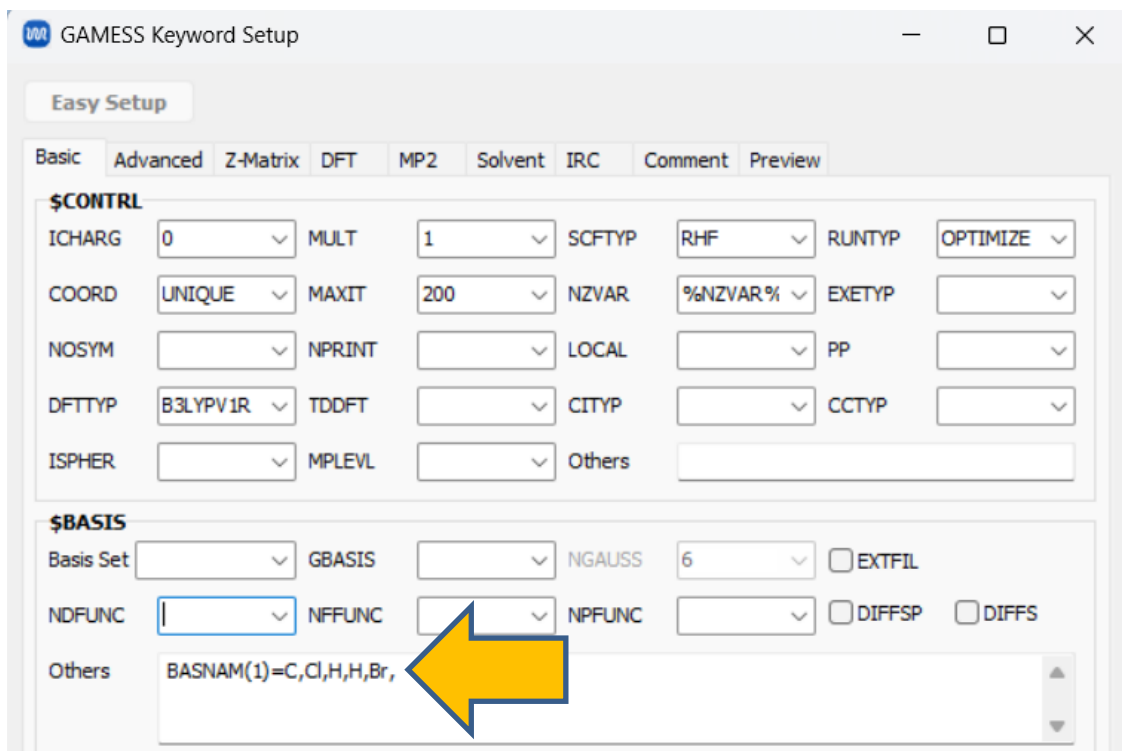
## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

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。
3. **GAMESS Keyword Setup**ウィンドウで、**\$BASIS**欄の**GBASIS**と**NDFUNC**を空欄にします。



## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

1. **\$BASIS**欄の**Others**に「BASNAM(1)=C,Cl,H,H,Br,」を記入します。BASNAM(1)=の後には、1番目の原子から順にp.10で決めた基底関数のキーワードを記入します。GAMESSの仕様で、計算条件指定行は1行あたり80文字までしか読み込まれないため、本チュートリアルでは文字数の少ない元素記号をキーワードにしています。分子サイズが大きく80文字を超える場合は、複数行に分けて記入してください。原子の並びはメインウィンドウ右の座標表示エリアで確認してください。



