

 winmostar チュートリアル

Gaussian

基礎編

V11.9.5

2024年12月10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

- 気相中の孤立したプロピレン分子の分子軌道、静電ポテンシャル、振動スペクトル（IR（+ラマン））及びGibbs自由エネルギー、UV-Visスペクトル、NMRスペクトルをGaussianによる量子化学計算（B3LYP/6-31G*）から取得します。

手順の概要：

I. 系のモデリング

II. 計算の実行

構造最適化+振動計算→TDDFT計算
→NMR計算

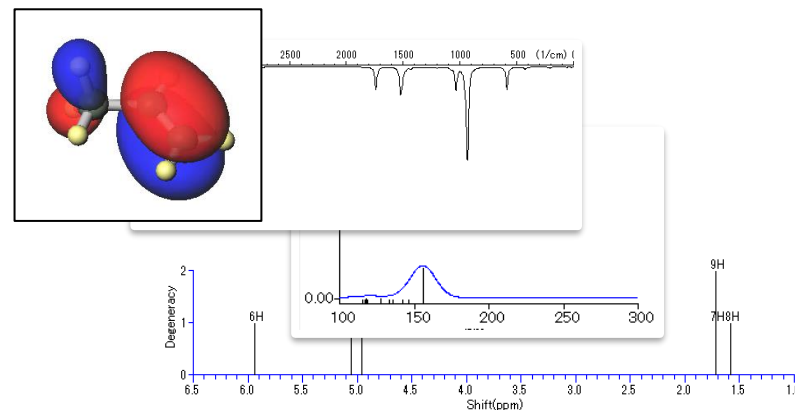
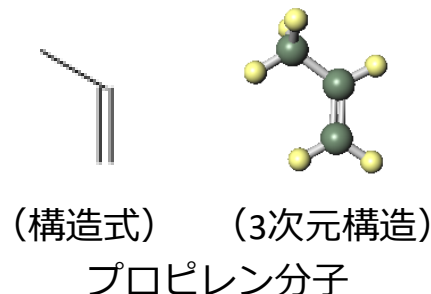
※TDDFT計算はUV-Visの表示に必要

III. 結果解析

分子軌道、静電ポテンシャル、
IR(+ラマン)、自由エネルギー、
UV-Vis、NMR化学シフト

注意点：

- ESPの表示には時間が掛かるため、ここでは静電ポテンシャルとして、簡易的に得られる電荷解析(ラベル/電荷で指定していなければMulliken電荷)の結果を基にしたポテンシャル分布を表示します。



動作環境設定

- Gaussianの場合

Gaussianインストールマニュアル

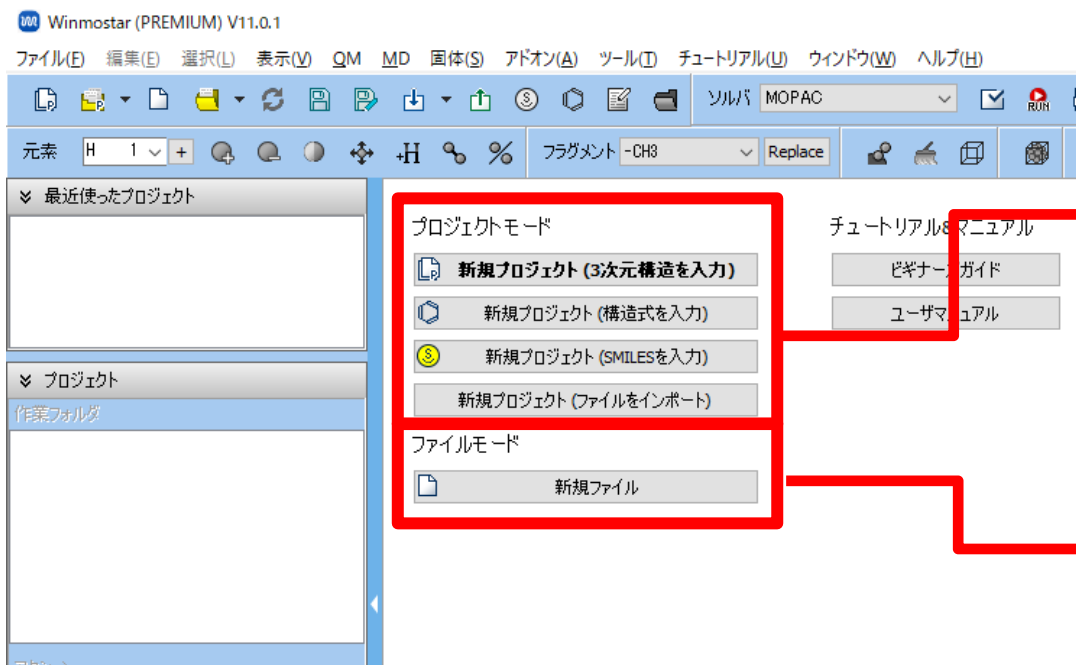
https://winmostar.com/jp/manual_jp/installation/Gaussian_setup_manual_jp_win.pdfに従い、Gaussianをインストールしてください。

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Gaussian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。

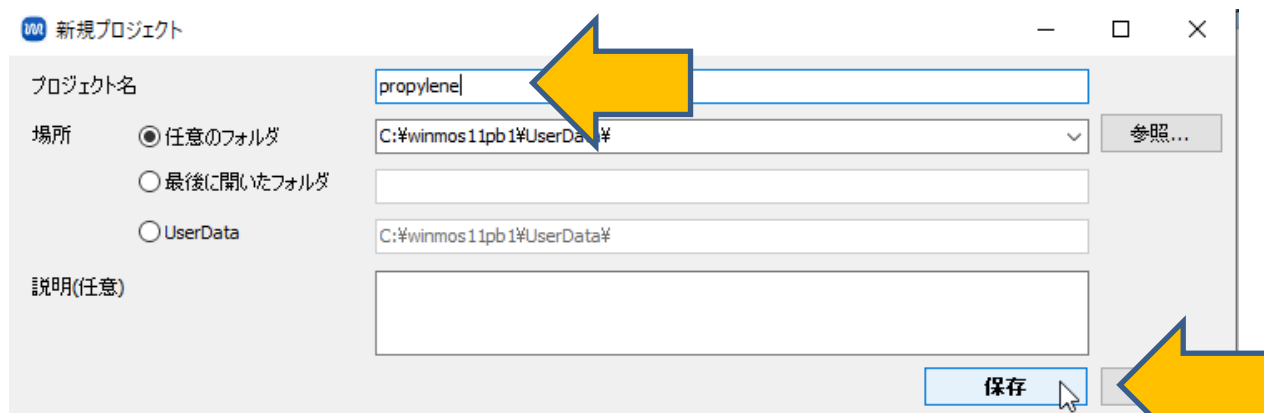
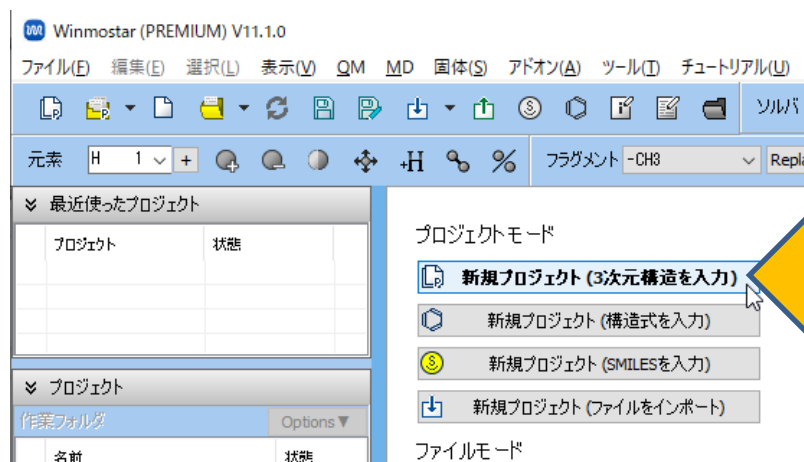
ファイルモード

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

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「propylene」と入力し**保存**をクリックします。



I. 系のモデリング

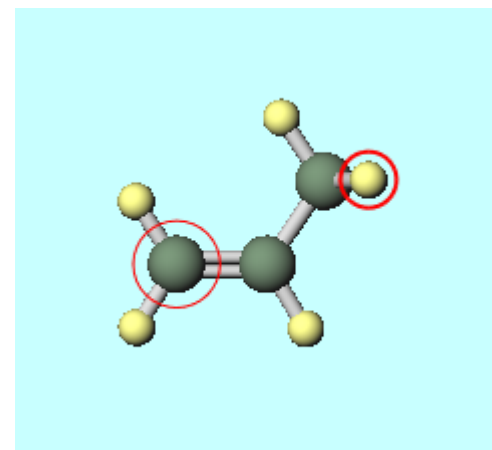
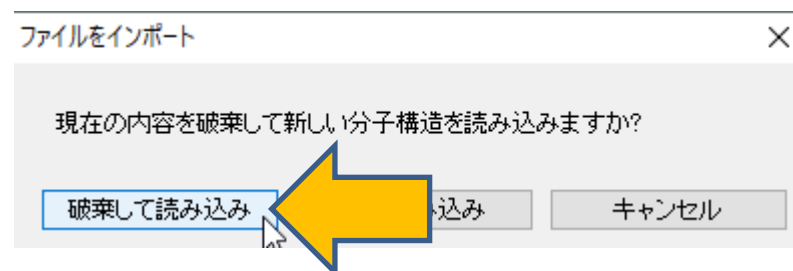
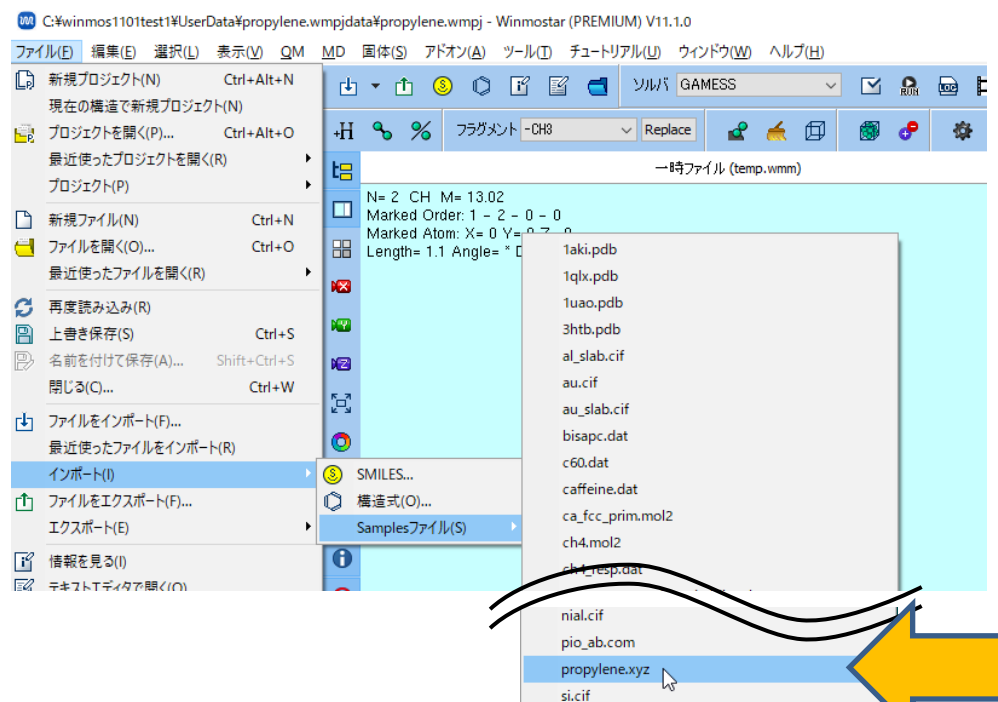
初期構造の作成方法の詳細は[Winmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法](#)を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

