winmostar チュートリアル

Gaussian
BSSE補正相互作用エネルギー

V11.12.0

2025年4月21日　　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。
- メタノール2分子のcounterpoise法によるBSSE（Basis Set Superposition Error、基底関数重なり誤差）補正された構造最適化をB3LYP/6-31G*レベルで行います。比較のためBSSE補正無しの2分子、相互作用エネルギー算出のため1分子のB3LYP/6-31G*レベルでの構造最適化も行います。
- 基底関数が小さい場合、2量体などの計算において、それぞれのモノマーは近くのモノマーの基底関数を借りて過剰にエネルギーが安定化してしまい、相互作用エネルギーが過大評価されてしまいます。この誤差はBSSEと呼ばれています。
- BSSEを補正する方法の一つであるcounterpoise法は、それぞれのモノマーについて近くのモノマーの基底関数のみを追加した計算を行うことで過剰な安定化エネルギーを見積もります。モノマーA及びBの2量体の場合は、次の式からBSSEを算出します。

$$BSSE = (E_A[A] - E_{A+B}[A]) + (E_B[B] - E_{A+B}[B])$$

$E_A[A]$:モノマーAの基底関数を使ったAのエネルギー

$E_{A+B}[A]$:モノマーA及びBの基底関数を使ったAのエネルギー

$E_B[B]$:モノマーBの基底関数を使ったBのエネルギー

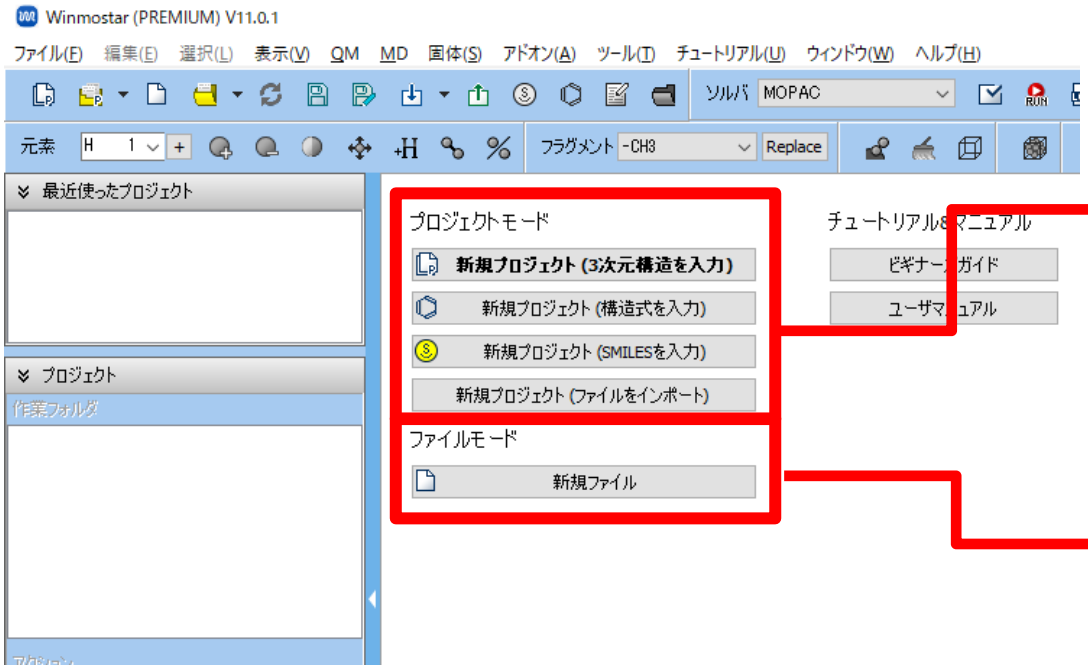
$E_{A+B}[B]$:モノマーA及びBの基底関数を使ったBのエネルギー

- Gaussianのエネルギー及び構造最適化計算では、１つの入力ファイルで一連の計算を行いBSSEを算出します。

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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。

