

 winmostar チュートリアル

# Gaussian ONIOM法計算

V11.6.2

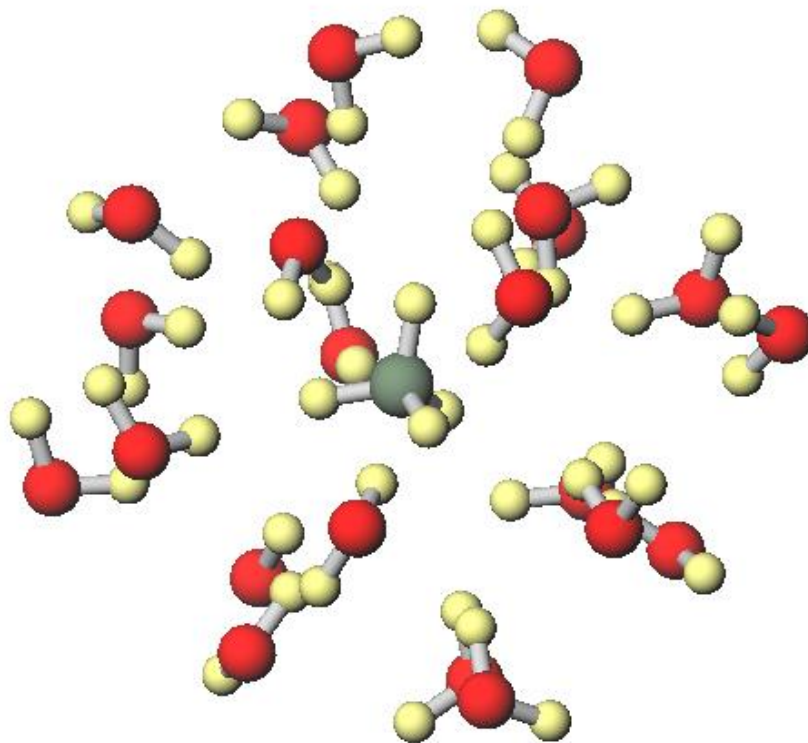
2023年11月6日 株式会社クロスアビリティ

# 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

- 本チュートリアルの実施にはWinmostar V11プロフェッショナル版エリートが必要です。
- LAMMPSやGromacsなどのMD計算から得られた溶液構造から、溶質とその周りの溶媒分子の構造を抜き出し、ONIOM法計算を実施する手順を示します。本書ではメタンに水分子が配位した構造についてONIOM法計算を実行し、構造最適化のアニメーションを確認します。