1. **ファイル | インポート | Samplesファイル | propylene.xyz**をクリックします。

– 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。

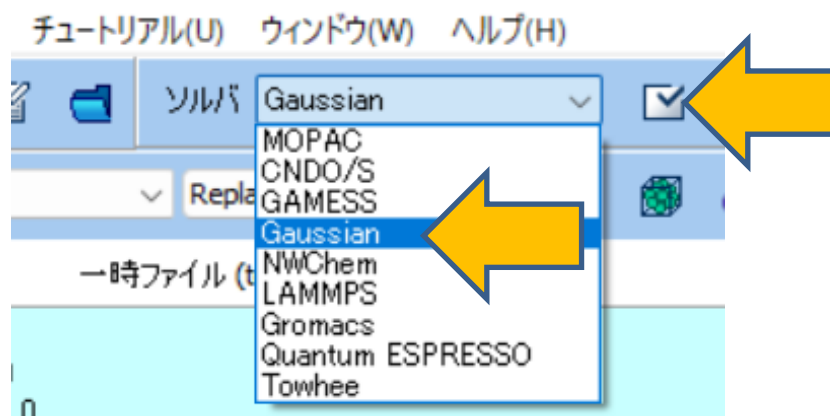
2. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。

3. 分子表示エリアに所望の分子が出現することを確認します。



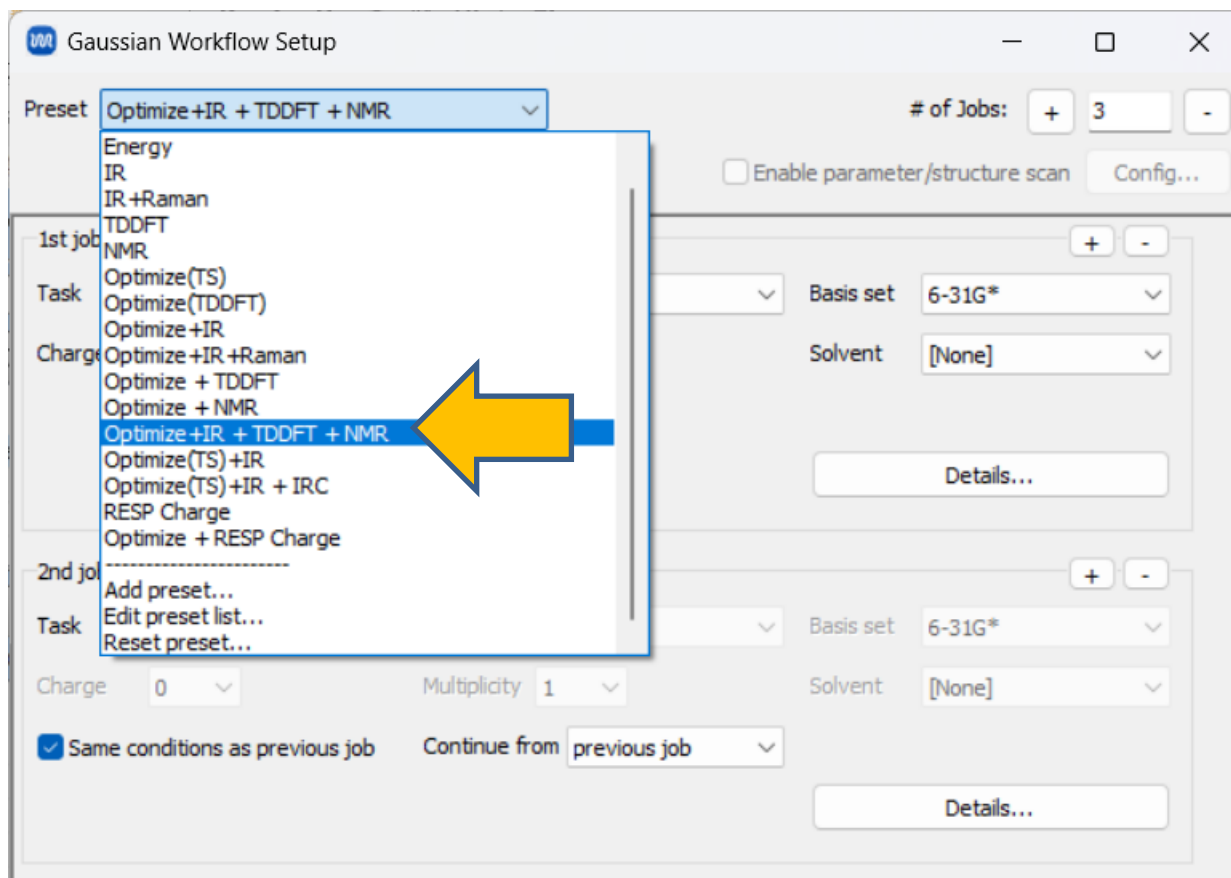
II. 計算の実行

1. ソルバー一覧から**Gaussian**を選択します。
2. ☒ (ワークフロー設定) をクリックします。



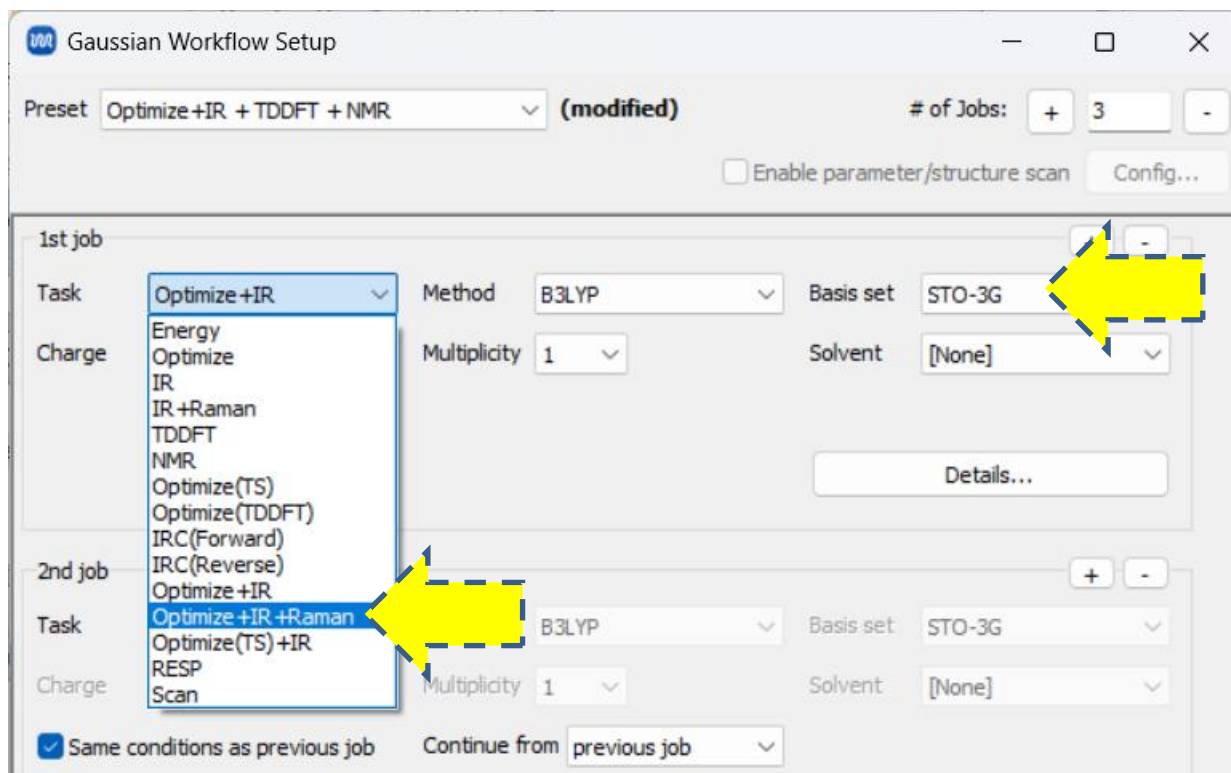
II. 計算の実行

1. Gaussian Workflow SetupウィンドウのPresetから「Optimize+IR + TDDFT + NMR」を選択します。



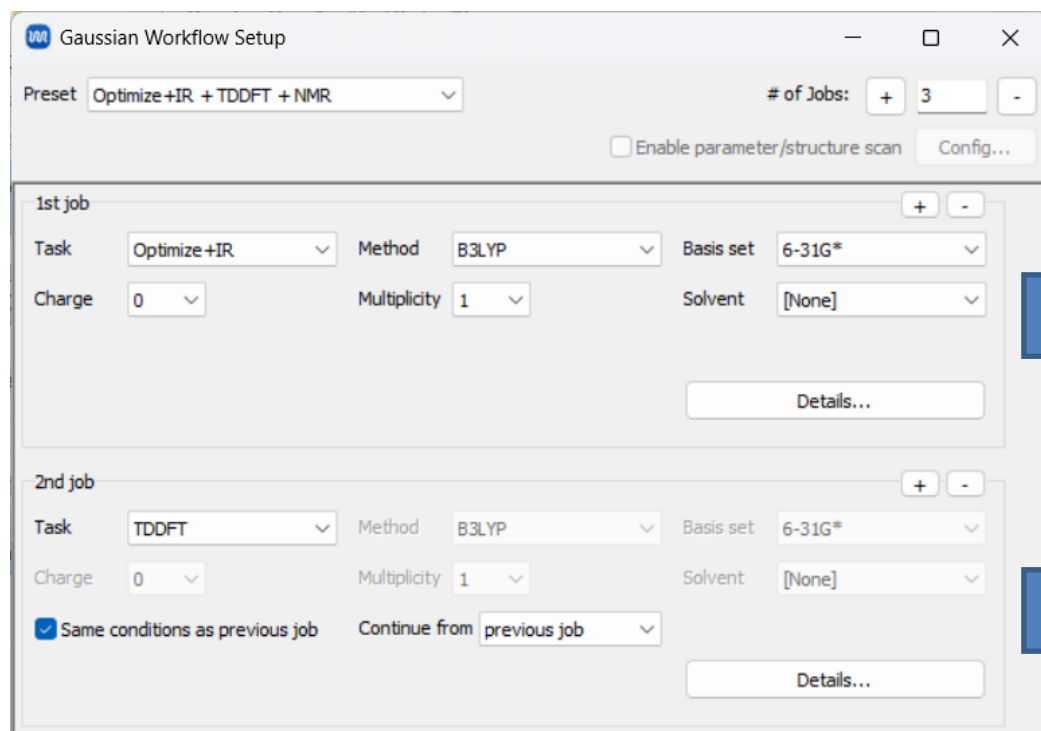
II. 計算の実行

- 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は、**1st job**の**Basis set**を「**STO-3G**」に変更します。ラマンスペクトルも計算する場合は、**1st job**の**Task**を「**Optimize+IR+Raman**」に変更します。そうでない場合は次のページに進みます。