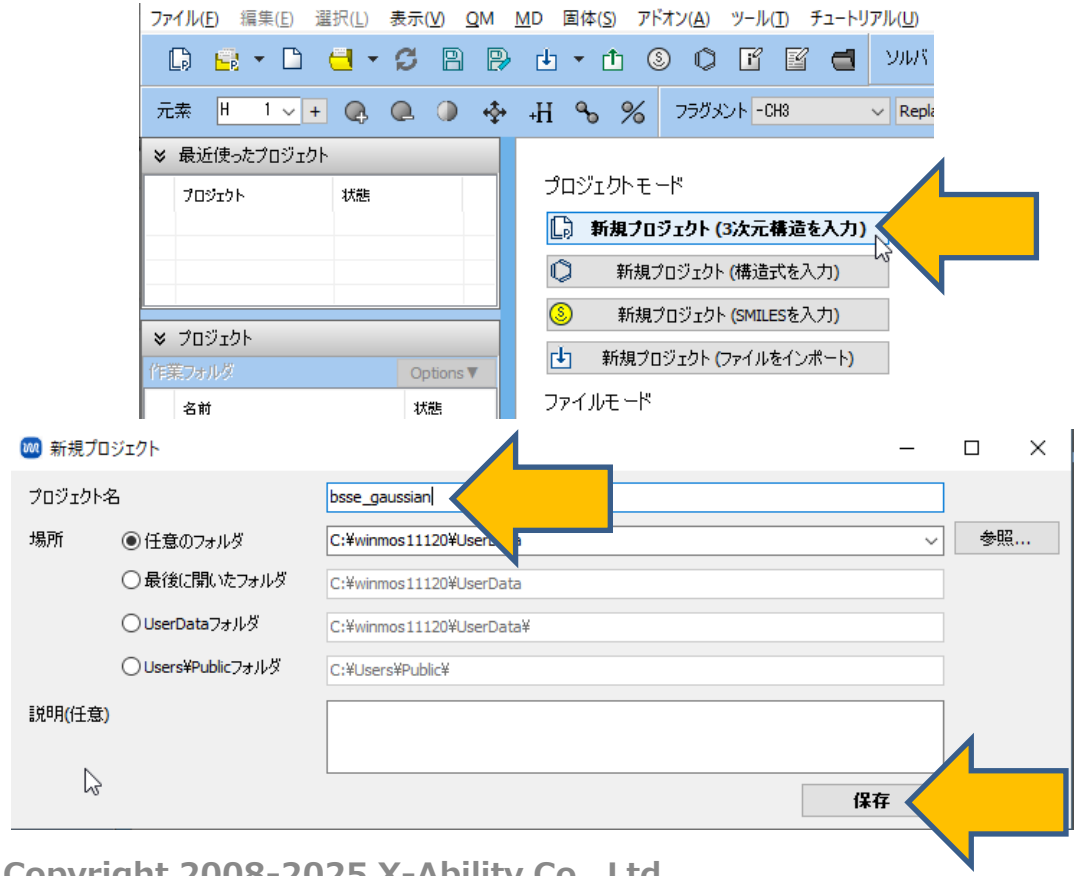
ファイルモード
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

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。

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

I. 系のモデリング

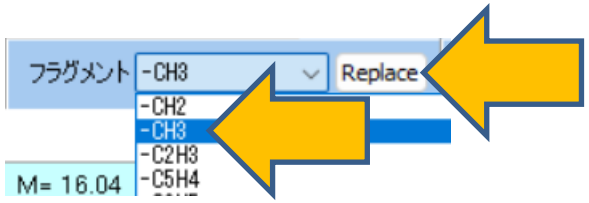
1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト（3次元構造を入力）**をクリックします。（すでに起動している場合は**ファイル｜新規プロジェクト**をクリックします。）
2. **プロジェクト名**に「bsse_gaussian」と入力し**保存**をクリックします。

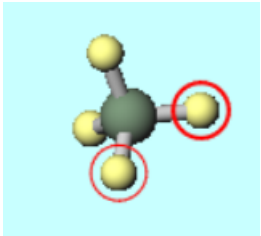


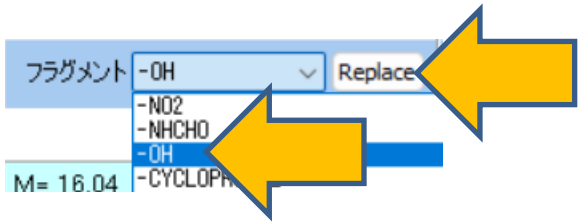
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

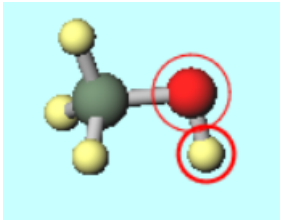
I. 系のモデリング

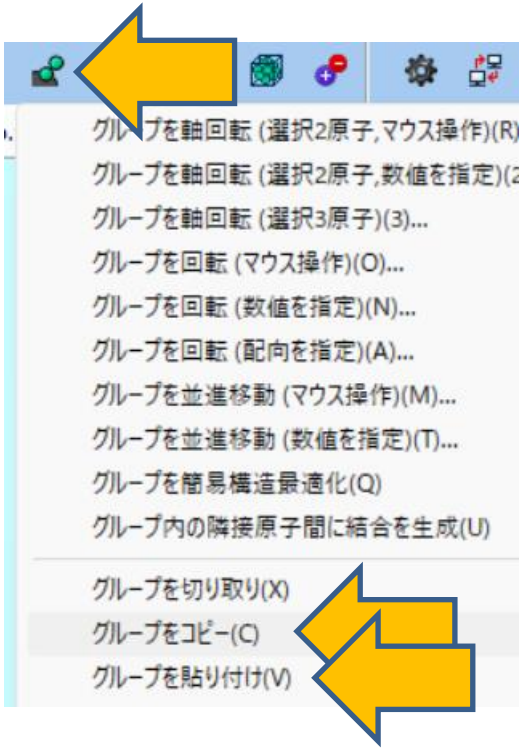
1. **フラグメントを選択**から**-CH3**を選択し、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、メタン分子を作成します。
2. **フラグメントを選択**から**-OH**を選択し、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、メタノール分子を作成します。
3. **グループ編集｜グループをコピー**をクリックし、続いて**グループ編集｜グループを貼り付け**をクリックします。