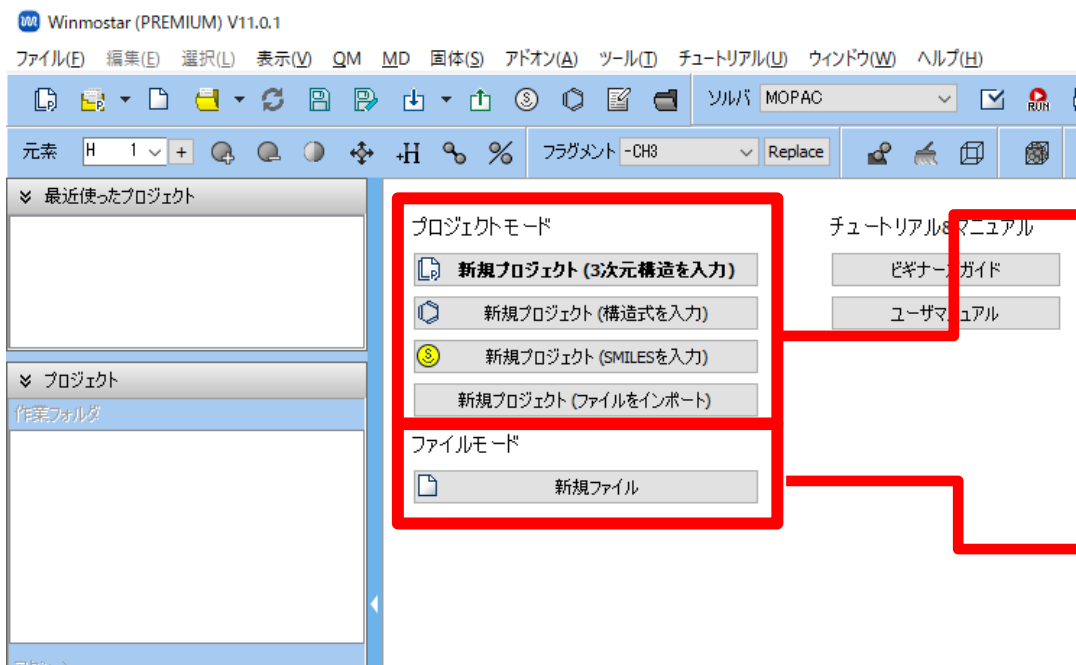


# Winmostar V11の動作モード

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。

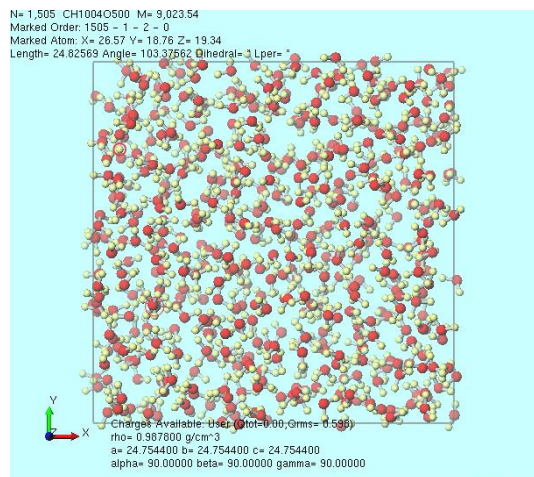
継続ジョブを作成するときに、ファイルモードまたはv10以前では都度継続元ジョブの最終構造を表示する必要がありますが、プロジェクトモードでは自動で最終構造が引き継がれます。

# I. 系のモデリング

ONIOM計算を行う構造を用意します。本書では、Samplesフォルダにある、MD計算で平衡化が済んだメタン水溶液の構造から、メタン分子とそれに配位する水分子の構造を抜き出します。

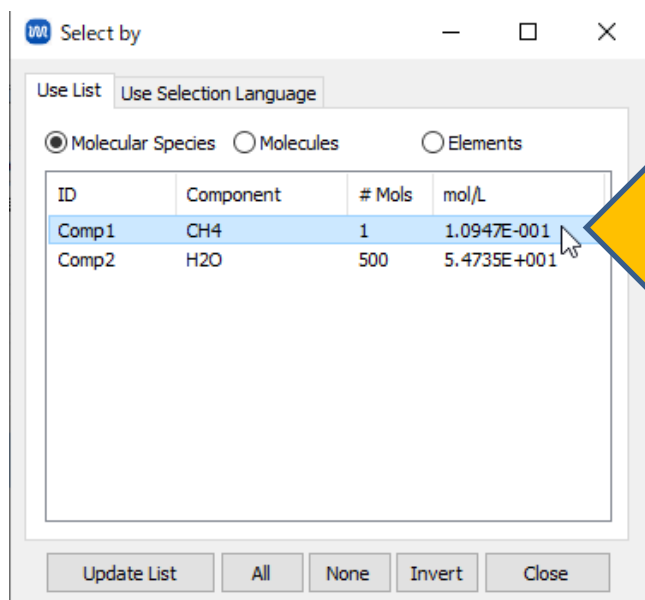
MD計算の基本的な実行方法は[LAMMPS基礎編](#)または[Gromacs基礎編](#)チュートリアルにてご確認ください。

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**ファイル | 新規プロジェクト**をクリックします。）
2. **プロジェクト名**に「oniom\_solution\_gaussian」と入力し**保存**をクリックします。
3. **ファイル | インポート | Samplesフォルダ | ch4\_h2o\_solution.mol2**をクリックし、「破棄して読み込み」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。



# I. 系のモデリング

1. 選択 | 分子種によるグループ選択をクリックし、溶質の分子種（**Comp1**）の行をクリックし、**Close**ボタンをクリックします。
2. 座標表示エリアでグループ選択されている原子のうちどれか一つの原子（本書では1番目の原子）をクリックします。