補足 計算実行の流れ

今回のケースでは、①Optimize+IRの計算が実行された後に②TDDFTの計算が実行されます。連続して実行される計算の間で原子座標の情報は自動で引き継がれ、①の最終構造は②の初期構造と一致します。各計算は個別の作業フォルダの中で実行されます。



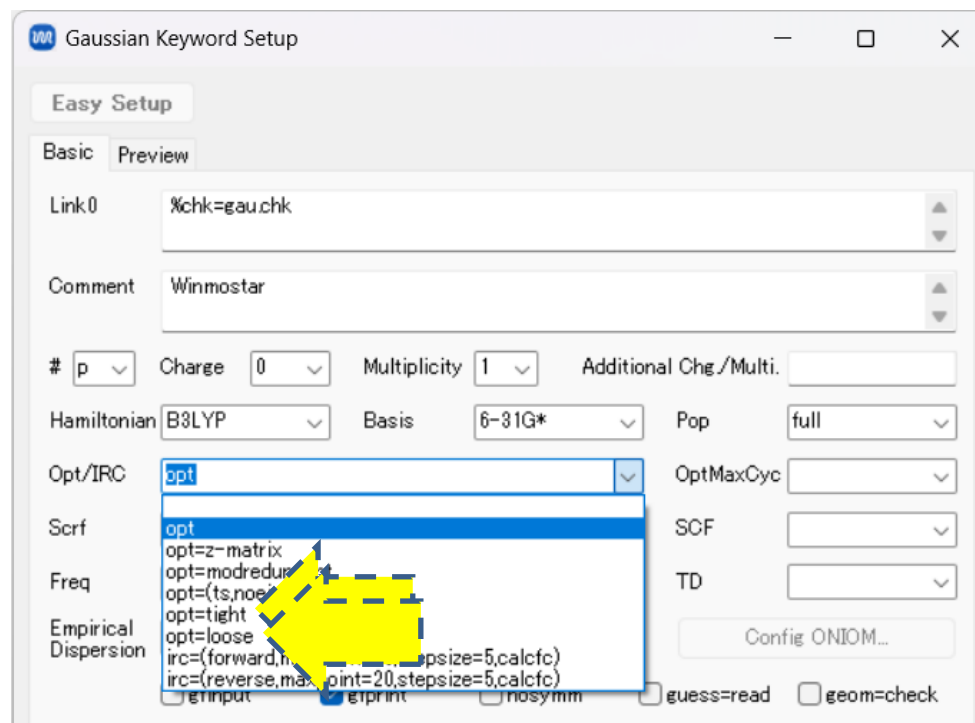
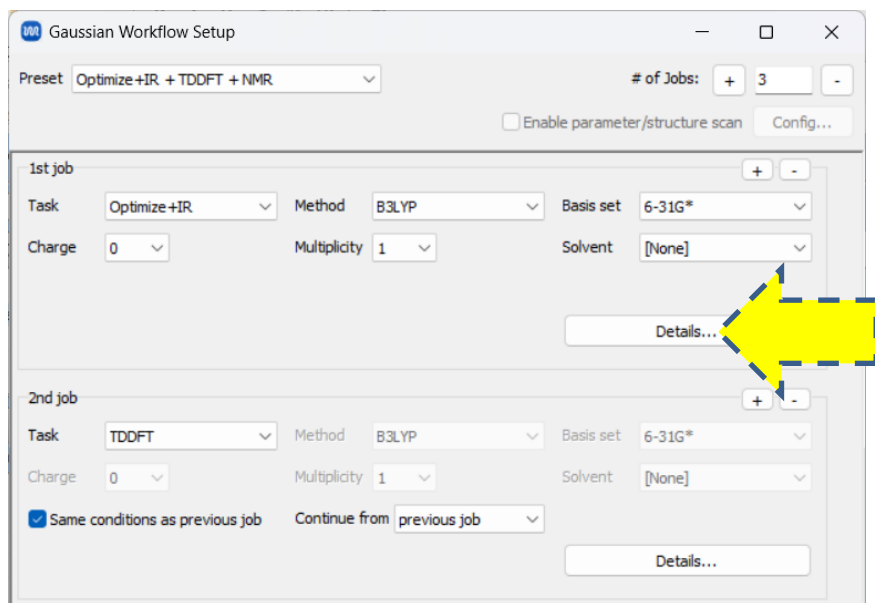
作業フォルダ

work1_GAU_OPT-IR

work2_GAU_TDDFT

補足 構造最適化計算の精度制御

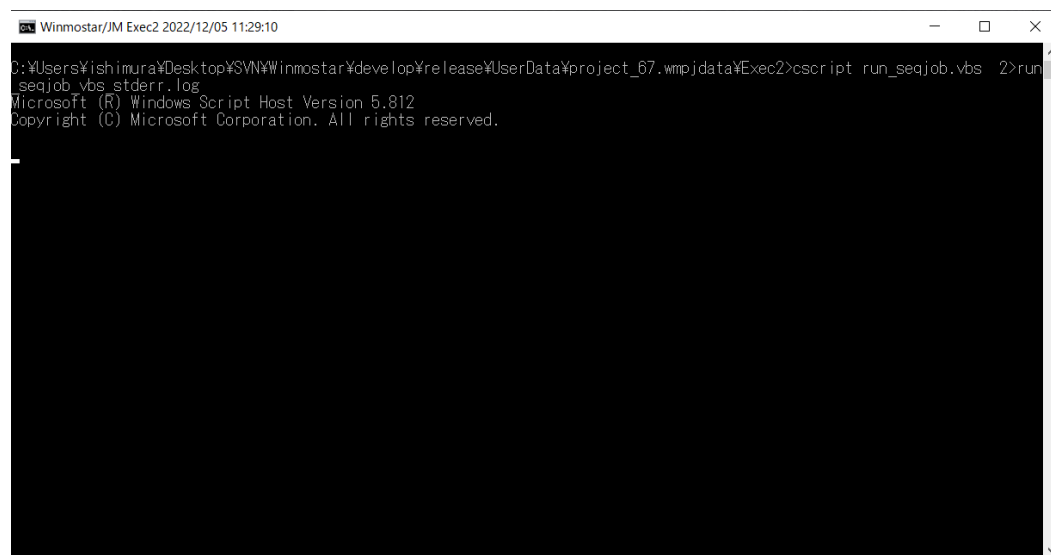
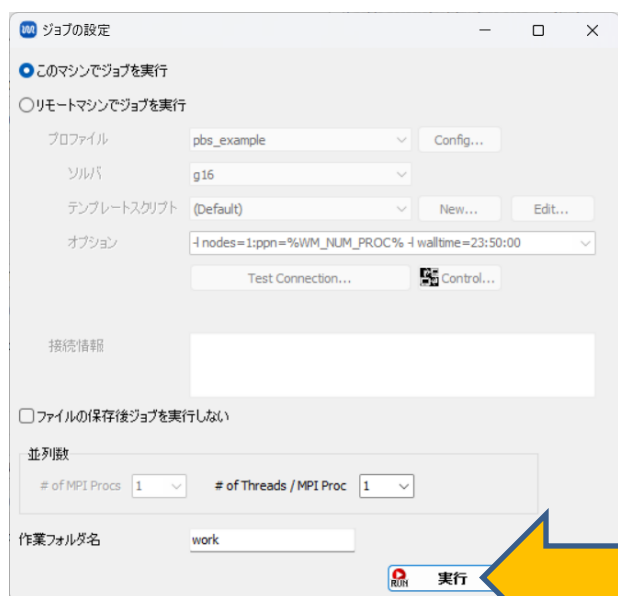
構造最適化計算の精度を上げるもしくは下げる場合、構造最適化を行う**1st job**の**Detail**ボタンをクリックして、**Gaussian Keyword Setup**ウィンドウの**Opt/IRC**を**opt**から**opt=tight**もしくは**opt=loose**に変更して、**OK**ボタンをクリックしてください。



II. 計算の実行

(リモートジョブの場合は先に[こちら](#)に進んでください。)