GAMESS Keyword Setup

Easy Setup

Basic Advanced Z-Matrix DFT MP2 Solvent IRC Comment Preview

**\$CONTROL**

ICHARG 0 MULT 1 SCFTYP RHF RUNTYP OPTIMIZE

COORD UNIQUE MAXIT 200 NZVAR %NZVAR% EXETYP

NOSYM NPRINT LOCAL PP

DFTTYP B3LYPV1R TDDFT CITYPP CCTYP

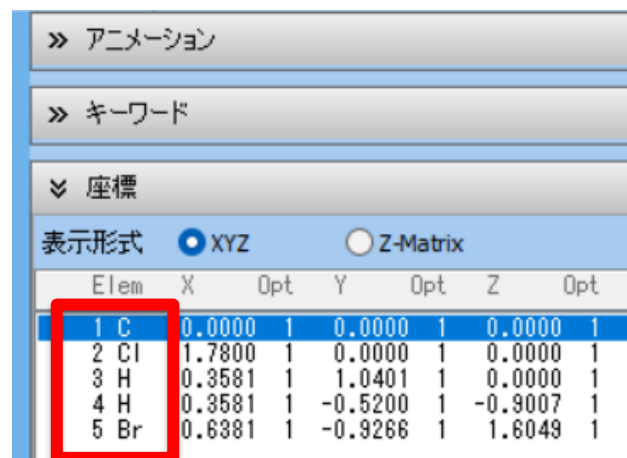
ISPHER MPEVL Others

**\$BASIS**

Basis Set GBASIS NGAUSS 6 EXTFIL

NDFUNC NFFUNC NPFUNC DIFFSP DIFFS

Others BASNAM(1)=C,Cl,H,H,Br,



» アニメーション

» キーワード

座標

表示形式 ☒ XYZ ☐ Z-Matrix

Elem	X	Opt	Y	Opt	Z	Opt
1 C	0.0000	1	0.0000	1	0.0000	1
2 Cl	1.7800	1	0.0000	1	0.0000	1
3 H	0.3581	1	1.0401	1	0.0000	1
4 H	0.3581	1	-0.5200	1	-0.9007	1
5 Br	0.6381	1	-0.9266	1	1.6049	1

## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

1. GAMESS Keyword Setupウィンドウ下のOthers欄の5行目\$ENDの下に、p.10で修正した各元素の基底関数の情報を追記します。

The screenshot shows the GAMESS Keyword Setup window. The 'Others' section is highlighted with a red bracket and a yellow arrow pointing to the input area below the \$END keyword. The input area contains the following text:

```
$DATA
%WM_SAMPLE%
%WM_POINTGROUP%
%WM_XYZ%
$END
$H
S 3
1 0.3425250914E+01 0.1543289673E+00
2 0.6239137298E+00 0.5353281423E+00
3 0.1688554040E+00 0.4446345422E+00
$END
$C
S 6
1 0.3047524880E+04 0.1834737132E-02
2 0.4573695180E+03 0.1403732281E-01
3 0.1039486850E+03 0.6884262226E-01
4 0.2921015530E+02 0.2321844432E+00
```

The window also shows buttons for 'Import \$HESS', 'Import \$VEC', 'Reset...', 'Import...', 'Export...', 'OK', 'Cancel', and 'Run'.

## II. 計算の実行（基底関数のみの設定）

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**実行**ボタンをクリックして、計算を開始します。

# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

Basis Set Exchangeウェブサイト(<https://www.basissetexchange.org/>)から、基底関数及びECPの数値を取得します。

1. 基底関数では6-31G\*を選択、元素ではC及びHを選択、FormatではGAMESS USを選択して、Get Basis Setをクリックします。
2. 新たに表示されたウィンドウの基底関数の情報をメモに取ります。

6-311G\*\*  
6-311G\*\*-RIFIT  
6-311xxG(d,p)  
6-31G  
6-31G(2df,p)  
6-31G(3df,3pd)  
6-31G(d,p)  
6-31G-J  
**6-31G\***  
6-31G\*\*  
6-31G\*\*-RIFIT  
6ZaPa-NR  
7ZaPa-NR  
admm-1  
admm-2  
admm-3  
AHGBS-5  
AHGBS-7  
AHGBS-9  
AHGBSP1-5  
AHGBSP1-7  
AHGBSP1-9  
AHGBSP2-5  
AHGBSP2-7

search basis sets...

References for selected basis

A periodic table of elements. A yellow arrow points to Hydrogen (H) in the top-left corner. Another yellow arrow points to Carbon (C) in the second row, fourth column.