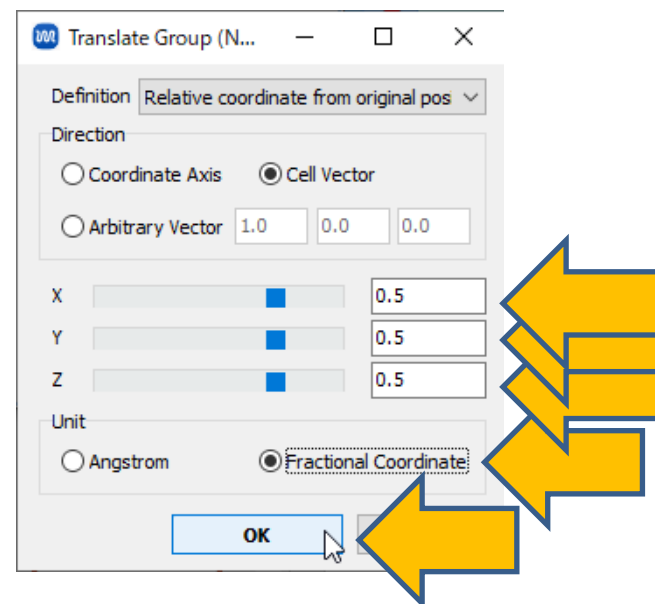
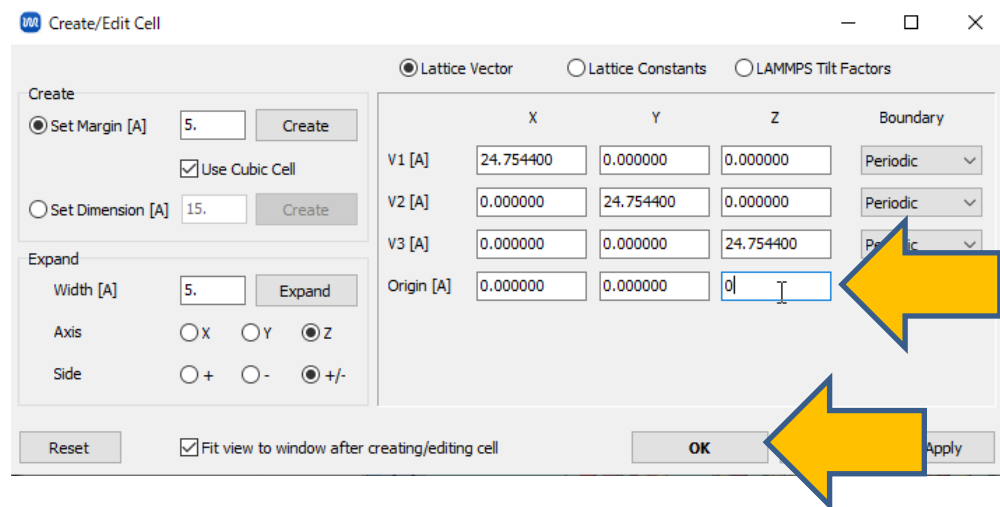
座標

表示形式 ☒ XYZ ☐ Z-Matrix

Elem	X	Y	Z
1 C	4.2100	7.9800	18.9700
2 H	4.2200	7.3400	19.8700
3 H	5.2100	8.1100	18.5400
4 H	3.6500	7.3900	18.2300
5 H	3.7100	8.8800	19.3400
6 O	13.5500	10.5700	6.9300
7 H	13.7500	10.5000	5.9500
8 H	14.0600	9.8700	7.4200
9 O	14.3600	4.8400	22.7900
10 H	13.7000	5.2300	22.1400
11 H	14.3800	3.8500	22.6900
12 O	16.0400	25.0000	0.0000