1. **Gaussian Workflow Setup**ウィンドウ右下の**OK**をクリックします。
2. **ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。バックグラウンドで**Winmostar Job Manager**が起動し、右図のような黒いコンソールウィンドウが出現し、計算が開始されます。



補足：入力ファイルを自分で修正したい場合やリモートサーバに自分でコピーして使用したい場合は、**ジョブの設定**ウィンドウで**ファイルの保存後ジョブを実行しない**にチェックを入れ**実行**をクリックします。保存後に計算を実行したい場合は**ファイル | プロジェクト | 選択された作業フォルダ | Run**をクリックします。

II. 計算の実行

1. メインウィンドウに戻ると（計算実行中でも構いません）、**プロジェクト表示エリア**に**Gaussian Workflow Setup**ウィンドウの各ジョブに対応する3つの作業フォルダの親子関係がツリー状に表示されます。
2. 分子表示エリアには自動的に最初の作業フォルダ（work1_GAU_OPT-IR）の入力ファイルが開かれます。**分子表示エリア**の上部でもそのことを確認できます。

The screenshot displays the Gaussian Workflow Setup interface. The top menu bar includes File (F), Edit (E), Select (L), View (V), QM, MD, Solid (S), Add-on (A), Tools (T), Tutorial (U), Window (W), and Help (H). The toolbar contains various icons for file operations and calculations. The main window is divided into several panels:

- 最近使ったプロジェクト (Recently Used Projects):** Lists projects like 'propylene' with status 'RUN(1)'.
- 作業フォルダ (propylene) (Job Folders):** A tree view showing the hierarchy of job folders. The folder 'work1_GAU_OPT-IR' is highlighted, indicating it is the active job.
- 分子表示エリア (Molecular Display Area):** Displays the molecular structure of propylene (C₃H₆) with atom labels and coordinates. The title bar of this panel reads 'work1_GAU_OPT-IR 入力ファイル (gau.gjf)'.
- 座標 (Coordinates):** A table showing the Cartesian coordinates (X, Y, Z) for each atom in the molecule.

Elem	X	Y	Z
1 C	0.0000	0.0000	0.0000
2 C	1.3310	0.0000	0.0000
3 C	2.1622	1.2202	0.0000
4 H	-0.5861	-0.9279	0.0003
5 H	-0.5946	0.9229	-0.0003
6 H	1.8972	-0.9471	0.0004
7 H	2.8225	1.2353	-0.9034
8 H	1.5394	2.1481	-0.0043
9 H	2.8160	1.2395	0.9080

II. 計算の実行

1. 計算の進行状況に応じて、プロジェクト表示エリアで各作業フォルダの状態が**PEND（黒）** → **RUN（緑）** → **END（青）** と変化します。
2. 全ての作業フォルダの状態が**END（青）**に変化するまで待ちます。この際**最近使ったプロジェクト**の「propylene」の状態も**ALL END（青）**に変化します。

最近使ったプロジェクト		
プロジェクト	状態	
👁️ propylene	RUN(1)	
プロジェクト		
作業フォルダ (propylene)		Options ▼
名前	状態	
👁️ work1_GAU_OPT-IR	RUN	
└─ work2_GAU_TDDFT	PEND	
└─ work3_GAU_NMR	PEND	



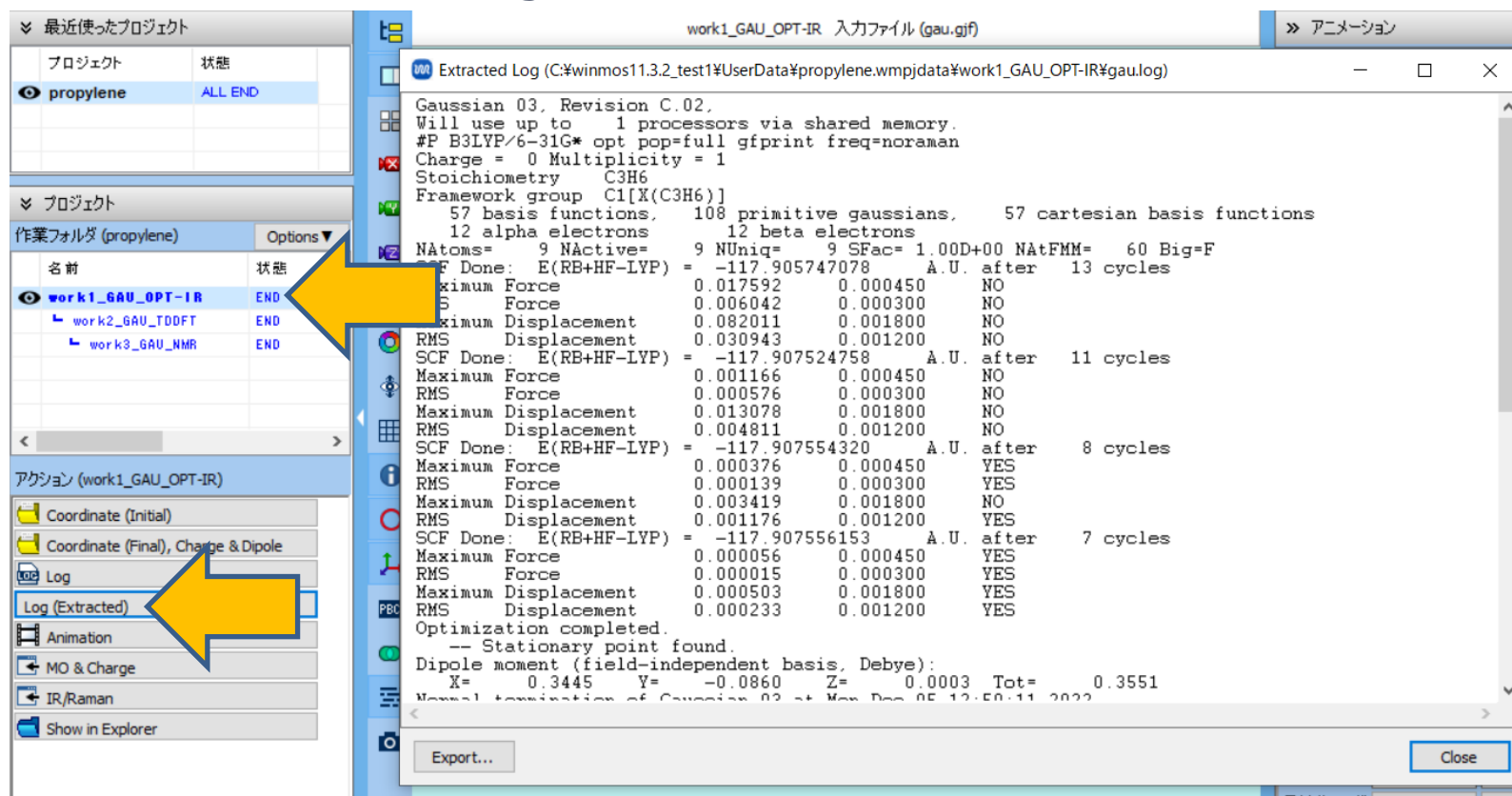
最近使ったプロジェクト		
プロジェクト	状態	
👁️ propylene	RUN(1)	
プロジェクト		
作業フォルダ (propylene)		Options ▼
名前	状態	
👁️ work1_GAU_OPT-IR	END	
└─ work2_GAU_TDDFT	RUN	
└─ work3_GAU_NMR	PEND	



最近使ったプロジェクト		
プロジェクト	状態	
👁️ propylene	ALL END	
プロジェクト		
作業フォルダ (propylene)		Options ▼
名前	状態	
👁️ work1_GAU_OPT-IR	END	
└─ work2_GAU_TDDFT	END	
└─ work3_GAU_NMR	END	

II. 計算の実行

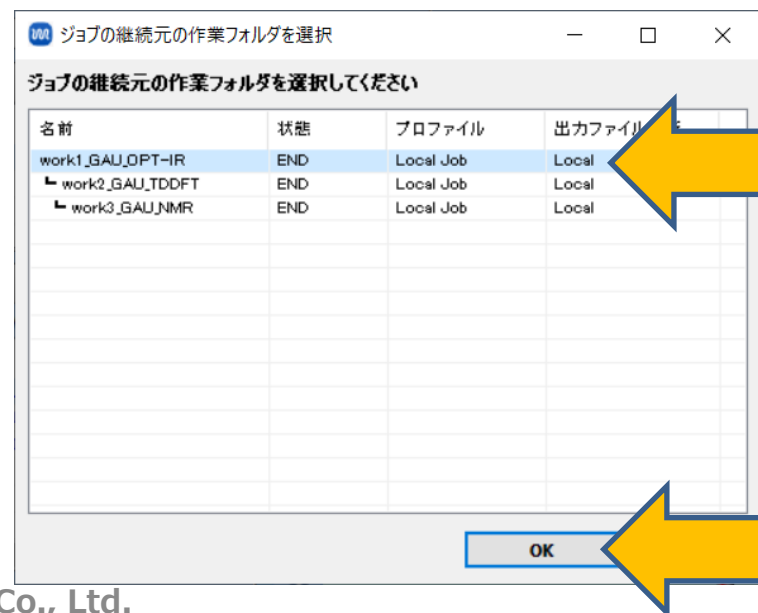
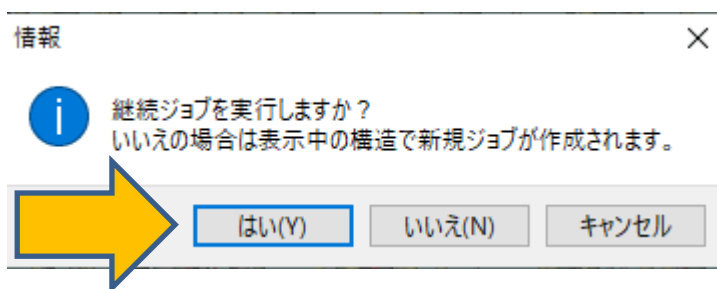
1. 各計算のログの主要な内容を見たい場合は、**プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で対象となる計算の作業フォルダをクリックして選択し、**アクション**の**Log (Extracted)**をクリックします。（プロフェッショナル版プレミアム限定の機能です）
2. 完全なログを見たい場合は**Log**をクリックします。