Download basis set

Format GAMESS US

Get Basis Set

HYDROGEN


```
S 3
1 0.1873113696E+02 0.3349460434E-01
2 0.2825394365E+01 0.2347269535E+00
3 0.6401216923E+00 0.8137573261E+00
S 1
1 0.1612777588E+00 1.0000000
```

CARBON

```
S 6
1 0.3047524880E+04 0.1834737132E-02
2 0.4573695180E+03 0.1403732281E-01
3 0.1039486850E+03 0.6884262226E-01
4 0.2921015530E+02 0.2321844432E+00
5 0.9286662960E+01 0.4679413484E+00
6 0.3163926960E+01 0.3623119853E+00
L 3
1 0.7868272350E+01 -0.1193324198E+00 0.6899906659E-01
2 0.1881288540E+01 -0.1608541517E+00 0.3164239610E+00
3 0.5442492580E+00 0.1143456438E+01 0.7443082909E+00
L 1
1 0.1687144782E+00 0.1000000000E+01 0.1000000000E+01
D 1
1 0.8000000000E+00 1.0000000
```

# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

1. 基底関数/ECPではLANL2DZを選択、元素ではCl及びBrを選択、FormatではGAMESS USを選択して、Get Basis Setをクリックします。
2. 新たに表示されたウィンドウの基底関数及びECPの情報をメモに取ります。



Left Panel (Basis Set List):

- jorge-TZP-DKH
- Koga unpolarized
- LANL08
- LANL08(d)
- LANL2DZ**
- LANL2DZ ECP
- LANL2DZdp
- MIDI!
- MIDIX
- NMR-DKH (TZ2P)
- Partridge Uncontracted 1
- Partridge Uncontracted 2
- pc-0
- pc-1
- pc-2
- pc-3
- pc-4
- pcseg-0
- pcseg-1
- pcseg-2
- pcseg-3
- pcseg-4
- pcSseg-0
- pcSseg-1

Center Panel (Periodic Table):

Highlighted elements: Cl (17), Br (35).

Bottom Panel (Format Selection):

Format: **GAMESS US** [Get Basis Set]

Right Panel (Output):

```
CHLORINE
S 2
1 2.2310000 -0.4900589
2 0.4720000 1.2542684
S 1
1 0.1631000 1.0000000
P 2
1 6.2960000 -0.0635641
2 0.6333000 1.0141355
P 1
1 0.1819000 1.0000000

BROMINE
S 2
1 1.1590000 -3.0378769
2 0.7107000 3.3703735
S 1
1 0.1905000 1.0000000
P 2
1 2.6910000 -0.1189800
2 0.4446000 1.0424471
P 1
1 0.1377000 1.0000000

$END

$ECP
CL-ECP GEN 10 2
5 ----- d-ul potential -----
-10.0000000 1 94.8130000
66.2729170 2 165.6440000
-28.9685950 2 30.8317000
-12.8663370 2 10.5841000
-1.7102170 2 3.7704000
```



# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）


Basis Set Exchangeウェブサイトで得られたデータを入力形式に合うように全ての元素の基底関数について修正します。ここでは塩素のデータ(CHLORINEから空行まで)を例に説明します。

1. 元素名のCHLORINEを「 \$Cl」と変更します。冒頭に空白を一つ必ず入れてください。\$の後の文字が各元素の基底関数のキーワードで、キーワード名は任意です。本チュートリアルでは文字数を少なくするため、元素記号をキーワードとしました。
2. 最後の空行の後(空行は残してください)に「 \$END」を追加してください。同様に冒頭に空白を一つ必ず入れてください。なお、GAMESSの入力に太文字小文字の区別はありません。

```
CHLORINE
S 2
1 2.2310000 -0.4900589
2 0.4720000 1.2542684
S 1
1 0.1631000 1.0000000
P 2
1 6.2960000 -0.0635641
2 0.6333000 1.0141355
P 1
1 0.1819000 1.0000000
```