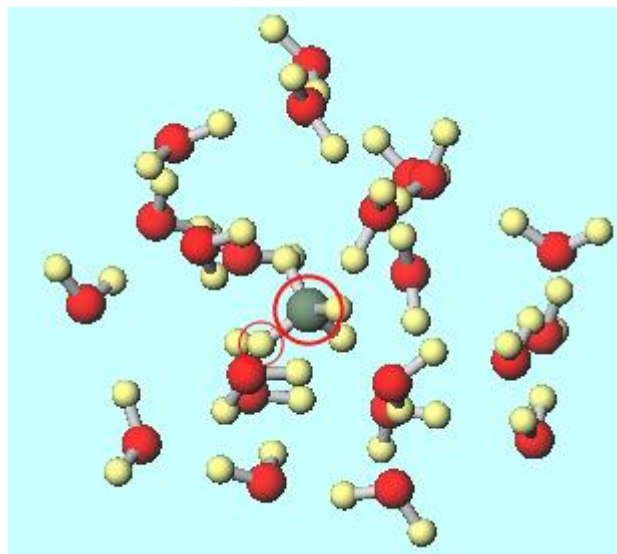
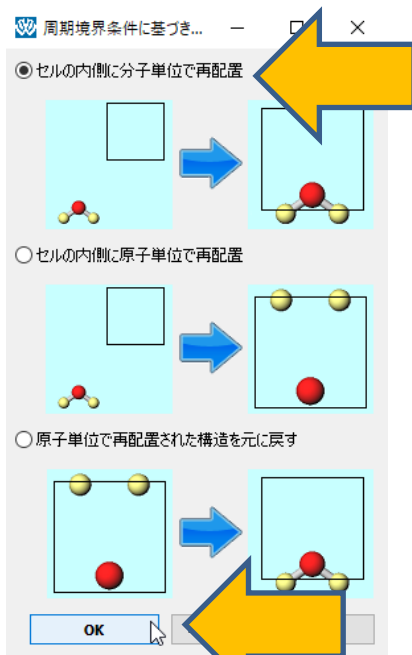
# I. 系のモデリング

1. 編集 | 座標軸の取り直し | 選択原子の位置を原点に指定をクリックします。
2. 編集 | セルを作成/編集 | 手動でセルを編集をクリックし、**Origin**のX, Y, Zを全て「0」に変更して**OK**をクリックします。
3. 選択 | すべてをグループ選択をクリックします。
4. 編集 | グループ編集 | グループを並進移動（数値を指定）をクリックします。
5. UnitをFractional Coordinateに変更し、X, Y, Zを全て「0.5」に変更し**OK**をクリックします。



# I. 系のモデリング

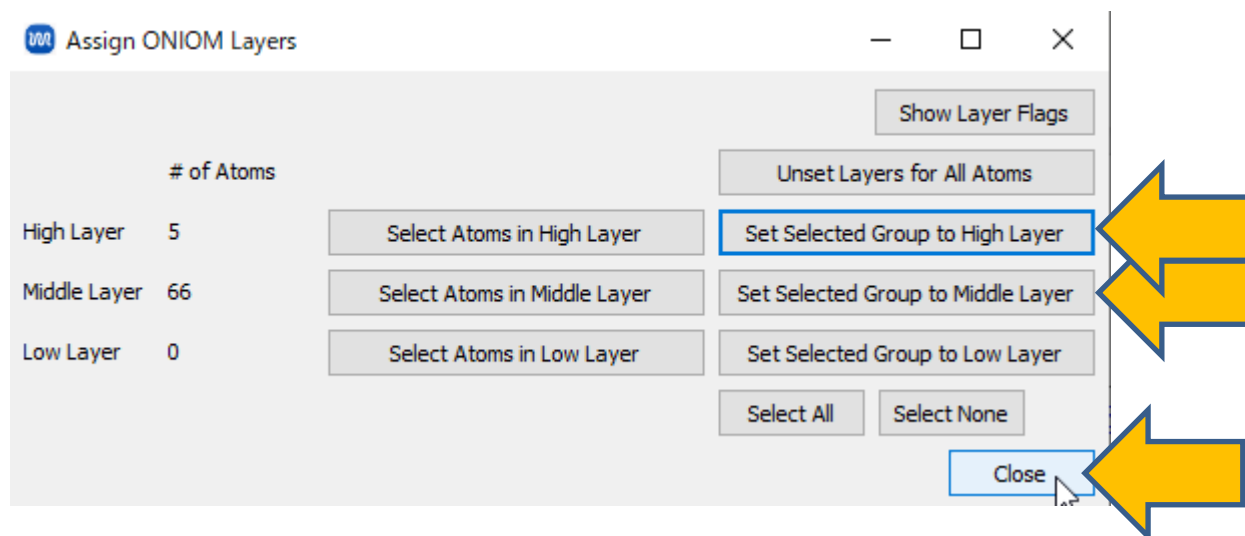
1. 編集 | 周期境界条件に基づき原子を再配置をクリックし、セルの内側に原子単位で再配置にチェックを入れOKをクリックします。
2. 選択 | 分子種によるグループ選択をクリックし、溶質の分子種（**Comp1**）の行をクリックし、Closeボタンをクリックします。
3. 選択 | 現在のグループに隣接する分子をグループ選択をクリックする。
4. 編集 | グループ編集 | グループを削除をクリックし、Leaveをクリックします。
5. 編集 | セルを削除をクリックします。





