### **M** winmostar チュートリアル

# Gaussian アッベ数

V11.12.1

2025年5月20日 株式会社クロスアビリティ

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



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
  - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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

PMMA(ポリメチルメタクリレート)を対象として、特定の波長の屈折率及び屈折率の波長による変化を評価する指標であるアッベ数を計算します。

末端を水素原子で修飾したモノマーについてwB97XD/6-31G\*レベルで構造最適化計算を行い、 指定した波長における分極率をwB97XD/6-311G\*\*レベルで計算します。得られた分極率をロー レンツ・ローレンツ(Lorentz-Lorenz)の式に代入して屈折率を算出します。

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} \frac{\rho N_{\rm A}}{M} \alpha$$

n: 屈折率、α: 分極率、ρ: 密度、M: 分子量、N<sub>A</sub>: アボガドロ数です。得られた屈折率から次の定義のアッベ数を算出します。

$$\nu_{\rm D} = \frac{n_{\rm D} - 1}{n_{\rm F} - n_{\rm C}}$$

n<sub>D</sub>: 589.3 nmに対する屈折率、n<sub>F</sub>: 486.1 nmに対する屈折率、n<sub>C</sub>: 656.3 nmに対する屈折率です。



注意点:分極率の計算においては、計算方法(汎関数)、基底関数の選び方により値が大きく変 わる場合があります。

### 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。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1



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「abbe\_gaussian」と入力し保存をクリックします。



#### I. 系のモデリング

メインウィンドウ右上の**ラベル/電荷**メニューから**番号&元素**を選択し、分子表示エリアで各原子の名前を表示します。





# I. 系のモデリング

- 1. フラグメントを選択が-CH3の状態で、その右にあるReplaceボタンを2回クリックします。
- 2.7Hの水素原子をクリックして、Replaceボタンを1回クリックし、プロパンを作成します。
- 3.8Hの水素原子をクリックして、フラグメントを選択を-COOHに変更して、Replaceボタンを1 回クリックします。
- 4. フラグメントを選択を-CH3に変更して、Replaceボタンを1回クリックして、末端を水素修飾 したPMMAモノマー分子を作成します。分子表示エリア上部に表示されているこの分子の分子量 (102.13)を確認します。



## II. 計算の実行

- 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MethodからwB97XDを選択します。
- 3. # of Jobsの+ボタンをクリックします。



🔞 Gaussian Workflow Setup				—	
Preset Optimize	``````````````````````````````````````	(modified)		# of Jobs: +	<
		Ē	nable paramete	er/structure sca	n g
1st job					+ -
Task Optimize	<ul> <li>Method</li> </ul>	wB97XD v	Basis set	6-31G*	~
Charge 0 🗸	Multiplicity	HF B3LYP B3LYP-D3 B3PW91 PBEPBE	t	[None]	~
		PBE1PBE wB97X wB97XD M06		Details	
Reset	Export	M062X cam-B3LYP MP2		ок	Cancel

# II. 計算の実行

- **1. 2nd job**のSame conditions as previous jobのチェックを外して、TaskをEnergyに、 Basisを6-311G\*\*に変更して、Detailsボタンをクリックします。
- **2.** Gaussian Keyword Setup ウィンドウで、 Others に polar CPHF=RdFreq を、 Subsectionsに656.3nm, 589.3nm, 486.1nmを記入してOKボタンをクリックします。
- 3. Gaussian Workflow SetupウィンドウでOKボタンをクリックして、ジョブの設定ウィンド ウで使用計算機に応じて# of Threads/MPI Procを設定して、実行ボタンをクリックします。

Coursian Workflow Satura		Gaussian Keyword Setup – L X
		Easy Setup
Preset Optimize $\checkmark$ (modified)	# of Jobs: + 2 -	Basic Braview
	Enable parameter/structure scan Config	Dasic Preview
1st job	+ -	Link0 %chk=gau.chk
Task Optimize ~ Method wB97XD	✓ Basis set 6-31G* ✓	Comment Winmostar
Charge 0 $\checkmark$ Multiplicity 1 $\checkmark$	Solvent [None]	
		# p 🗸 Charge 0 🗸 Multiplicity 1 🗸 Additional Chg/Multi.
	Details	Hamiltonian wB97XD V Basis 6-311G** V Pop full V
		Opt/IRC V OptMaxCyc V
2nd job	+	Scrf SCF V
Task Energy wB97XD	✓ Basis set 6-311G**	Freq NMR V TD V
Charge 0 V Micty 1 V	Solvent [None]	Empirical Config ONIOM
	Details	gfinput gfprint nosymm guess=read geom=check
		□ fchk
Reset Import ▼ Export	ОК Cancel	Others polar CPHF=RdFreq
		Subsection 656.3nm, 589.3nm, 486.1nm

