

 winmostar チュートリアル

Gaussian VCDスペクトル

V11.13.1

2025年9月1日

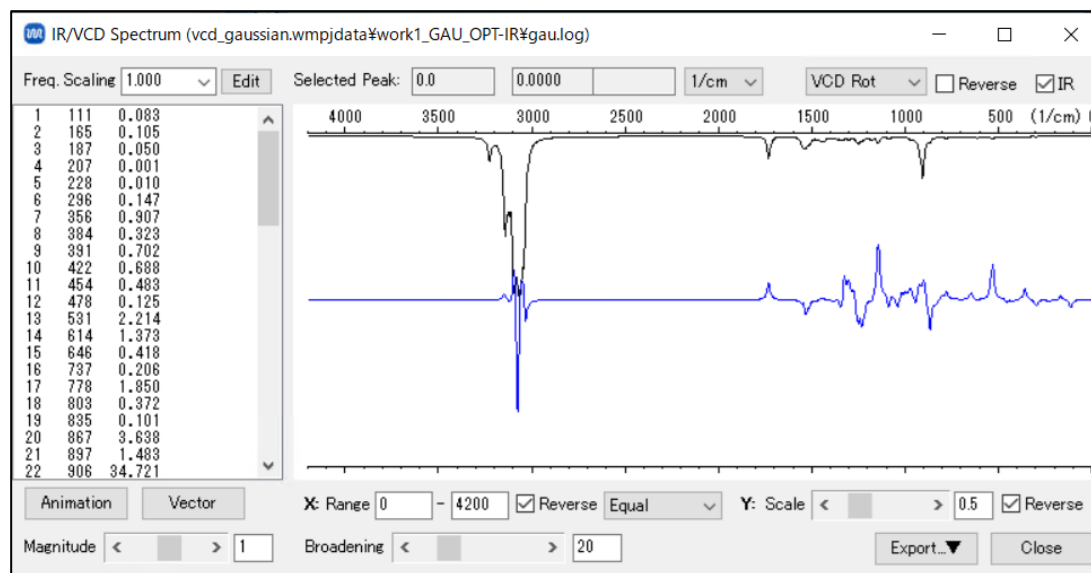
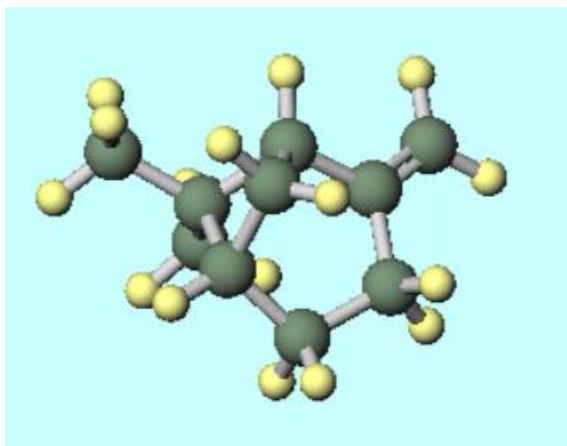
株式会社クロスアビリティ

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

(-)- β -ピネン分子を対象として、キラル分子の立体構造や絶対配置を解析するための赤外分光法の一つであるVCD（振動円二色性、Vibrational Circular Dichroism）スペクトルを計算します。B3LYP/6-31G*レベルで構造最適化とVCDを含めた振動計算を行います。