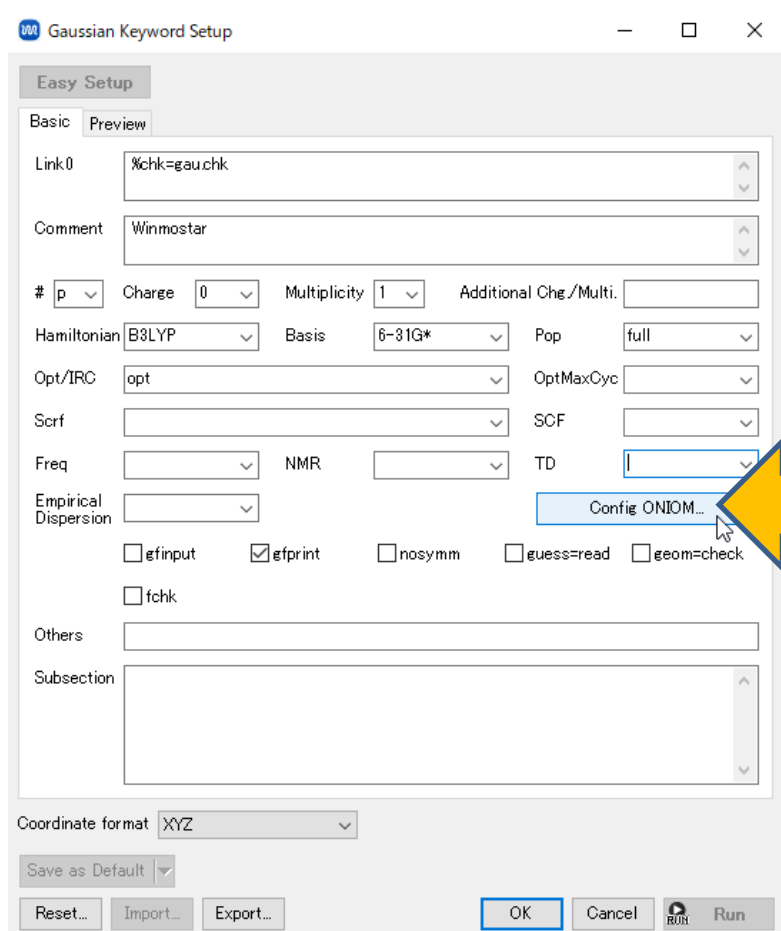
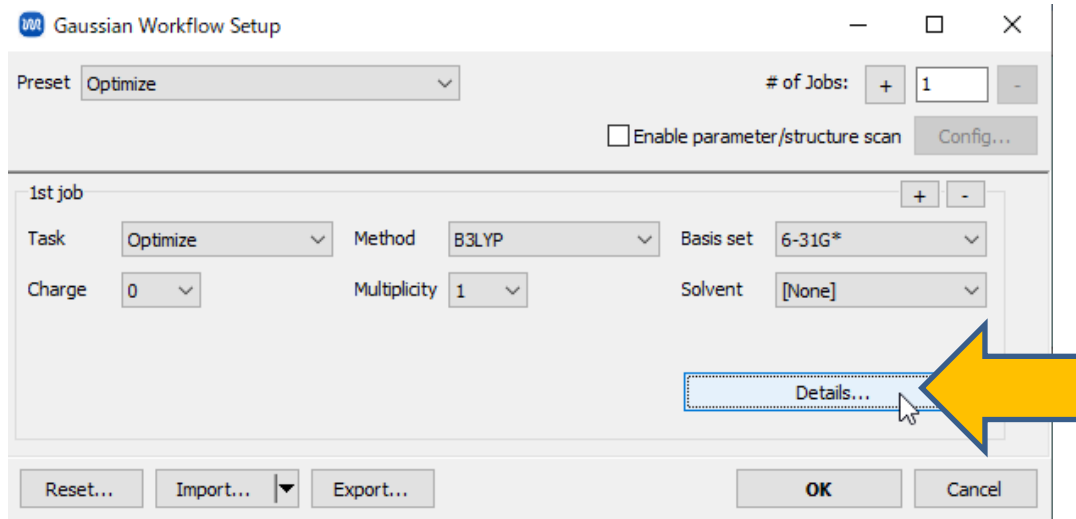
## II. 計算の実行