補足 計算の継続

本書では本ページの操作は不要です。

1. すでに完了した計算から最終状態の原子座標を引き継いで計算を開始したいときは、まず **(ワークフロー設定)** をクリックします。 
 2. **情報ダイアログ**で**はい**をクリックします。
 3. **ジョブの継続元の作業フォルダを選択**で継続元の作業フォルダを選択してから**OK**をクリックします。
 4. **Gaussian Workflow Setup**ウィンドウでP.9-10と同様に設定を行い計算を開始します。
- ※ファイルモードのように継続元ジョブの最終構造をメインウィンドウに表示しておく必要はありません。



補足 計算の継続

本書では本ページの操作は不要です。

すでに完了した計算の最終状態の分子構造を編集してから計算を開始する方法を紹介します。

1. **プロジェクト表示エリアの作業フォルダ**で編集元構造の作業フォルダをクリックし、**アクション**で**Coordinate (Initial)**（初期構造を編集する場合）または**Coordinate (Final)**（最終構造を編集する場合）をクリックします。
2. 各種ツールボタンや**編集メニュー**以下の機能を利用して分子構造を編集します。「…出力可能なファイル形式に編集し続行しますか？」と表示されたら**はい**をクリックします。
 - 一旦作業を中断したい場合は、（**上書き保存**）ボタンをクリックすると構造が保存され、Winmostarの再起動後でもプロジェクトを開きなおすと編集中の構造が再び出現します。または、（**ファイルをエクスポート**）をクリックし構造ファイルとして保存し、必要な段階で （**ファイルをインポート**）をクリックして保存した構造ファイルの構造を読み込みます。
3. 分子構造の編集が終わり、同一プロジェクト内で計算を実行する場合は、（**ワークフロー設定**）をクリックし「継続ジョブを実行しますか」と表示されたら**いいえ**をクリックします。新しいプロジェクトを作成して計算を実行する場合は、**ファイル | 現在の構造で新規プロジェクト**をクリックしてから （**ワークフロー設定**）をクリックします。

III. 結果解析 構造最適化アニメーション

以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで構造最適化計算の作業フォルダ (work1_GAU_OPT-IR) をクリックします。
2. アクションでAnimationをクリックすると、メインウィンドウ右側にアニメーション操作エリアが出現します。▶ ボタンをクリックすると、構造最適化の過程がアニメーション表示されます。
3. アニメーション表示エリア下部には、その上のリスト内のColumnで選ばれた列の値がグラフで表示されます。

プロジェクト表示エリア (作業フォルダ: propylene)

名前	状態
work1_GAU_OPT-IR	END
work2_GAU_TDDFT	END
work3_GAU_NMR	END

アクション (work1_GAU_OPT-IR)

- Coordinate (Initial)
- Coordinate (Final), Charge & Dipole
- Log
- Log (Extracted)
- Animation
- MO & Charge
- IR/Raman
- Show in Explorer

アニメーション操作エリア

ファイル (gau.log)

2 E(RB+HF-LYP) = -117.907524758 11
3 E(RB+HF-LYP) = -117.907554320 8
4 E(RB+HF-LYP) = -117.907556153 7
5 E(RB+HF-LYP) = -117.907556153 1

Frame: 5 / 5

Result: Optimization completed

Plot: Column 4

-117.907556153

III.結果解析 分子軌道

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで構造最適化計算の作業フォルダ（work1_GAU_OPT-IR）をクリックします。
2. アクションでMO & Chargesをクリックすると、Energy Level DiagramウィンドウとSurface Setupウィンドウが表示されます。Energy Level Diagramウィンドウでは各分子軌道のエネルギーやHOMO-LUMOギャップを確認できます。（STO-3Gの場合は値が異なります）

補足1：イオン化ポテンシャルの簡便な近似値は、HOMOエネルギーの符号を反対にした値となります。

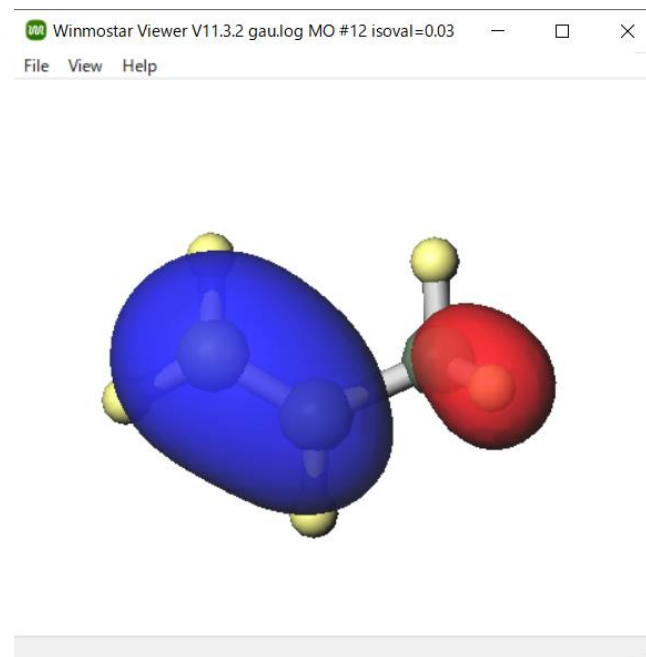
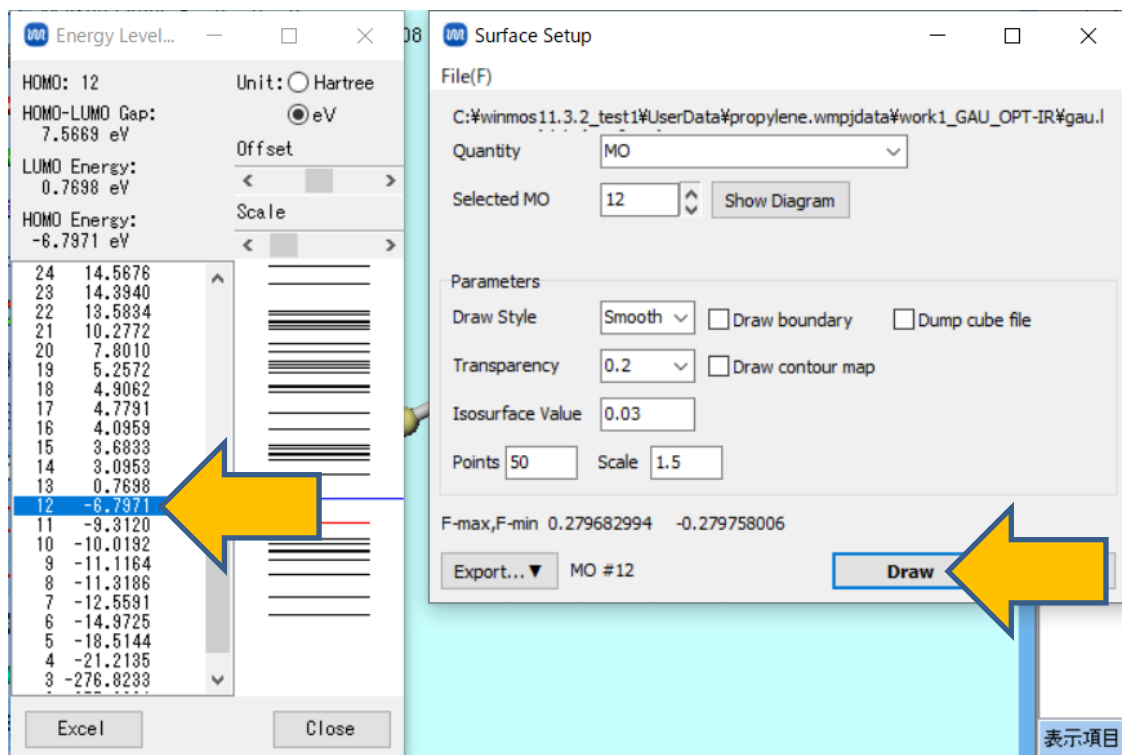
補足2：XPSのピークの簡便な近似値は、内殻の軌道エネルギーの符号を反対にした値となります。どの原子のピークであるかは、次のページの手順で分子軌道を図示して確認してください。

The screenshot displays three windows from the winmostar software:

- プロジェクト (Project) Window:** Shows a list of project folders under '作業フォルダ (propylene)'. The folder 'work1_GAU_OPT-IR' is selected. Below, the 'アクション (work1_GAU_OPT-IR)' section shows 'MO & Charge' as the selected action. Yellow arrows point from these elements to the other windows.
- Energy Level Diagram Window:** Displays orbital energy levels in eV. The HOMO is at -6.7971 eV and the LUMO is at 0.7698 eV. The HOMO-LUMO gap is 7.5669 eV. A red box highlights the HOMO and LUMO values.
- Surface Setup Window:** Shows the 'File(F)' path as 'C:\winmos11.3.2_test1\UserData\propylene.wmp\data\work1_GAU_OPT-IR\gau.l'. The 'Quantity' is set to 'MO' and 'Selected MO' is 12. The 'Draw' button is highlighted.