## III.結果解析

- 全ての計算が終了してwork2\_GAU\_ENERGYの作業フォルダの状態がENDに変化した後、 work2\_GAU\_ENERGYをクリックして、アクションのLogをクリックします。
- それぞれの波長の分極率のx,y,z軸方向の平均値(Alpha(-w:w)のisoの値)を確認します。単位 変換が容易なため10\*\*-24 esu単位の値を採用します。



Extracted Log (C:¥winmos11¥UserData¥abbe\_gaussian.wmpjdata¥work2\_GAU\_ENERGY¥gau.log)

Alpha(0;0):			
	(au)	(10**-24 esu)	(10 <b>**</b> -40 SI)
iso	0.617085D+02	0.914425D+01	0.101744D+02
aniso	0.166344D+02	0.246496D+01	0.274264D+01
XX	0.712899D+02	0.105641D+02	0.117541D+02
yx	-0.103901D+01	-0.153965D+00	-0.171309D+00
уу	0.614206D+02	0.910160D+01	0.101269D+02
ZX	-0.114793D+00	-0.170106D-01	-0.189268D-01
zy	-0.141894D+01	-0.210266D+00	-0.233952D+00
ZZ	0.524149D+02	0.776709D+01	0.864205D+01
Alpha(-w;w)	w= 656.3nm:		
	(au)	(10 <b>**</b> -24 esu)	(10 <b>**</b> –40 SI)
iso	0.627061D+02	0.929209D+01	0.103388D+02
aniso	0.171048D+02	0.2534670+01	0.282020D+01
XX	0.725823D+02	0.107556D+02	0.119672D+02
yx	-0.105850D+01	-0.156853D+00	-0.174523D+00
уу	0.623709D+02	0.924242D+01	0.102836D+02
ZX	-0.975480D-01	-0.144551D-01	-0.160835D-01
zy	-0.143322D+01	-0.212382D+00	-0.236306D+00
ZZ	0.531652D+02	0.787826D+01	0.876575D+01
Alpha(-w;w)	w= 589.3nm:		
	(au)	(10 <b>**</b> -24 esu)	(10**-40 SI)
iso	0.629533D+02	0.932871D+01	0.103796D+02
aniso	0.172225D+02	0.2552110+01	0.283960D+01
XX	0.729032D+02	0.108031D+02	0.120201D+02
yx	-0.106335D+01	-0.157572D+00	-0.175322D+00
уу	0.626060D+02	0.927725D+01	0.103223D+02
ZX	-0.929438D-01	-0.137728D-01	-0.153244D-01
zy	-0.143677D+01	-0.212908D+00	-0.236892D+00
ZZ	0.533505D+02	0.790573D+01	0.879631D+01
Alpha(-w;w)	w= 486.1nm:		
	(au)	(10 <b>**</b> -24 esu)	(10 <b>**</b> -40 SI)
iso	0.635649D+02	0.941935D+01	0.104804D+02
aniso	U.175157D+02	0.2595560+01	U.288795D+01
XX	0.736988D+02	0.109210D+02	0.121513D+02

#### III.結果解析

ローレンツ・ローレンツ(Lorentz-Lorenz)の式に代入して屈折率を算出します。

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} \frac{\rho N_{\rm A}}{M} \alpha$$

n: 屈折率、 $\alpha$ : 分極率、 $\rho$ : 密度、M: 分子量、 $N_A$ : アボガドロ数(6.0221x10<sup>23</sup>)です。密度は実験値の1.18 g/cm<sup>3[1]</sup>、分子量は分子表示エリア上部に表示されているモノマーの値(102.13)を採用します。もし密度の実験値が無い場合は、分子動力学計算などから算出します。

波長 (nm)	<b>分</b> 極率 (esu)	屈折率
656.3	9.29209 x 10 <sup>-24</sup>	1.454029
589.3	9.32871 x 10 <sup>-24</sup>	1.456102
486.1	9.41935 x 10 <sup>-24</sup>	1.461245

得られた屈折率から次の定義のアッベ数を算出します。 $n_{\rm D}$ :589.3 nmに対する屈折率、 $n_{\rm F}$ :486.1 nmに対する屈折率、 $n_{\rm C}$ :656.3 nmに対する屈折率です。

$$v_{\rm D} = \frac{n_{\rm D} - 1}{n_{\rm F} - n_{\rm C}}$$

代入すると、63.2となり実験値59.4<sup>[2]</sup>をおおむね再現しています。

[1] J. Biomed. Mater. Res., 52 210-218 (2000). [2] Applied Optics, 54, F139 (2015).



• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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