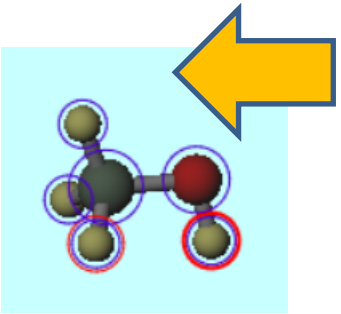


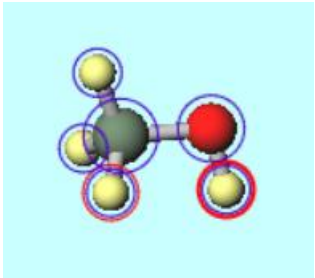


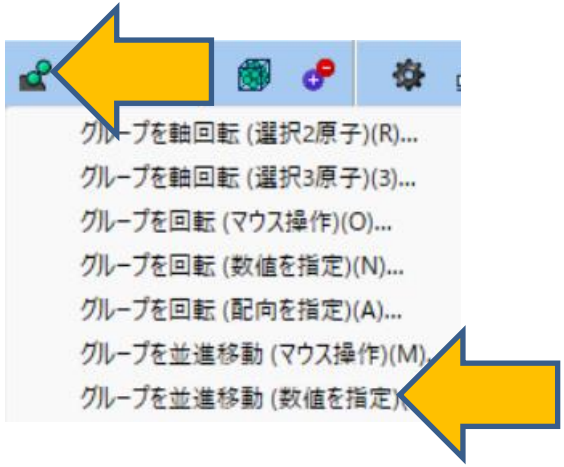
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

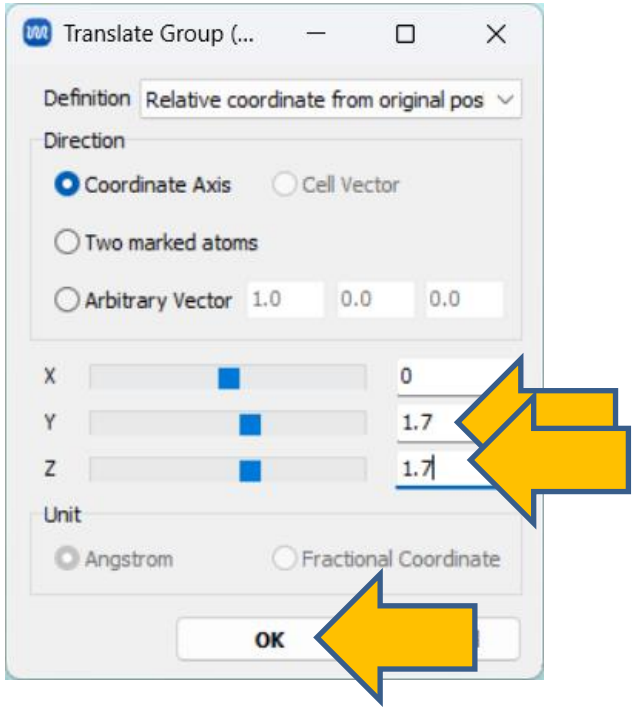
I.　系のモデリング

1. メタノール分子が表示されている分子表示エリア（水色のエリア）をクリックすると、コピー元の分子と同じ場所にコピーされた分子だけがグループ選択された状態で貼り付けられます。
2. **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。
3. yの枠に「**1.7**」、zの枠に「**1.7**」を入力して、**OK**ボタンをクリックします。グループ選択された原子全てがy及びz方向に1.7 Å 移動します。