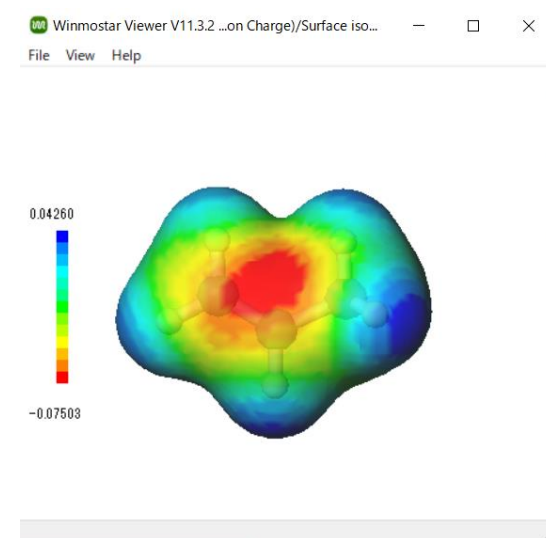
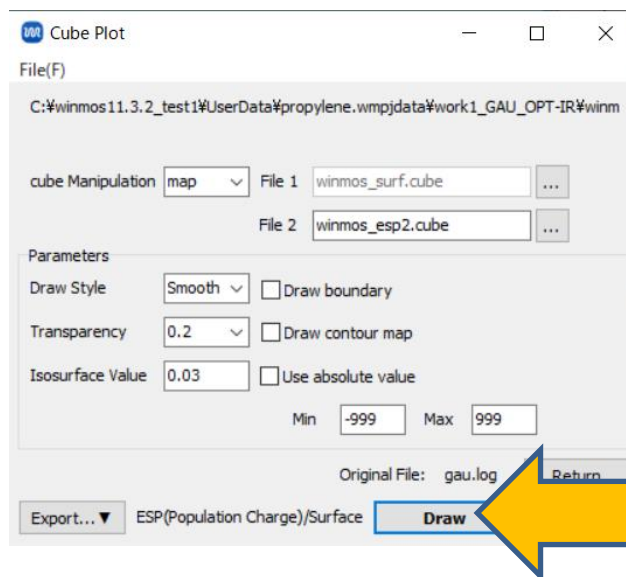
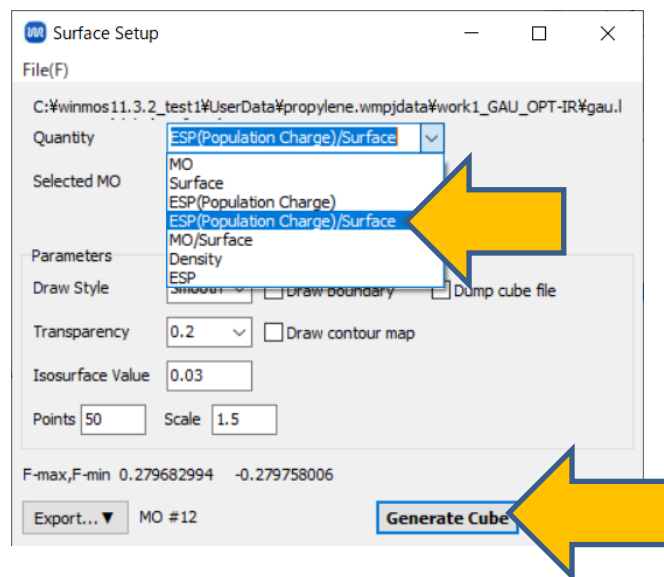
III.結果解析 分子軌道

1. **Energy Level Diagram**ウィンドウで3D表示したい軌道をクリックして選択し（デフォルトでは電子が入っている軌道の中で最もエネルギーが高いHOMOが選択されます）、**Surface Setup**ウィンドウの**Draw**ボタンをクリックします。
2. **Winmostar Viewer**が起動し、1で選択された分子軌道が3D表示されます。



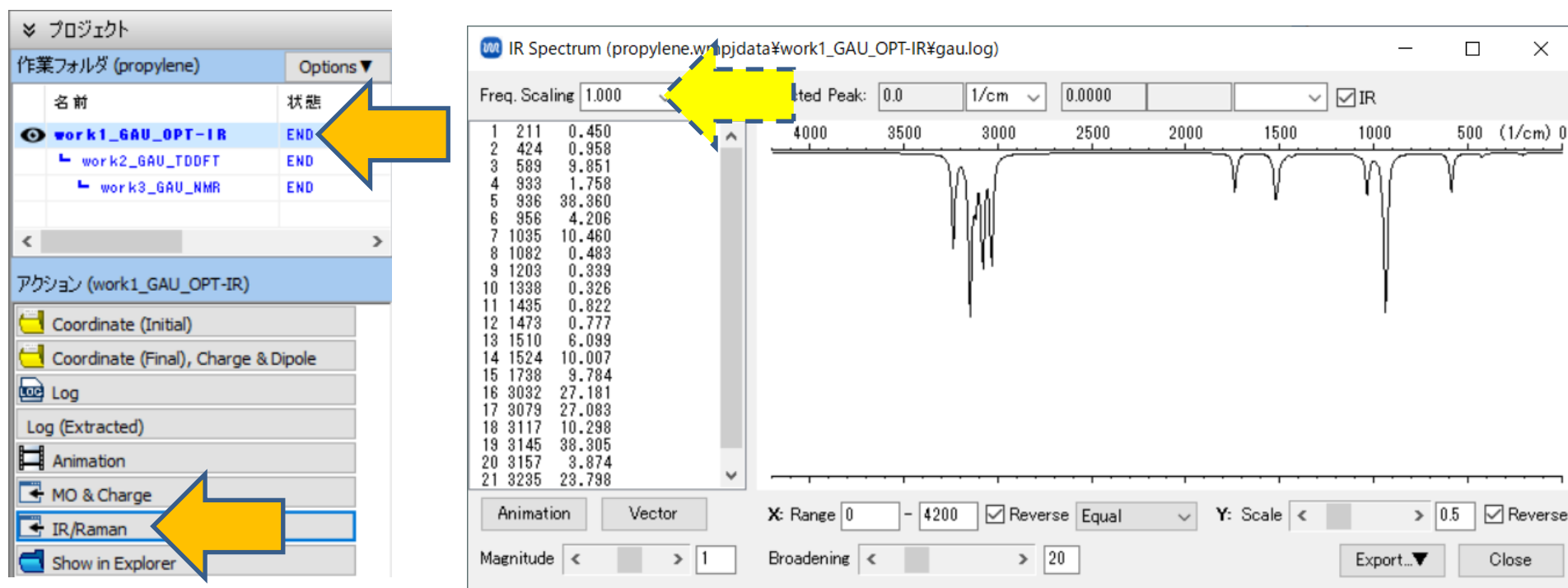
III.結果解析 静電ポテンシャル

1. **Surface Setup**ウィンドウの**Quantity**で**ESP(Population Charge)/Surface**を選択し、右下の**Generate Cube**をクリックします。
2. **Cube Plot**ウィンドウが出現したら**Draw**をクリックします。**Winmostar Viewer**が起動し、Mulliken電荷から計算された近似的な静電ポテンシャルを分子表面にマッピングした様子が表示されます。



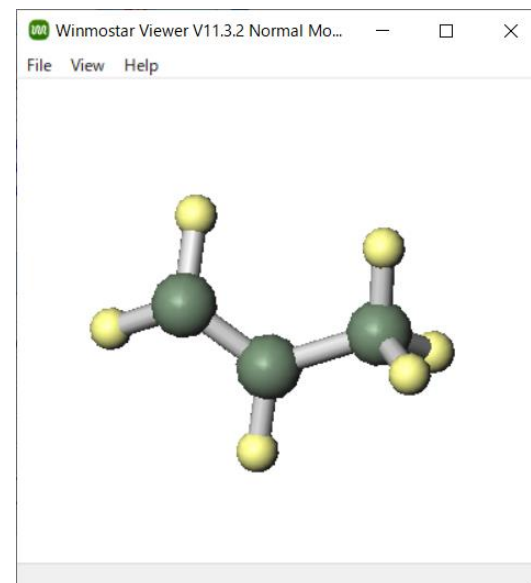
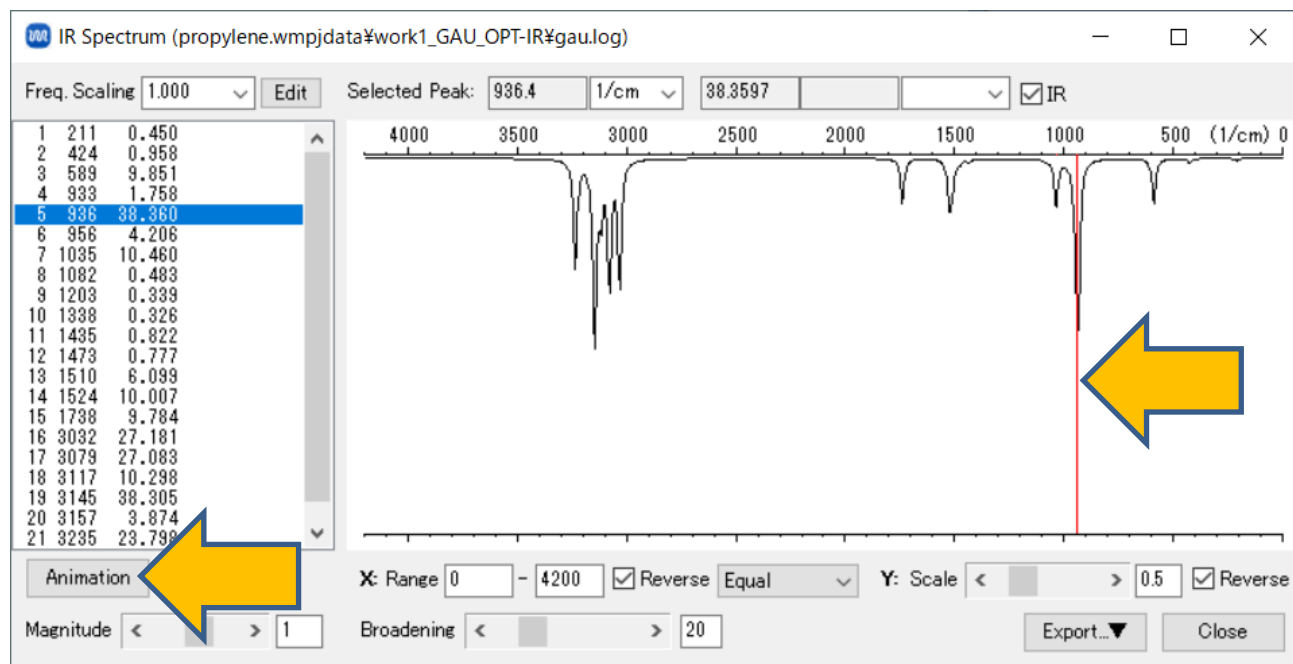
III.結果解析 IR/ラマンスペクトル

1. **プロジェクト表示エリアの作業フォルダ**で振動計算の作業フォルダ（work1_GAU_OPT-IR）をクリックします。（ラマンの時はwork1_GAU_OPT-IRRAMAN）
2. **アクション**で**IR/Raman**をクリックすると、スペクトルが出現します。
 - 計算手法と基底関数に応じた波数のスケーリングを行う場合は、**Freq. Scaling**から該当するものを選択してください。