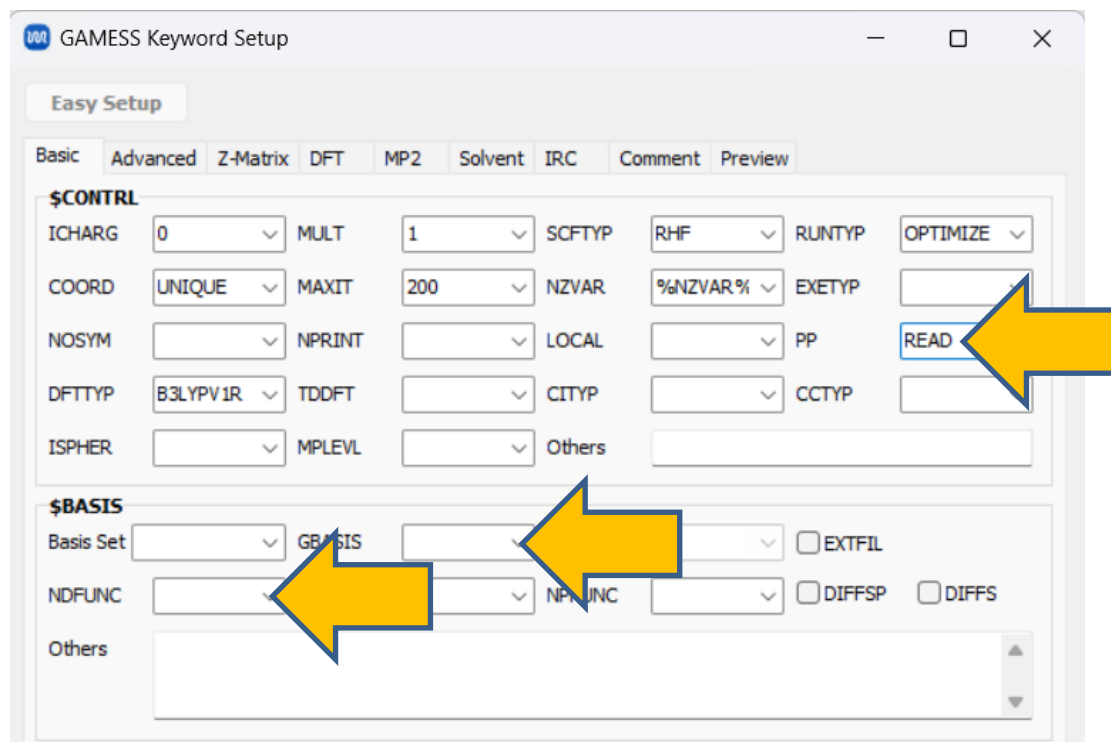
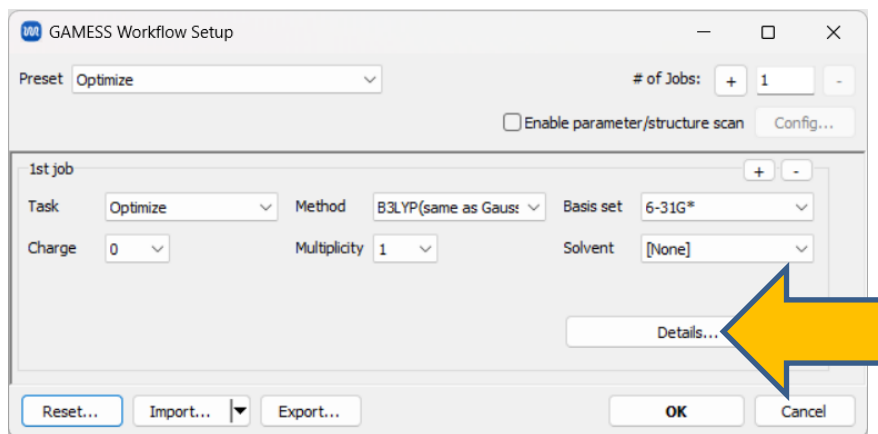
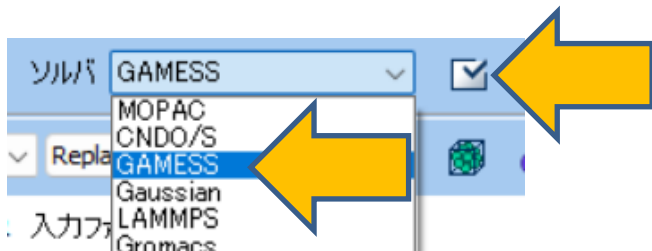
```
$Cl
S 2
1 2.2310000 -0.4900589
2 0.4720000 1.2542684
S 1
1 0.1631000 1.0000000
P 2
1 6.2960000 -0.0635641
2 0.6333000 1.0141355
P 1
1 0.1819000 1.0000000

$END
```