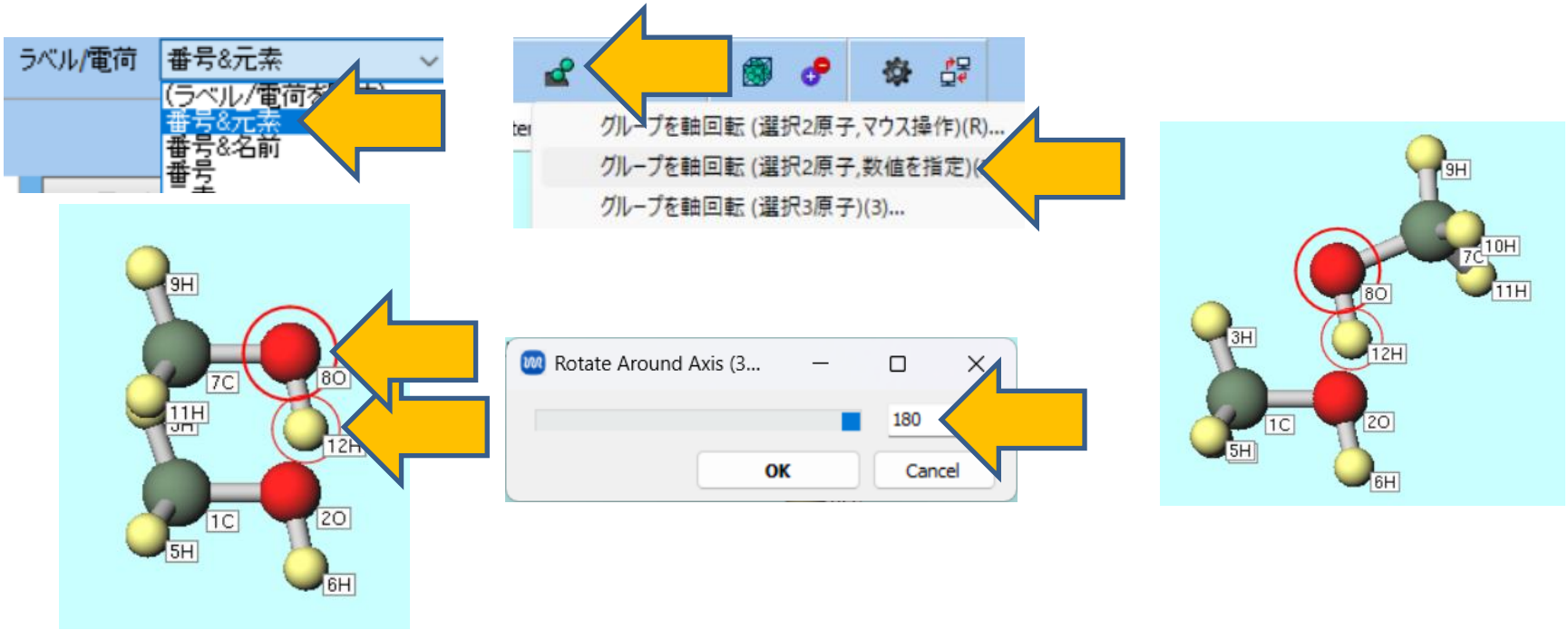




Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

I.　系のモデリング

1. **選択｜グループ選択を解除**をクリックします。
2. **ラベル電荷**を**番号&元素**に変更します。
3. **12H**、**8O**の順に原子をクリックします。
4. **グループ編集｜グループを軸回転（選択2原子,数値を指定）**をクリックします。
5. **Rotate Around Axis**ウィンドウの数値枠に「**180**」を記入して**OK**ボタンをクリックします。

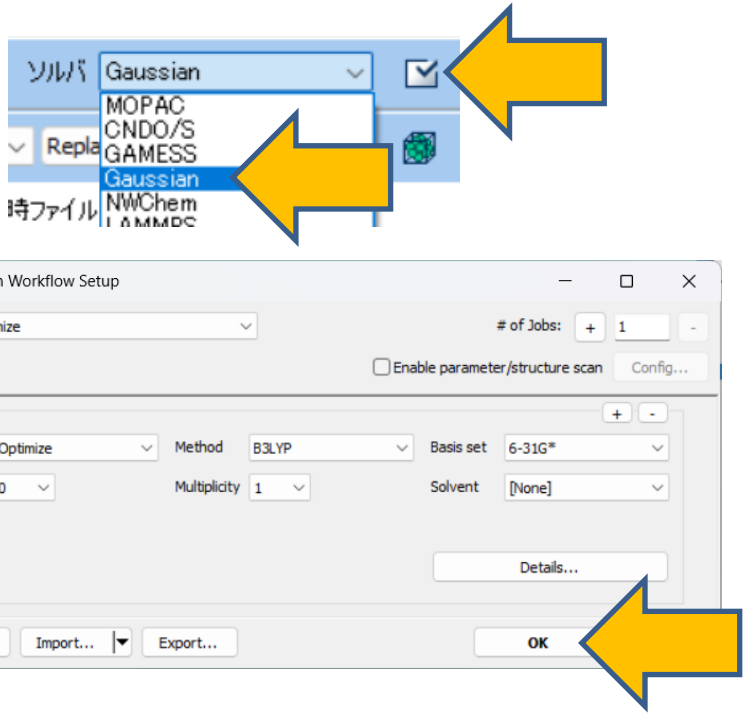


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行（BSSE補正無し構造最適化）

（BSSE補正無しの構造とエネルギーが不要な場合は次のページに進んでください）

1. **ソルバを選択**メニューで**Gaussian**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. **Gaussian 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**ウィンドウで適宜設定し**実行**をクリックします。

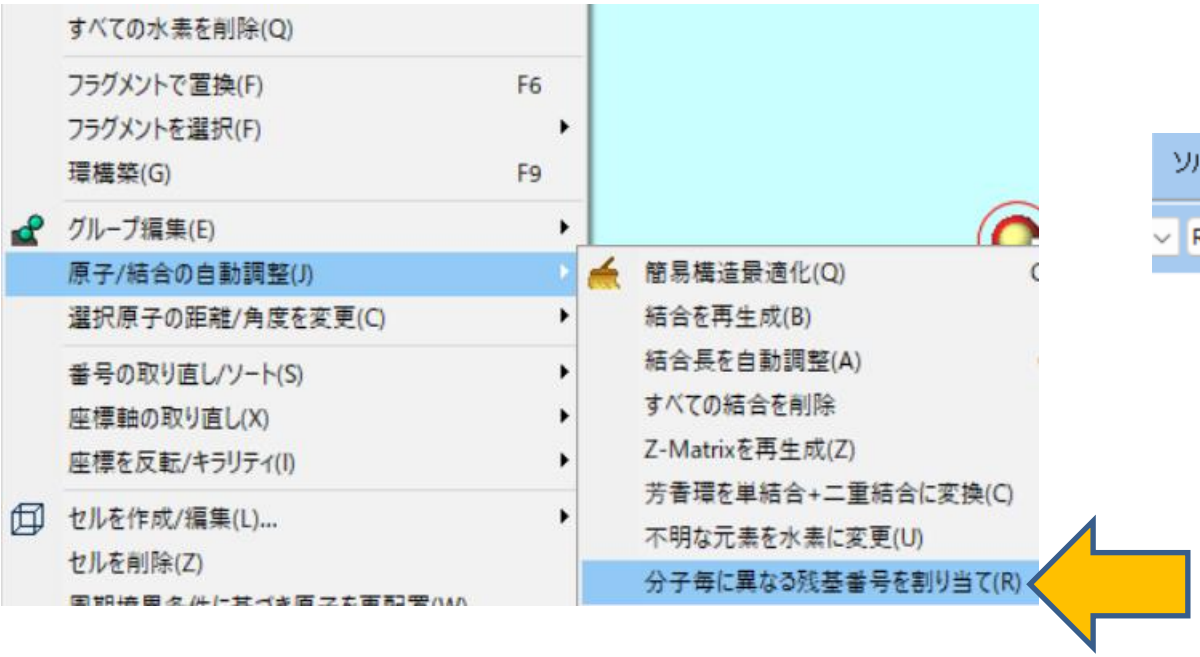


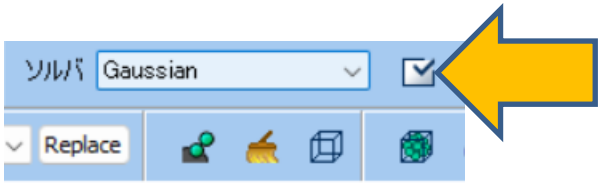
Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.計算の実行（BSSE補正有り構造最適化）