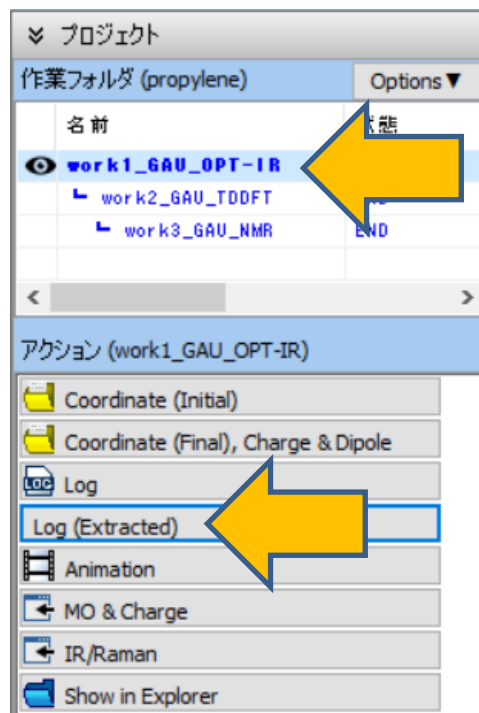
III.結果解析 IR/ラマンスペクトル

1. 振動モードを可視化する場合は、可視化したいピークをグラフ中でクリックし、**Animation** ボタンをクリックしてください。**Winmostar Viewer**が起動し、対応する振動モードのアニメーションが表示されます。
2. アニメーションを確認した後は、**Winmostar Viewer**をxボタンで終了し、**IR Spectrum** ウィンドウを**Close**ボタンで閉じてください。



III.結果解析 Gibbs自由エネルギー

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで振動計算の作業フォルダ (work1_GAU_OPT-IR) をクリックし、アクションでLog(Extracted)をクリックします。
2. Sum of electronic and thermal Free Energiesの値がGibbs自由エネルギー値(単位は Hartree)となります。



Extracted Log (C:\winmos11.3.2_test1\UserData\propylene.wmp\data\work1_GAU_OPT-IR\gau.log)

RMS Force	0.000015	0.000300	YES
Maximum Displacement	0.000503	0.001800	YES
RMS Displacement	0.000233	0.001200	YES
Optimization completed.			
-- Stationary point found.			
Dipole moment (field-independent basis, Debye):			
X=	0.3445	Y=	-0.0860
Z=	0.0003	Tot=	0.3551
Normal termination of Gaussian 03 at Mon Dec 05 12:50:11 2022.			
#P Geom=AllCheck Guess=Read SCRF=Check GenChk RB3LYP/6-31G(d) Freq			
Charge = 0 Multiplicity = 1			
SCF Done: E(RB+HF-LYP) = -117.907556153 A.U. after 1 cycles			
Temperature 298.150 Kelvin. Pressure 1.00000 Atm.			
Zero-point correction= 0.080082 (Hartree/Particle)			
Thermal correction to Energy= 0.084158			
Thermal correction to Enthalpy= 0.085102			
Thermal correction to Gibbs Free Energy= 0.055081			
Sum of electronic and zero-point Energies= -117.827474			
Sum of electronic and thermal Energies= -117.823398			
Sum of electronic and thermal Enthalpies= -117.822454			
Sum of electronic and thermal Free Energies= -117.852475			

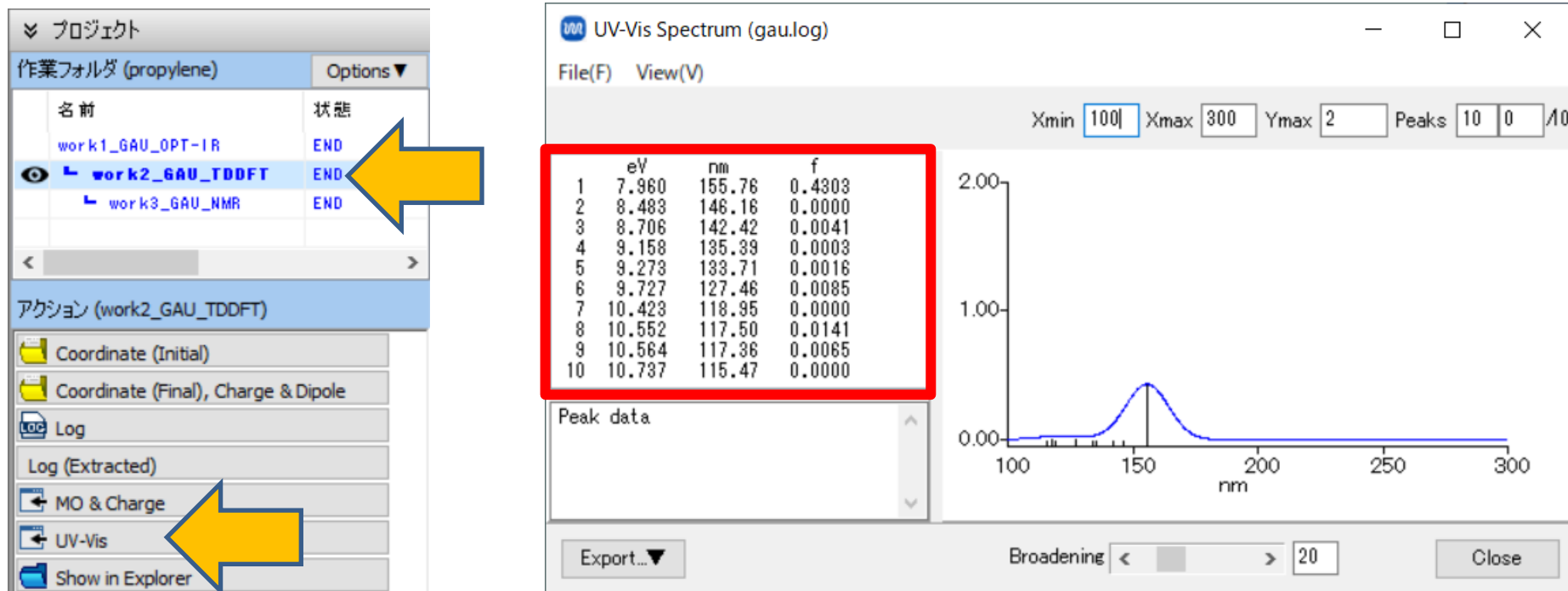
	E (Thermal)	CV	S
	KCal/Mol	Cal/Mol-Kelvin	Cal/Mol-Kelvin
Total	52.810	12.916	63.185
Electronic	0.000	0.000	0.000
Translational	0.889	2.981	37.136
Rotational	0.889	2.981	22.043
Vibrational	51.032	6.954	4.006

	Q	Log10(Q)	Ln(Q)
Total Bot	0.461989D-25	-25.335368	-58.336842
Total V=0	0.316062D+12	11.499773	26.479205

Maximum Force	0.000056	0.000450	YES
RMS Force	0.000015	0.000300	YES
Maximum Displacement	0.000503	0.001800	NO

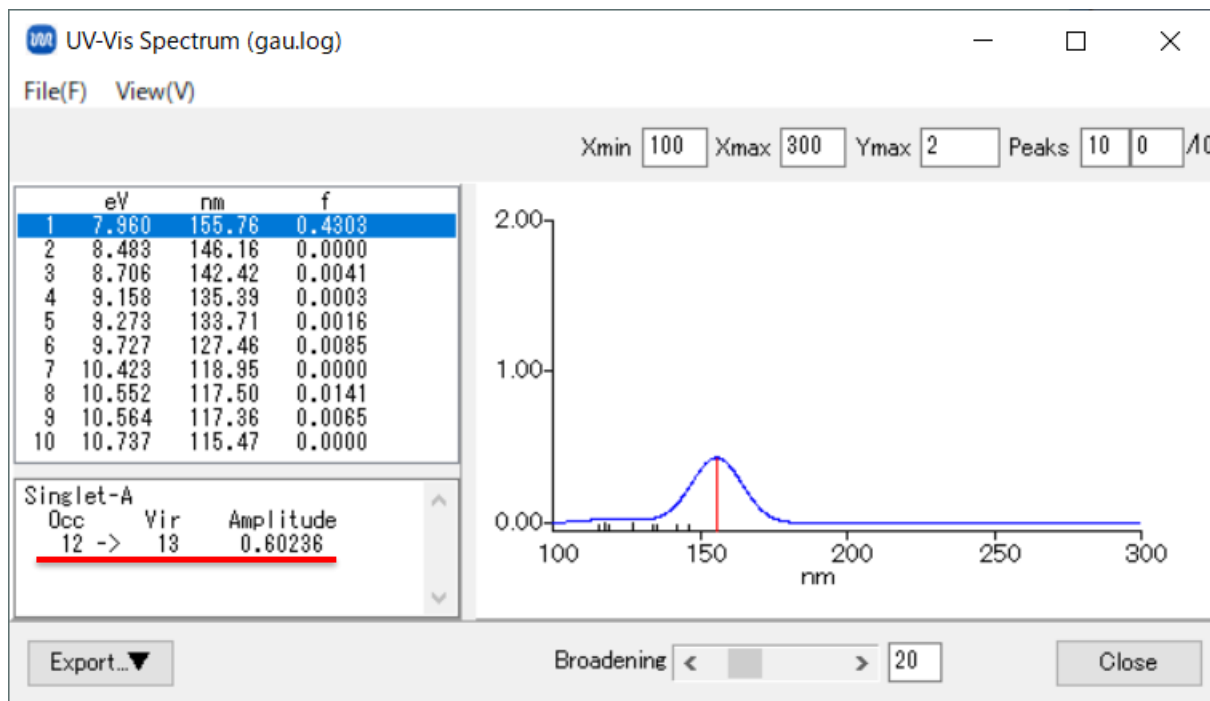
III.結果解析 UV-Visスペクトル

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダでTDDFT計算の作業フォルダ (work2_GAU_TDDFT) をクリックします。
2. アクションで**UV-Vis**をクリックすると、UV-Visスペクトルが表示されます。左上の欄には、各ピークの吸収エネルギー(eV)、吸収波長(nm)、強度が表示されます。(B3LYP/STO-3Gの場合は値が異なります)