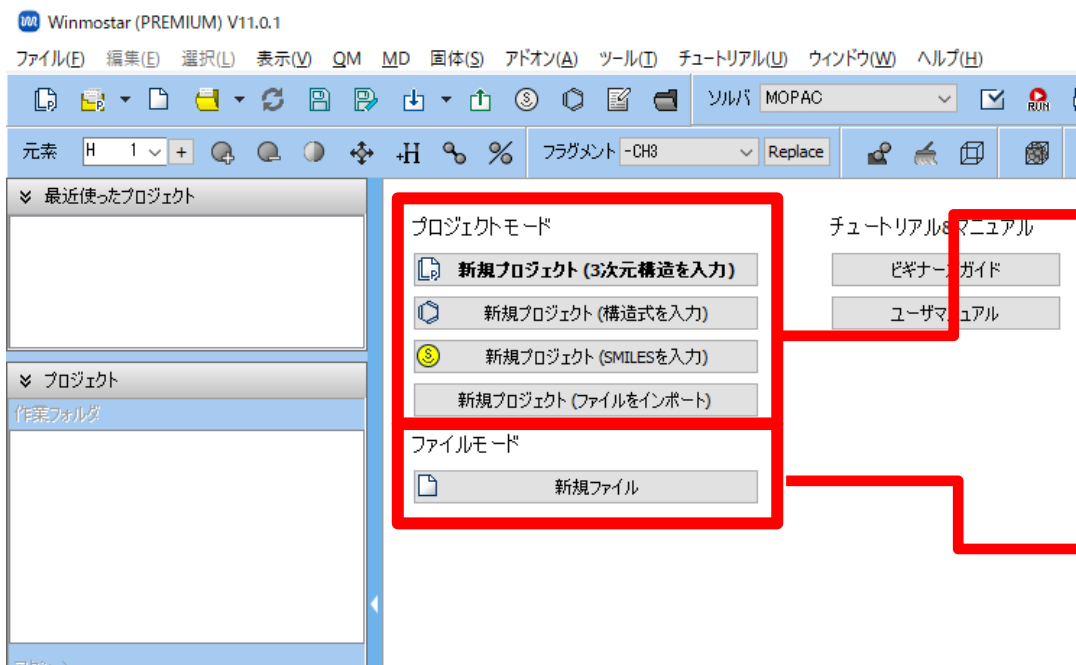
注意点：計算方法（汎関数）、基底関数の選び方により値が大きく変わる場合があります。

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。



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。

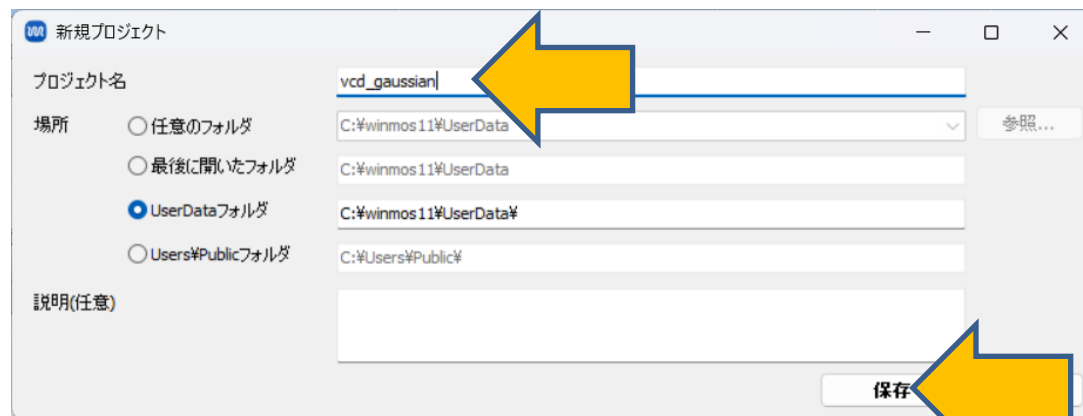
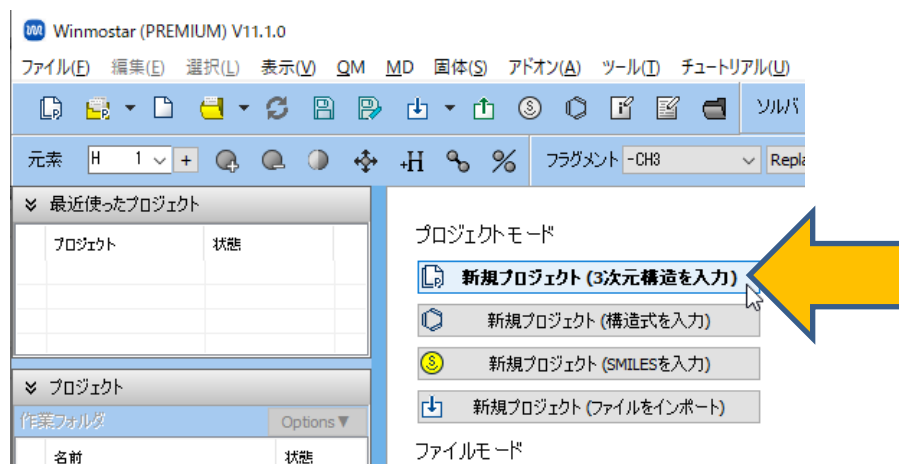
ファイルモード