前ページのwork1の計算が終了していなくても操作可能です。

1. **編集｜原子/結合の自動調整｜分子毎に異なる残基番号を割り当て**をクリックします。
2. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。
3. 「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。

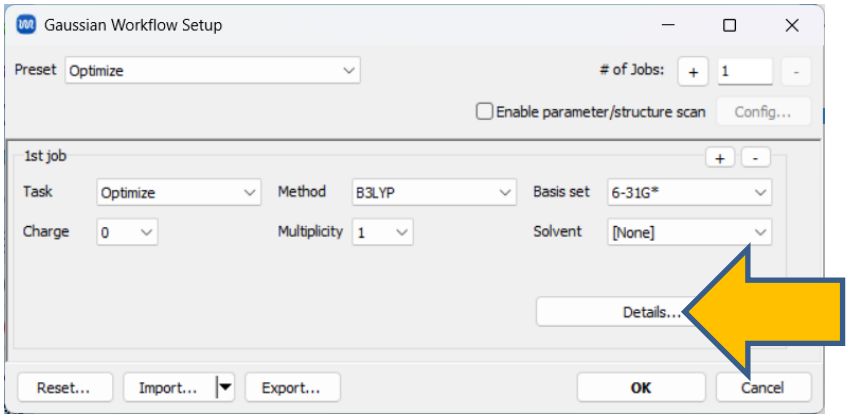


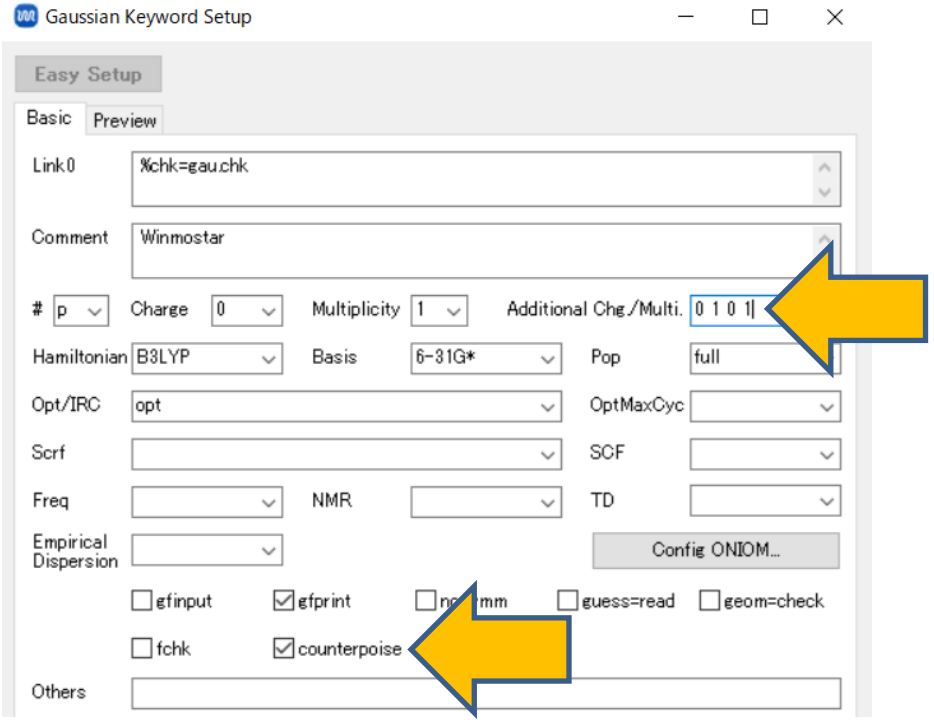


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

III.計算の実行（BSSE補正有り構造最適化）

1. **Gaussian Workflow Setup**ウィンドウの**Details**をクリックします。
2. **Gaussian Keyword Setup**ウィンドウの**counterpoise**にチェックを入れ、**Additional Chg./Multi.**に「0 1 0 1」（スペース区切りで入力、各フラグメントの電荷が0でスピン多重度が1という意味）と入力し**OK**をクリックします。
3. **Gaussian Workflow Setup**ウィンドウで**OK**ボタンをクリックします。
4. **ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定し**実行**をクリックします。