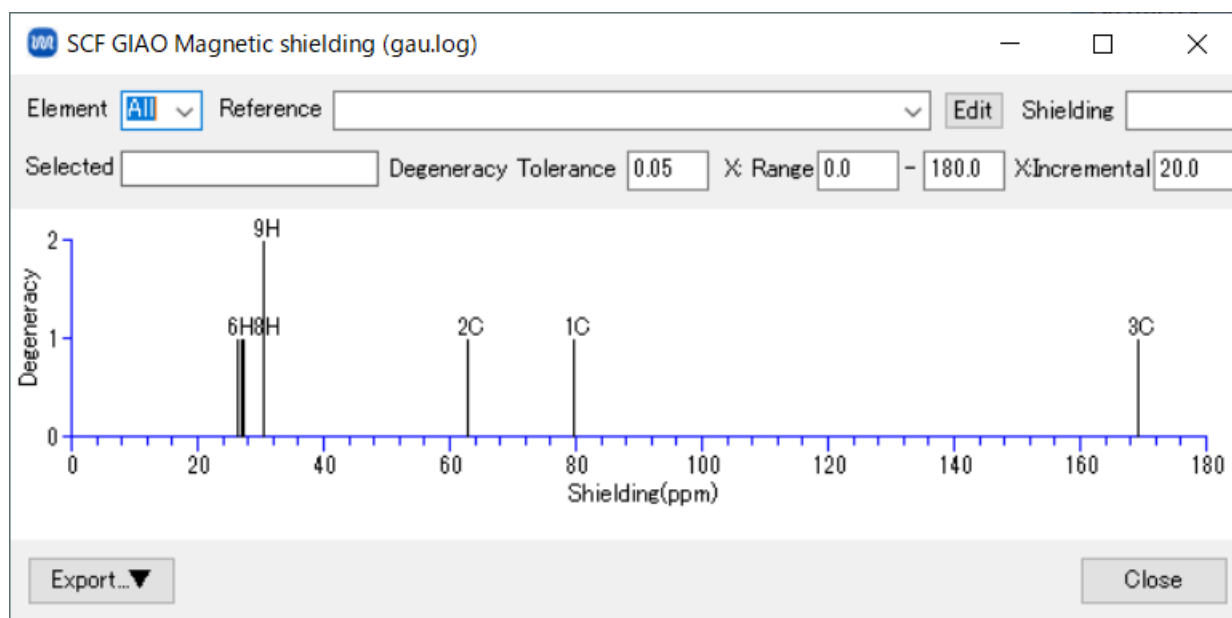
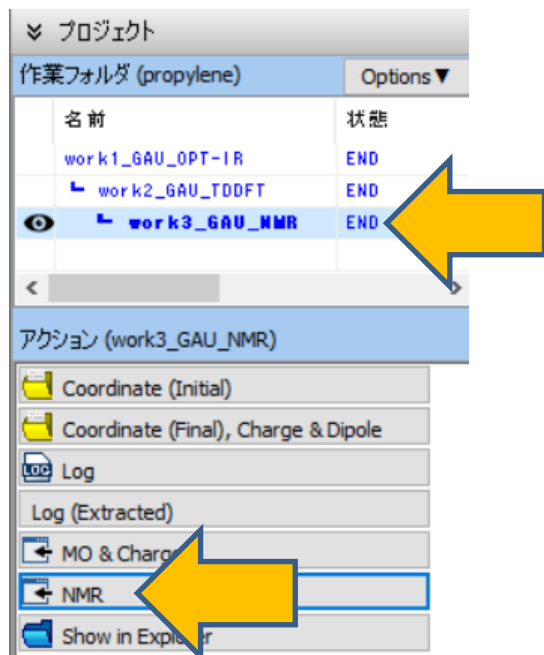
III.結果解析 UV-Visスペクトル

1. グラフ表示部上のピーク、もしくは左上欄のリスト中のピークをクリックすると、そのピークの励起の内容（励起元と励起先の軌道番号とその係数）が左下欄に表示されます。係数の絶対値が大きいほど重要な励起配置となります。12、13番目の軌道はHOMOとLUMOであることから（P.19参照）、第1ピークはHOMOからLUMOへの励起であることがわかります。
2. **UV-Vis Spectrum**ウィンドウも**Close**ボタンをクリックして閉じます。



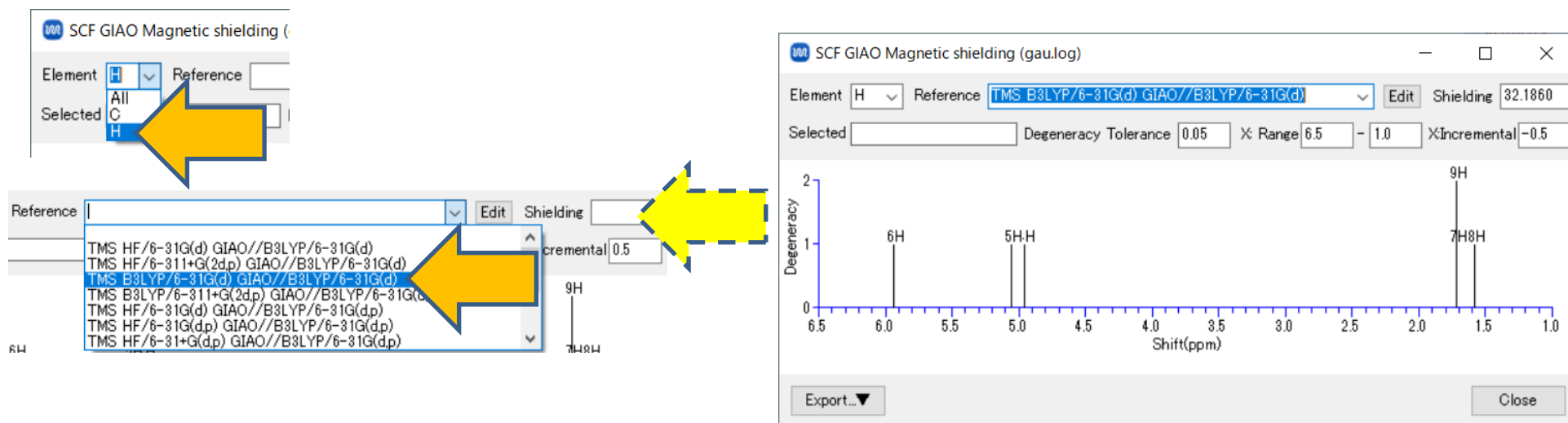
III.結果解析 NMRスペクトル

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダでNMR計算の作業フォルダ（work3_GAU_NMR）をクリックします。
2. アクションでNMRをクリックすると、**Magnetic Shielding**ウィンドウが開きます。この時点では全原子の核磁気遮蔽定数が表示されます。（B3LYP/STO-3Gの場合は値が異なります）



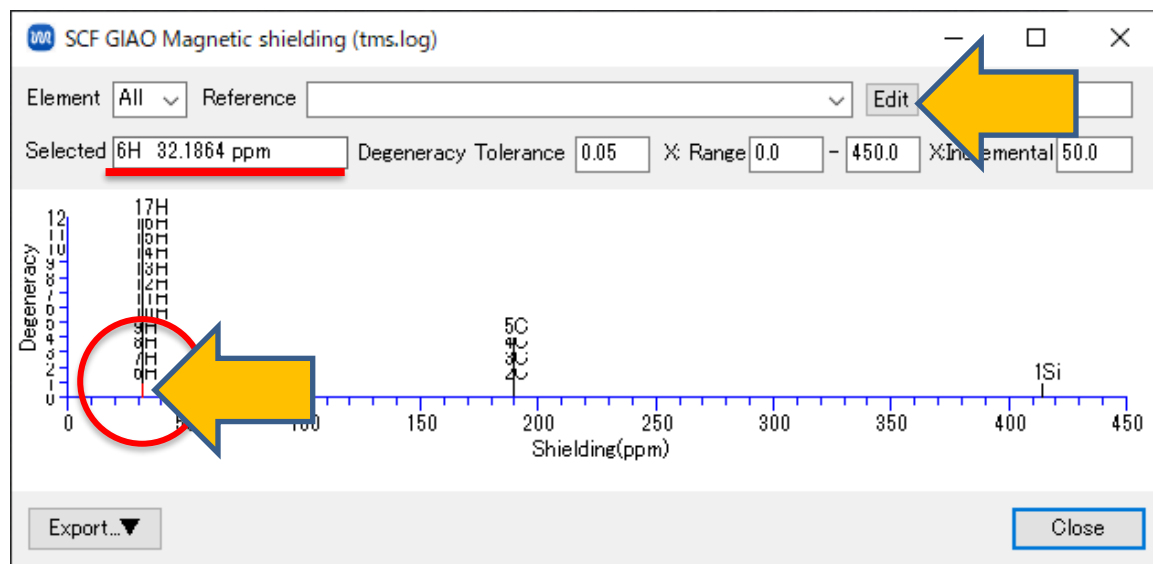
III.結果解析 NMRスペクトル

1. NMR化学シフトを表示する場合は、**Element**で注目したい元素を選択します。
2. **Reference**で参照データを選択するか、**Shielding**に参照となる遮蔽定数を入力すると、横軸が変化し選択した元素の化学シフトが表示されます。B3LYP/6-31G*で計算を行っている場合、**Reference**のTMS B3LYP/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)を選択します。
3. 確認後、同ウィンドウを閉じます。



補足 NMR参照データ

1. 基準にしたい分子(TMSなど)、計算方法で構造最適化、NMR計算を行います。
2. **Magnetic Shielding**ウィンドウを開きます。
3. 参照元にしたいピークをクリックすると、**Selected**に「6H 32.1864 ppm」などとそのピークの核磁気遮蔽定数が表示されます。
4. **Edit**をクリックすると**UserPref**フォルダ内の**wm_nmr.ref**が開かれます。
5. 「(元素名) (上で取得したShielding定数) ”(Winmostarで表示されるときの名前)” という行を追加すると、**Reference**でその遮蔽定数を選択できるようになります。



wm_nmr.ref - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

```
# NMR Shielding
C 200.003 "TMS HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
C 192.618 "TMS HF/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
C 189.696 "TMS B3LYP/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
C 182.502 "TMS B3LYP/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
C 249.429 "TMS HF/ST0-3G GIAO//HF/ST0-3G"
C 199.049 "CH4 HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
#
H 32.597 "TMS HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
H 32.073 "TMS HF/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
H 32.186 "TMS B3LYP/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
H 31.822 "TMS B3LYP/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
H 32.637 "TMS HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d,p)"
H 32.057 "TMS HF/6-31G(d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d,p)"
```

9行、52列 100% Windows (CRLF) UTF-8

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