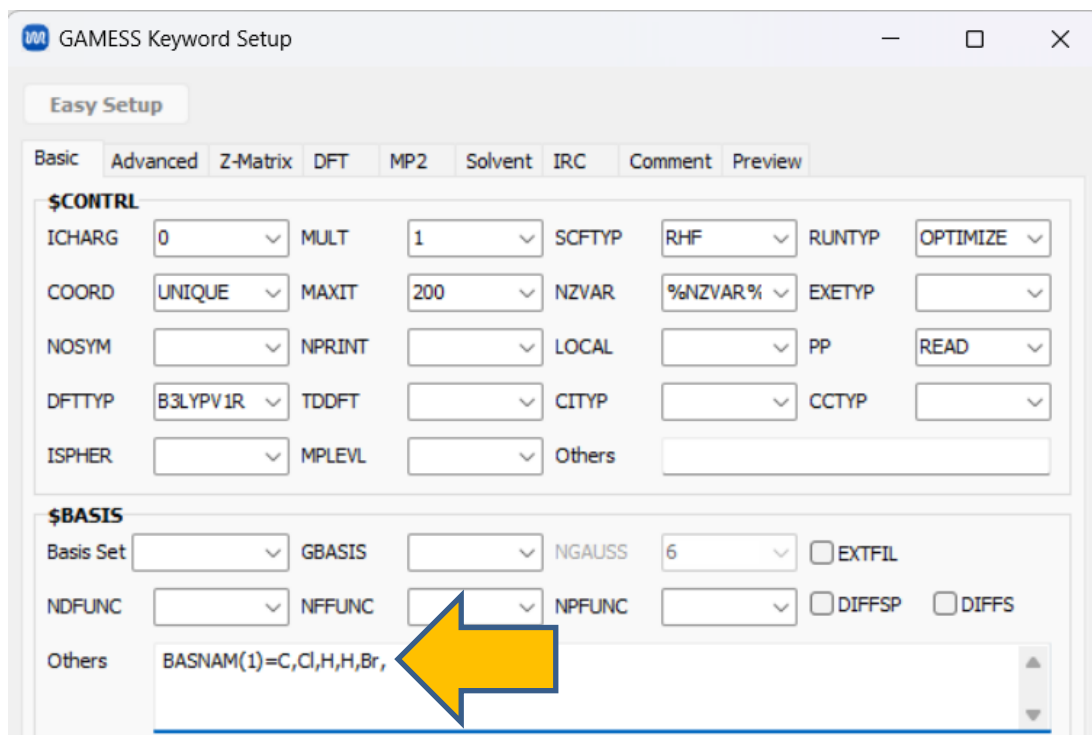
# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

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。
3. **GAMESS Keyword Setup**ウィンドウで、**\$CONTROL**欄の**PP**を**READ**に変更して、**Basis Set**、**\$BASIS**欄の**GBASIS**と**NDFUNC**を空欄にします。



# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

1. **\$BASIS欄のOthers**に「BASNAM(1)=C,Cl,H,H,Br,」を記入します。BASNAM(1)=の後には、1番目の原子から順にp.17で決めた基底関数のキーワードを記入します。GAMESSの仕様で、計算条件指定行は1行あたり80文字までしか読み込まれないため、本チュートリアルでは文字数の少ない元素記号をキーワードにしています。分子サイズが大きく80文字を超えてしまう場合は、複数行に分けて記入してください。原子の並びはメインウィンドウ右の座標表示エリアで確認してください。