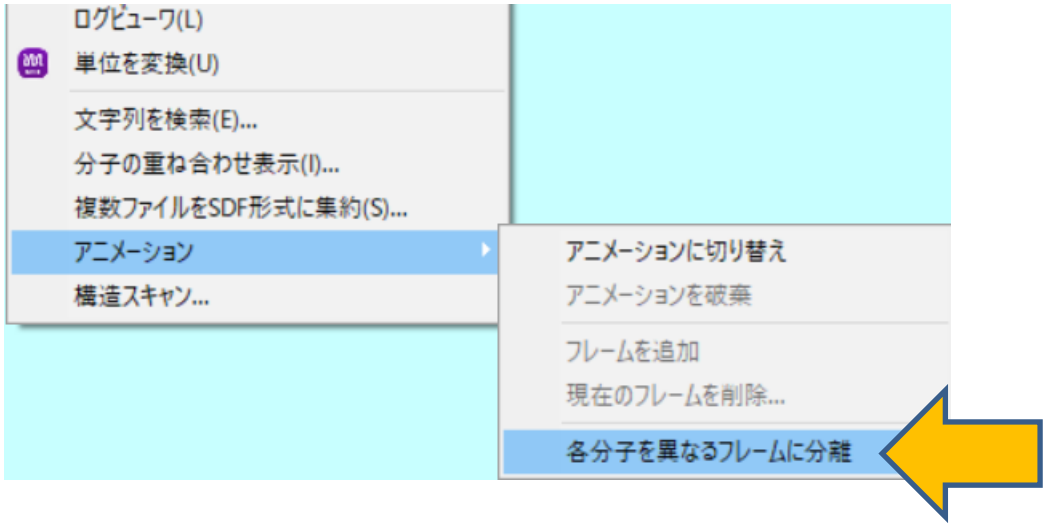


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

IV.計算の実行（各分子の構造最適化）

work1及びwork2の計算が終了していなくても操作可能です。

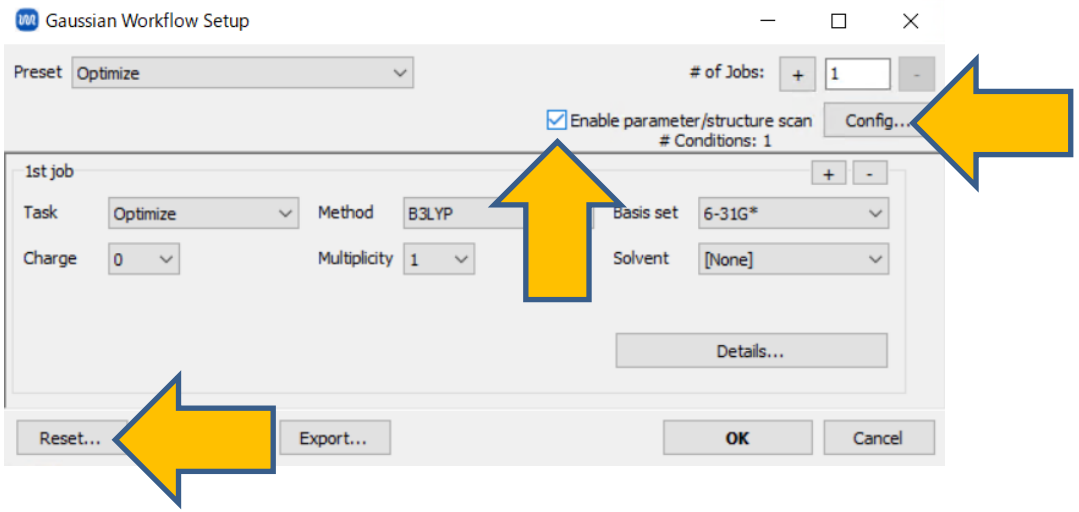
1. **ツール｜アニメーション｜各分子を異なるフレームに分離**をクリックします。「Are you sure you want to switch to animation?」と表示されたら**はい**をクリックします。
2. **ワークフロー設定**ボタンをクリックします。「継続ジョブを実行しますか？」と表示されたら**いいえ**をクリックします。

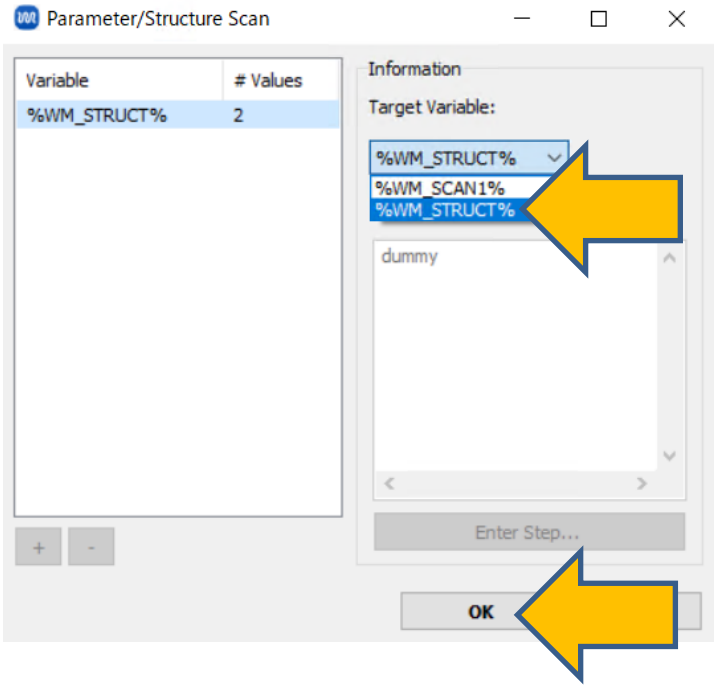


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

IV.計算の実行（各分子の構造最適化）

1. **Gaussian Workflow Setup**ウィンドウの**Reset**ボタンをクリックします。　「変更を破棄してリセットしますか？」と表示されたら**はい**をクリックします。
2. **Enable parameter/structure scan**にチェックを入れ**Config**ボタンをクリックします。
3. **Parameter/Structure Scan**ウィンドウの**Target Variable**を「**%WM_STRUCT%**」に変更し**OK**をクリックします。
4. **Gaussian Workflow Setup**ウィンドウで**OK**ボタンをクリックします。
5. **ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定し**実行**をクリックします。作業フォルダが2つ作成され、それぞれの分子の計算が始まります。

