M winmostar チュートリアル

Gaussian 複屈折

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

ポリエチレンを対象として、屈折率の異方性の指標である複屈折の値を算出します。

末端を水素原子で修飾した2量体についてwB97XD/6-31G*レベルで構造最適化計算を行い、D線の589.3nmにおける分極率をwB97XD/6-311G**レベルで計算します。得られたx、y、z軸成分の分極率の平均値をLorentz-Lorenzの式に代入して屈折率を算出します。

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

n: 屈折率、 α : 分極率、 ρ : 密度、M: 分子量、 N_A : アボガドロ数です。続いてVuksの式より、x、y、 z軸成分の屈折率 $n_i(i = x, y, z)$ をそれぞれの成分の分極率 α_i から算出します。

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

ポリマーの主軸方向の屈折率をn//、それに直交する2軸の屈折率の平均値をn」とすると、複屈折の値は次式の通りになります。



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「birefringence_gaussian」と入力し保存をクリックします。



I. 系のモデリング

- 1. 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。
- 2. 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4回クリックします。
- 3. 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(58.12)を確認します。



II.計算の実行(構造最適化計算)

- 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



1 +

> + -

> > \sim

 \sim

of Jobs:

[None]

Details...

OK

Basis set 6-31G*

 \times

III.結果解析(構造最適化計算)

- 1. 計算が終了して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 Coordinate(Final), Charge & Dipoleをクリックします。
- 2. 主鎖の1C、8Cの炭素原子をクリックします。
- 3. 選択 | すべてをグループ選択を選択します。
- 4. 編集 | グループ編集 | グループを回転(配向を指定)を選択します。警告が表示されたら、は いをクリックします。



III.結果解析(構造最適化計算)

1. Rotate group to では Align 2 marked atoms to target direction、 Target Direction/PlaneではZ Axis/XY Planeを選択して、OKボタンをクリックします。主鎖の 1C、8Cの炭素原子の方向がz軸と同一になるよう分子が回転します。



IV.計算の実行(分極率計算)

- 1. **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」を選択します。
- **2. Gaussian Workflow Setup**ウィンドウで**Task**から**Energy、Basis set**から**6-311G****を選択して、**Details**ボタンをクリックします。
- **3. Gaussian Keyword Setup**ウィンドウで、nosymmにチェックを入れ、Othersにpolar CPHF=RdFreqを、Subsectionに589.3nmを記入してOKボタンをクリックします。
- **4. Gaussian Workflow Setup**ウィンドウで**OK**ボタンをクリックして、**ジョブの設定**ウィンドウで**実行**ボタンをクリックします。

M Gaussian Keyword Setup

🔞 Gaussian Workflow Setup	– 🗆 X	Easy Setup Basic Preview
Preset Optimize ~ (modified)	# of Jobs: + 1 -	Link0 Kohk=gauchk
	inable parameter/structure scan Config	Comment Winmostar
Task Energy wB97XD	✓ Basis set 6-311G**	# p -> Charge 0 -> Multiplicity 1 -> Additional Chg/Multi.
Charge 0 V Multiplicity 1 V	Solvent [None]	Hamiltonian wB97XD v Basis 6-311G** v Pop full v Opt/IRC v OptMaxCyc v
	Details	Scrf SCF Freq NMR TD
Reset Import 🔻 Export	ок Cancel	Empirical Config ONIOM
		Chers polar CPHF=RdFreq Subsection 589.3nm
🛚 winmostar Copyrigh	t 2008-2025 X-Ability Co.,	Ltd.

- 🗆 🗙

V. 結果解析(分極率計算)

- 1. 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、作業 フォルダの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。
- 2. 2回目のDipole polarizability, Alpha (input orientation).の後のAlpha(-w;w) w= 589.3nm:に書かれている(10**-24 esu)列のiso(x,y,zの平均)、xx、yy、zz行の値 (0.730432D+01、0.689458D+01、0.677917D+01、0.823921D+01)を確認します。



VI.結果解析(屈折率)

Lorentz–Lorenzの式からx,y,z軸成分平均の屈折率n、Vuksの式からx,y,z軸成分それぞれの屈折率 n_i (i = x, y, z)を算出します。

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} \frac{\rho N_A}{M} \alpha, \qquad \qquad \frac{n_i^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} \frac{\rho N_A}{M} \alpha_i$$

 α : 分極率、 ρ : 密度、M: 分子量、 N_A : アボガドロ数(6.0221x10²³)です。密度は実験値の0.961 g/cm^{3[1]}、分子量は分子表示エリア上部に表示されている2量体の値(58.12)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。

	分 極率 (esu)	屈折率
x,y,z平均	7.30432 x 10 ⁻²⁴	1.521325
x	6.89458 x 10 ⁻²⁴	1.496895
У	6.77917 x 10 ⁻²⁴	1.489942
z (n _{//})	8.23921 x 10 ⁻²⁴	1.575647

得られた屈折率から複屈折の値を算出します。

$$\Delta n = n_{//} - n_{\perp} = n_z - \frac{n_x + n_y}{2} = 0.082$$

0.082となり実験値0.044^[2]をおおむね再現しています。



• 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<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。

以上