1. QM | Gaussian | ONIOMレイヤーを割り当てをクリックします。
2. Select Allをクリックし、Set Selected Group to Middle Layerをクリックします。
3. 選択 | 分子種によるグループ選択をクリックし、溶質の分子種（Comp1）の行をクリックし、Closeボタンをクリックします。
4. Assign ONIOM LayersウィンドウのSet Selected Group to High Layerをクリックします。
5. Assign ONIOM LayersウィンドウのCloseをクリックします。



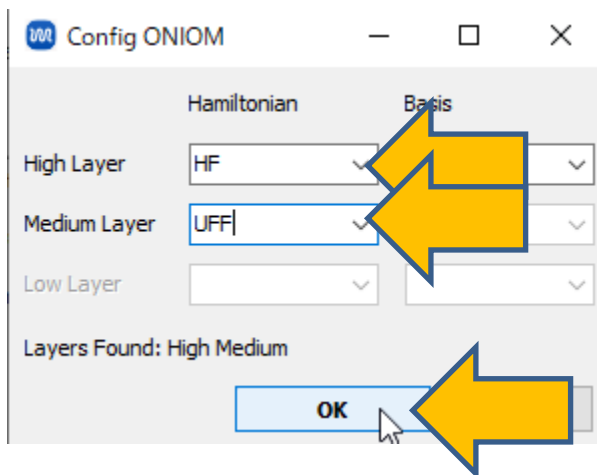
## II. 計算の実行

1. ソルバを選択でGaussianを選択し、☒ ワークフロー設定ボタンをクリックします。
2. Detailsをクリックし、Config ONIOMをクリックします。