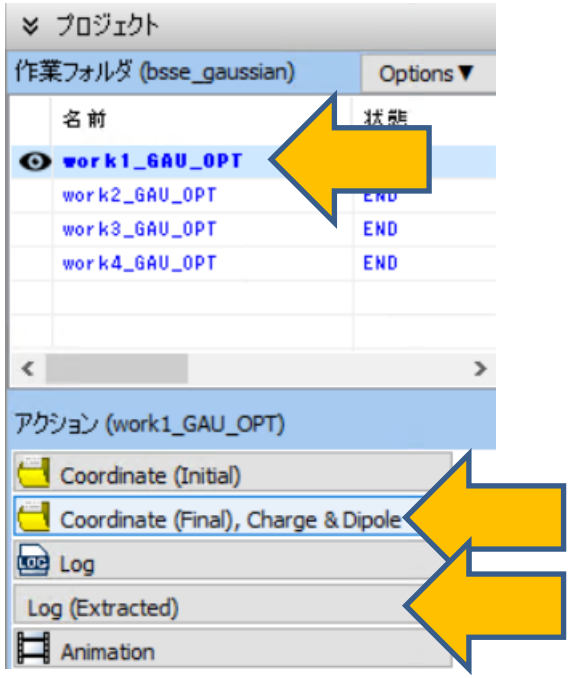


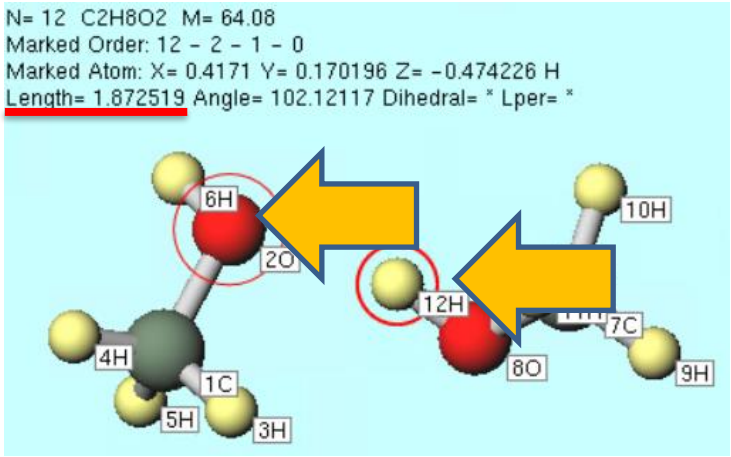


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

V. 結果解析（BSSE補正無し構造最適化）

1. 全ての計算が終了して**work4_GAU_OPT**の作業フォルダの状態が**END**に変化した後、**work1_GAU_OPT**をクリックして、**アクション**の**Coordinate (Final), Charge & Dipole**をクリックします。
2. 水素結合を作っている酸素と水素原子、**2O**と**12H**の原子をクリックして、Lengthの値1.872Åを確認します。
3. **Log (Extracted)**ボタンをクリックします。最後のSCF Done:の行の値(-231.4404Hartree)が2量体のエネルギーです。



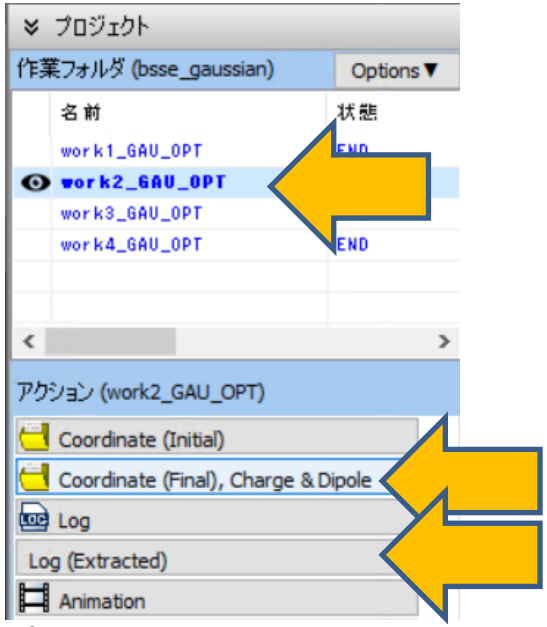


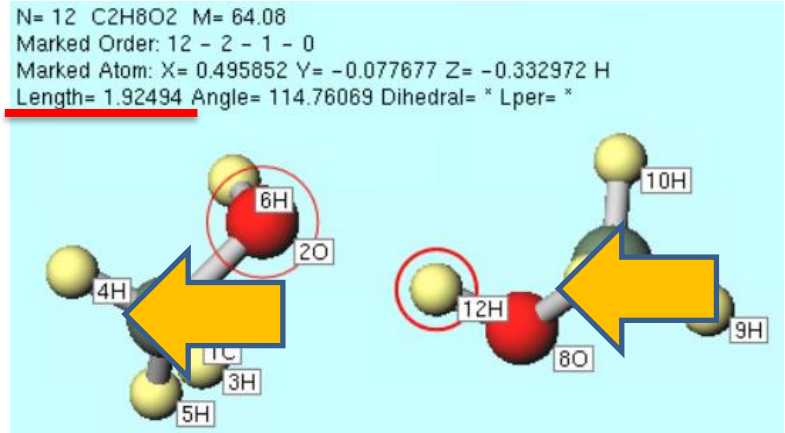

```
SCF Done:  E(RB3LYP) =  -231.440467057     A.U. after    7 cycles
Maximum Force            0.000041     0.000450     YES
RMS     Force            0.000008     0.000300     YES
Maximum Displacement     0.001756     0.001800     YES
RMS     Displacement     0.000676     0.001200     YES
Optimization completed.
```