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。

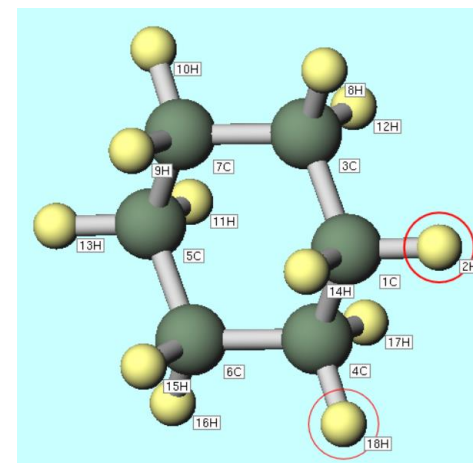
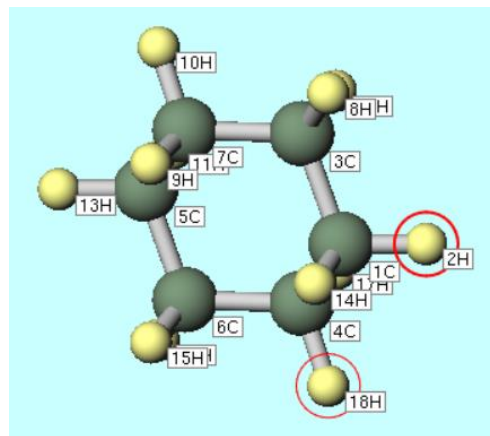
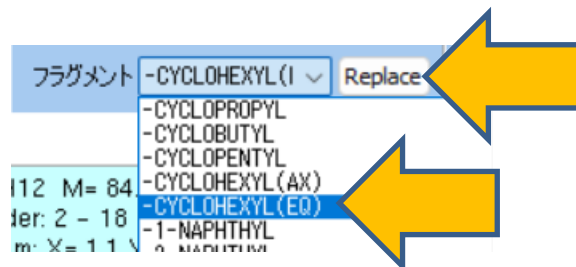
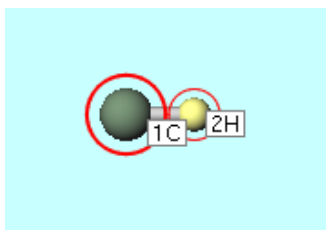
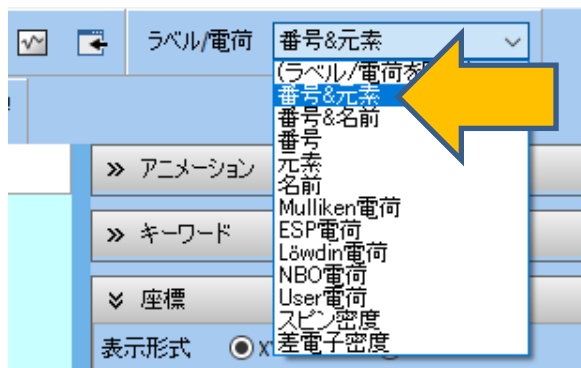
I. 系のモデリング

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**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「vcd_gaussian」と入力し**保存**をクリックします。