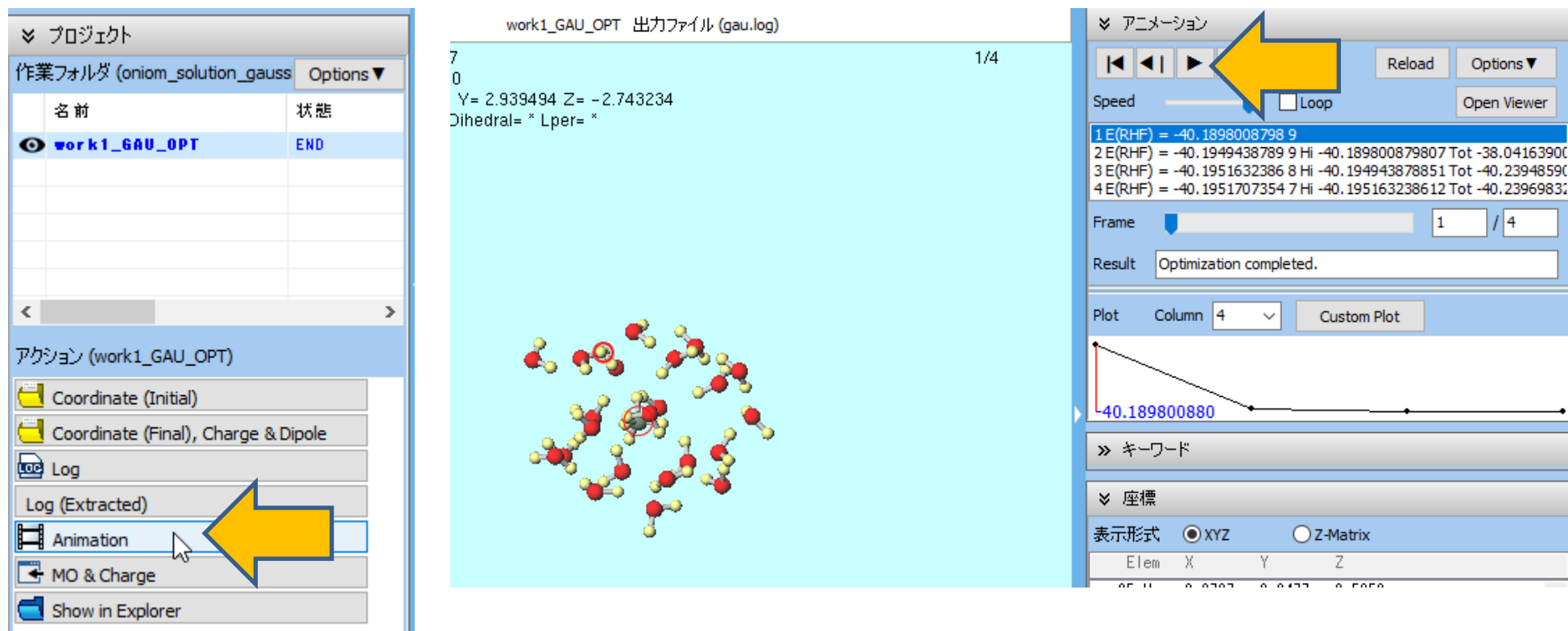
## II. 計算の実行

1. **High Layer**のHamiltonianを「HF」に、**Medium Layer**のHamiltonianを「UFF」に変更しOKをクリックします。
2. **Gaussian Keyword Setup**のOKをクリックします。
3. **Gaussian Workflow Setup**のOKをクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



# III. 結果解析

1. **work1\_GAU\_OPT**の作業フォルダの状態が**END**に変化した後、**アクション**の**Animation**をクリックします。アニメーション操作エリアの  (**Play/Pause**) をクリックすると構造最適化の過程が可視化されます。



The screenshot displays the winmostar software interface during a molecular structure optimization process. The left sidebar shows the project tree with 'work1\_GAU\_OPT' selected and its status as 'END'. The 'アクション (work1\_GAU\_OPT)' panel on the left has the 'Animation' button highlighted with a yellow arrow. The central window shows the output file 'work1\_GAU\_OPT 出力ファイル (gau.log)' with coordinates Y= 2.939494 Z= -2.743234 and Dihedral= \* Lper= \*. Below the log is a 3D ball-and-stick model of a molecular structure. The right sidebar shows the 'アニメーション' (Animation) panel, which includes playback controls (a yellow arrow points to the Play/Pause button), speed settings, and a plot of energy versus frame. The plot shows a sharp drop in energy from frame 1 to 4, with the value 40.189800880 displayed. The 'Result' field indicates 'Optimization completed.' and the '座標' (Coordinates) section shows the XYZ representation.

プロジェクト  
作業フォルダ (oniom\_solution\_gauss) Options ▼

名前	状態
work1_GAU_OPT	END

アクション (work1\_GAU\_OPT)

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

work1\_GAU\_OPT 出力ファイル (gau.log)

7  
0  
Y= 2.939494 Z= -2.743234  
Dihedral= \* Lper= \*

1/4

アニメーション

Reload Options ▼

Speed ☐ Loop Open Viewer

1 E(RHF) = -40.1898008798 9  
2 E(RHF) = -40.1949438789 9 Hi -40.189800879807 Tot -38.0416390  
3 E(RHF) = -40.1951632386 8 Hi -40.194943878851 Tot -40.2394859  
4 E(RHF) = -40.1951707354 7 Hi -40.195163238612 Tot -40.2396983

Frame 1 / 4

Result Optimization completed.

Plot Column 4 Custom Plot

40.189800880

キーワード

座標

表示形式 ☒ XYZ ☐ Z-Matrix

Elem	X	Y	Z
25 H	0.0707	0.0477	0.5050

# 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