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

VI.結果解析（BSSE補正有り構造最適化）

1. **work2_GAU_OPT**をクリックして、**アクション**の**Coordinate (Final), Charge & Dipole**をクリックします。
2. **2O**と**12H**の原子をクリックして、Lengthの値1.924 Åを確認します。Counterpoise法により２量体の過剰な安定化エネルギーが補正され、BSSE補正無しに比べて酸素-水素間距離が長くなっています。
3. **アクション**の**Log (Extracted)** をクリックします。最後のCounterpoise corrected energyの行の値(-231.4374Hartree)がBSSE補正された2量体のエネルギーです。



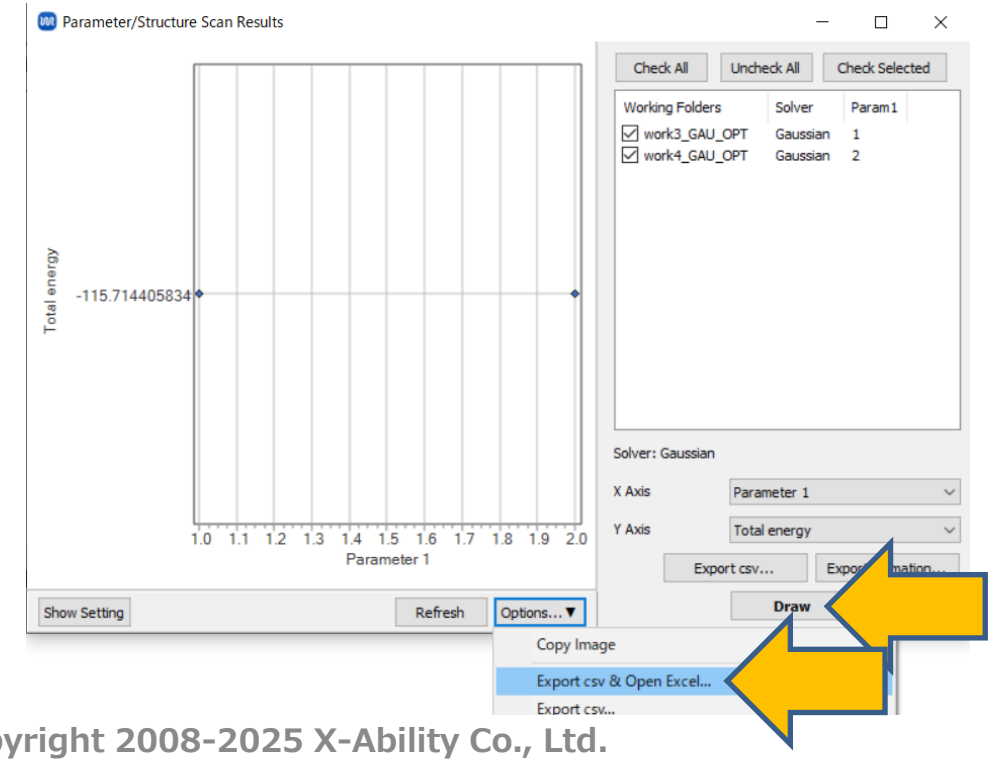



```
SCF Done:  E(RB3LYP) =  -231.440269024     A.U. after    6 cycles
SCF Done:  E(RB3LYP) =  -115.716482149     A.U. after    6 cycles
SCF Done:  E(RB3LYP) =  -115.714934848     A.U. after    6 cycles
SCF Done:  E(RB3LYP) =  -115.714330859     A.U. after    5 cycles
SCF Done:  E(RB3LYP) =  -115.714295007     A.U. after    5 cycles
Counterpoise corrected energy =    -231.437477892612
Maximum Force            0.000002      0.000450      YES
```


Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

VII.結果解析（各分子の構造最適化）

1. **ファイル｜プロジェクト｜パラメータ/構造スキャン結果表示**をクリックします。
2. **Draw**ボタンをクリックします。
3. グラフ右下で**Options｜Export csv & Open Excel**をクリックします。保存ダイアログが表示されたら**保存**をクリックします。
4. Excel上でB列の値（-115.7144）が各分子のエネルギー値です。



Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

VIII.結果解析（相互作用エネルギー）

相互作用エネルギーは、次式により算出します。

相互作用エネルギー $= E[\mathrm{A}+\mathrm{B}] - E[\mathrm{A}] - E[\mathrm{B}]$

$E[\mathrm{A}+\mathrm{B}]$: 2量体のエネルギー

$E[\mathrm{A}]$: 分子Aのエネルギー

$E[\mathrm{A}+\mathrm{B}]$: 分子Bのエネルギー

BSSE補正無しでは、

-231.4404 – (-115.7144) – (-115.7144) = -0.0116 Hartree = -7.3 kcal/mol

BSSE補正有りでは、

-231.4374 – (-115.7144) – (-115.7144) = -0.0086 Hartree = -5.4 kcal/mol

となり、Counterpoise法により2量体の過剰な安定化エネルギーが補正され、相互作用エネルギーも小さくなっています。

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

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

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.