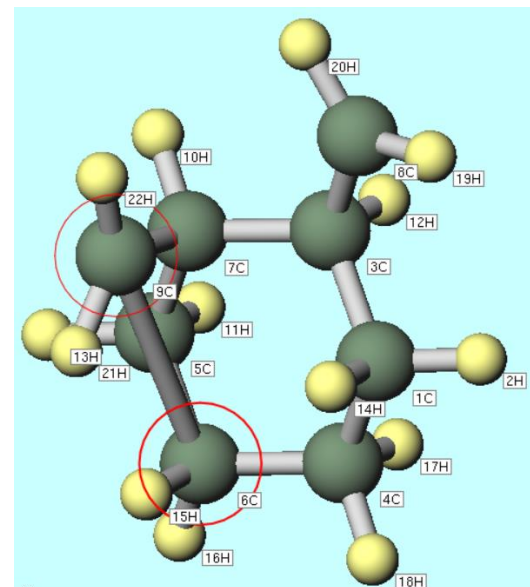
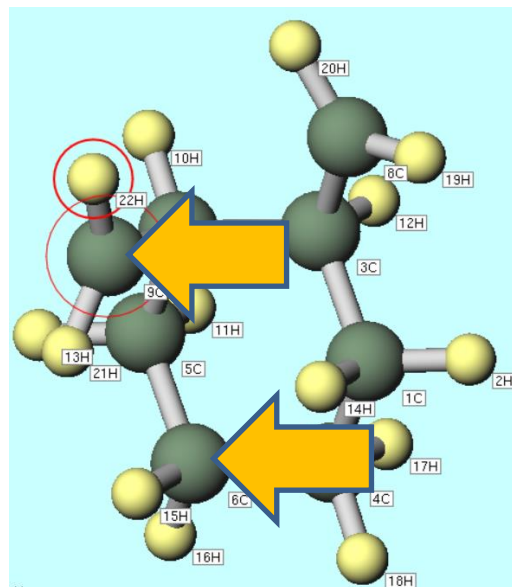
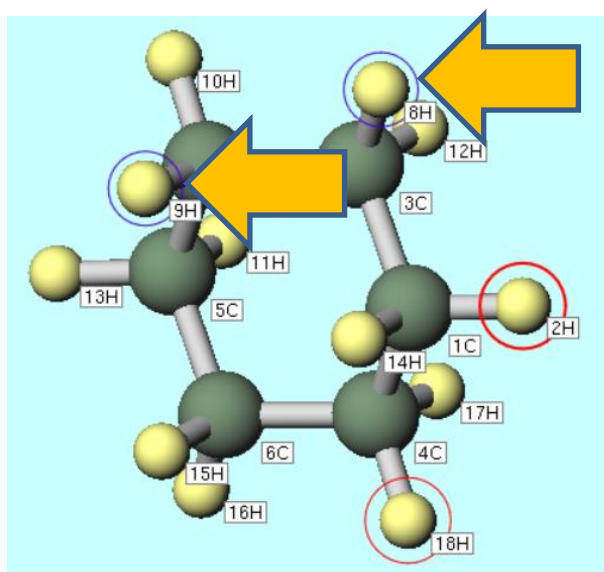
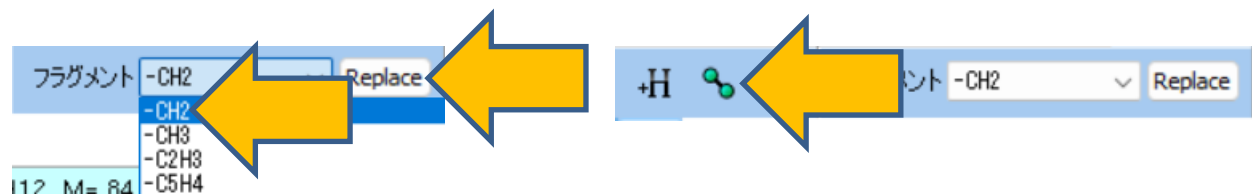
I. 系のモデリング

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**を**-CYCLOHEXYL(EQ)**に変更して、その右にある**Replace**ボタンをクリックします。
3. 分子の近くをクリックしたままマウスを動かして、全ての水素原子が見えるように分子を回転させます。