GAMESS Keyword Setup

Easy Setup

Basic Advanced Z-Matrix DFT MP2 Solvent IRC Comment Preview

**\$CONTRL**

ICHARG 0 MULT 1 SCFTYP RHF RUNTYP OPTIMIZE

COORD UNIQUE MAXIT 200 NZVAR %NZVAR% EXETYP

NOSYM NPRINT LOCAL PP READ

DFTTYP B3LYPV1R TDDFT CITYPP CCTYP

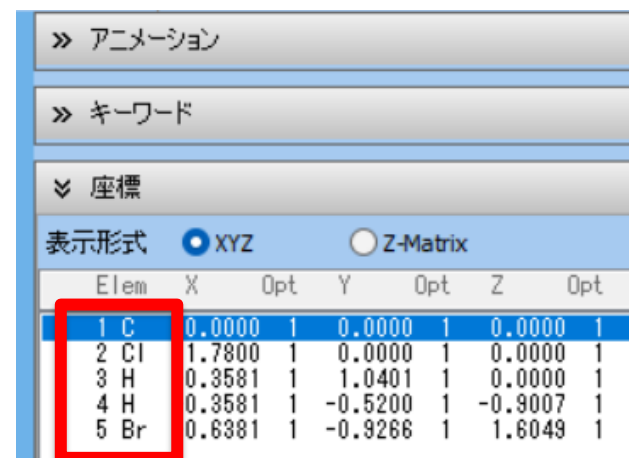
ISPHER MPLEVL Others

**\$BASIS**

Basis Set GBASIS NGAUSS 6 EXTFIL

NDFUNC NFFUNC NPFUNC DIFFSP DIFFS

Others BASNAM(1)=C,Cl,H,H,Br,



アニメーション

キーワード

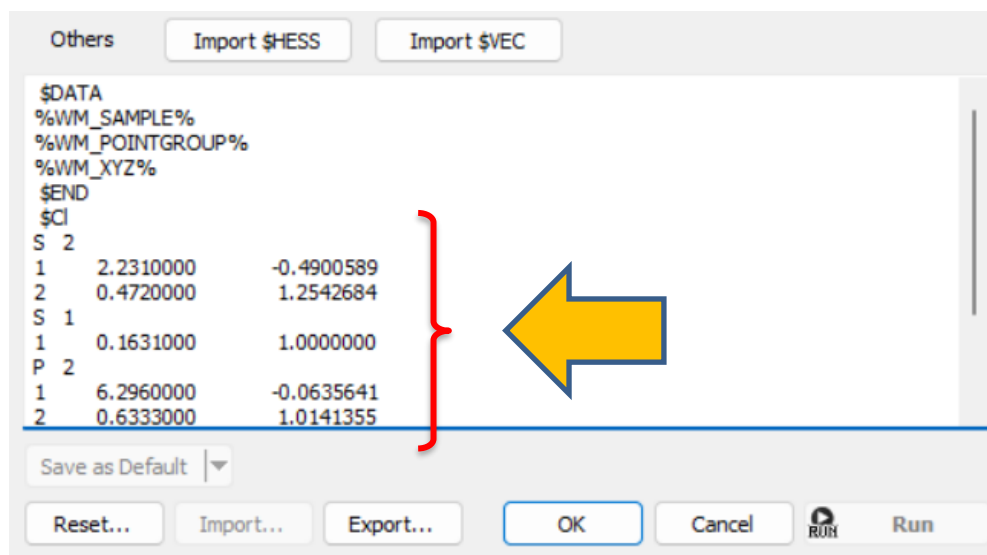
座標

表示形式 ☒ XYZ ☐ Z-Matrix

Elem	X	Opt	Y	Opt	Z	Opt
1 C	0.0000	1	0.0000	1	0.0000	1
2 Cl	1.7800	1	0.0000	1	0.0000	1
3 H	0.3581	1	1.0401	1	0.0000	1
4 H	0.3581	1	-0.5200	1	-0.9007	1
5 Br	0.6381	1	-0.9266	1	1.6049	1

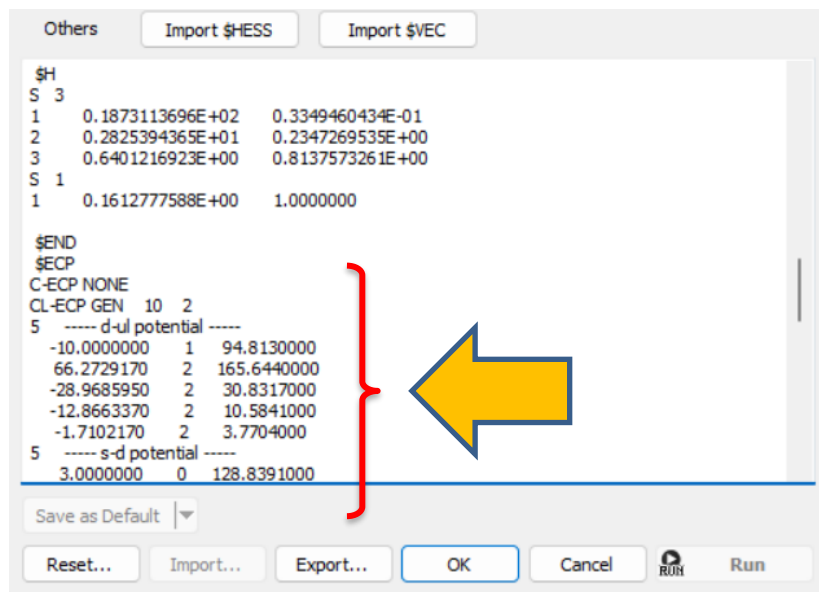
# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