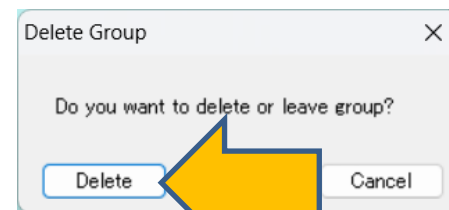
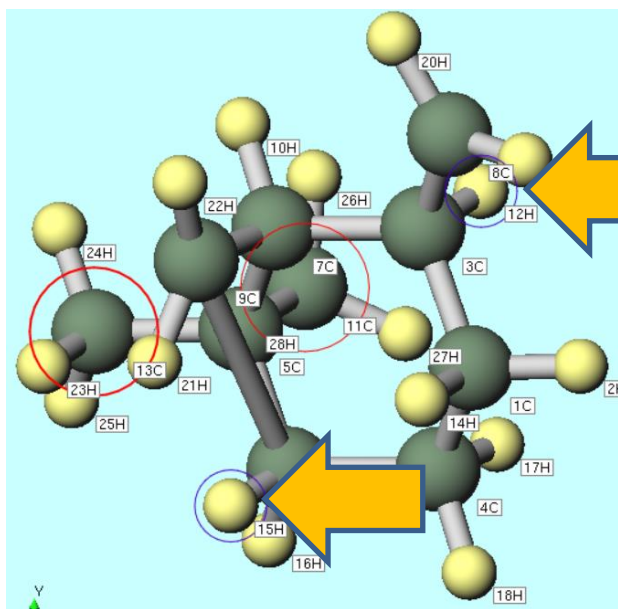
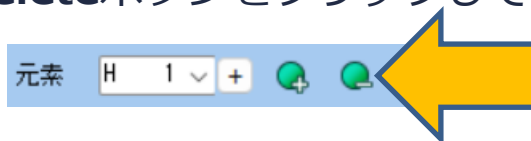
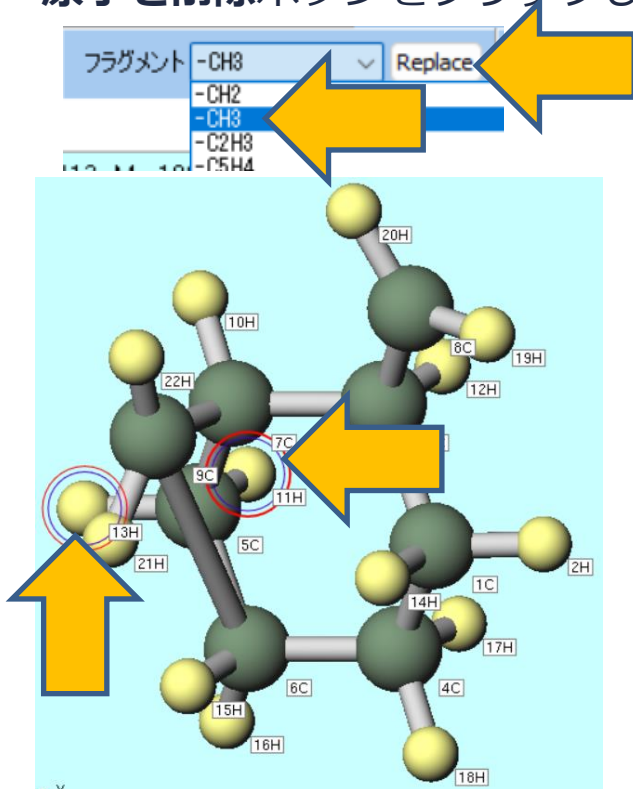
I. 系のモデリング

1. **Ctrl**ボタンを押したまま**8H**と**9H**をクリックしてグループ選択（青丸が付加）をした状態で、**フラグメントを選択**を**-CH₂**に変更して、その右にある**Replace**ボタンをクリックします。
2. 分子の近くをクリックしてグループ選択を解除（青丸が消去）します。
3. **6C**、**9C**をクリックして、**結合を付加/変更**ボタンをクリックします。