1. GAMESS Keyword Setupウィンドウ下のOthers欄の5行目\$ENDの下に、p.17で修正した各元素の基底関数の情報を追記します。



# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

1. 続いて全原子のECPの情報を**Others**欄の基底関数のデータの後に追記します。1行目は「\$ECP」（冒頭に空白を一つ）、2行目以降に全ての原子についてデータを1行ずつ記入します。ECPを使わない原子は「元素名-ECP NONE」（例えば炭素は「C-ECP NONE」）の1行のみを、ECPを使う原子はp.16で取得したデータを記入します。各原子のデータ間には空行は入れずに、最後に「\$END」（冒頭に空白を一つ）を記入します。



```
$ECP
C-ECP NONE
CL-ECP GEN 10 2
5 ----- d-ul potential -----
-10.0000000 1 94.8130000
66.2729170 2 165.6440000
-28.9685950 2 30.8317000
-12.8663370 2 10.5841000
-1.7102170 2 3.7704000
5 ----- s-d potential -----
3.0000000 0 128.8391000
12.8528510 1 120.3786000
275.6723980 2 63.5622000
115.6777120 2 18.0695000
35.0606090 2 3.8142000
6 ----- p-d potential -----
5.0000000 0 216.5263000
7.4794860 1 46.5723000
613.0320000 2 147.4685000
280.8006850 2 48.9869000
107.8788240 2 13.2096000
15.3439560 2 3.1831000
H-ECP NONE
H-ECP NONE
```

```
BR-ECP GEN 28 3
4 ----- f-ul potential -----
-28.0000000 1 213.6143969
-134.9268852 2 41.0585380
-41.9271913 2 8.7086530
-5.9336420 2 2.6074661
4 ----- s-f potential -----
3.0000000 0 54.1980682
27.3430642 1 32.9053558
118.8028847 2 13.6744890
43.4354876 2 3.0341152
5 ----- p-f potential -----
5.0000000 0 54.2563340
25.0504252 1 26.0095593
92.6157463 2 28.2012995
95.8249016 2 9.4341061
26.2684983 2 2.5321764
5 ----- d-f potential -----
3.0000000 0 87.6328721
22.5533557 1 61.7373377
178.1241988 2 32.4385104
76.9924162 2 8.7537199
9.4818270 2 1.6633189
$END
```

# III.計算の実行（基底関数及びECPの設定）

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**実行**ボタンをクリックして、計算を開始します。

# 補足

1. ECPを使う同じ元素の原子が複数ある場合、ECPのデータを書くのは1つ目の原子のみで2つ目以降は「元素名-ECP」のみ記入します。例えば、 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ （2番目と5番目がClでLANL2DZ利用）の場合は次の通りになります。

```
$ECP
C-ECP NONE
CL-ECP GEN 10 2
5 ----- d-ul potential -----
-10.0000000 1 94.8130000
66.2729170 2 165.6440000
-28.9685950 2 30.8317000
-12.8663370 2 10.5841000
-1.7102170 2 3.7704000
5 ----- s-d potential -----
3.0000000 0 128.8391000
12.8528510 1 120.3786000
275.6723980 2 63.5622000
115.6777120 2 18.0695000
35.0606090 2 3.8142000
6 ----- p-d potential -----
5.0000000 0 216.5263000
7.4794860 1 46.5723000
613.0320000 2 147.4685000
280.8006850 2 48.9869000
107.8788240 2 13.2096000
15.3439560 2 3.1831000
H-ECP NONE
H-ECP NONE
CL-ECP
$END
```

# 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