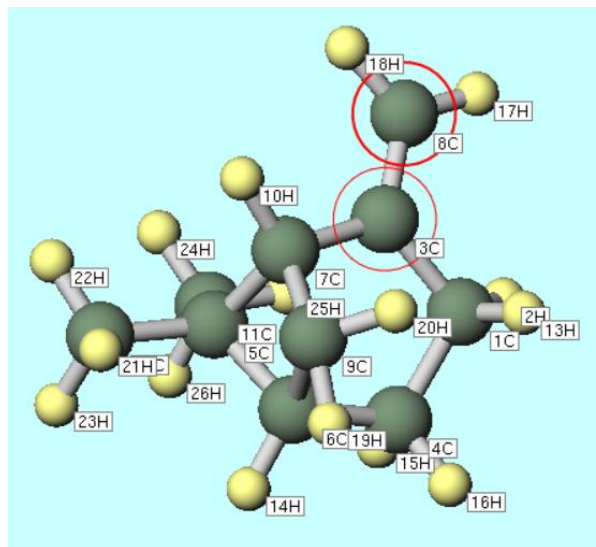
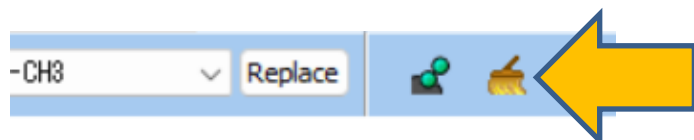
I. 系のモデリング

1. **Ctrl**ボタンを押したまま**11H**と**13H**をクリックしてグループ選択（青丸が付加）をした状態で、**フラグメントを選択**を**-CH3**に変更して、その右にある**Replace**ボタンをクリックします
2. 分子の近くをクリックしてグループ選択を解除（青丸が消去）します。
3. **Ctrl**ボタンを押したまま**12H**と**15H**をクリックしてグループ選択（青丸が付加）をした状態で、**原子を削除**ボタンをクリックして、**Delete**ボタンをクリックして、**(-)-β-ピレン**を作成します。



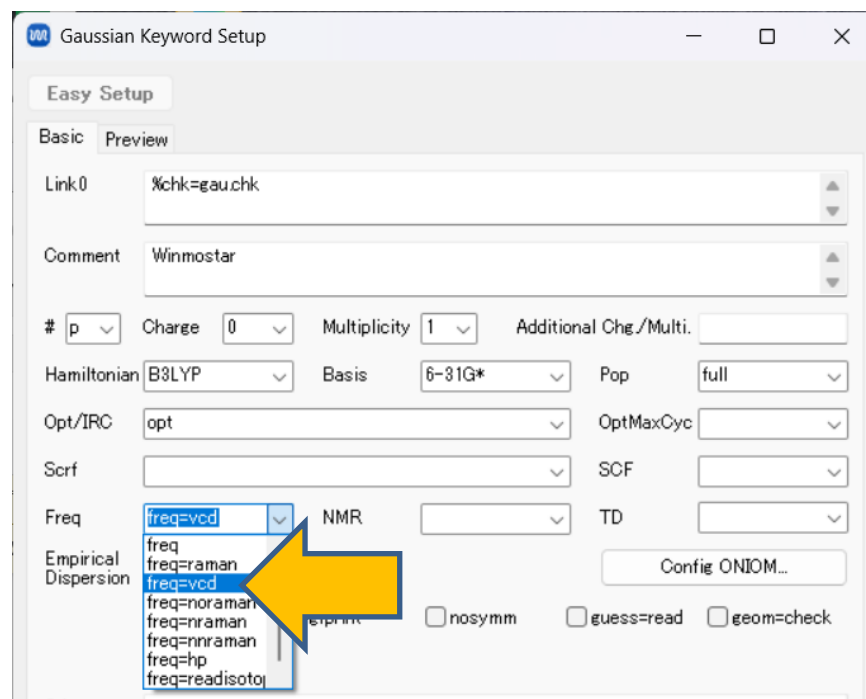
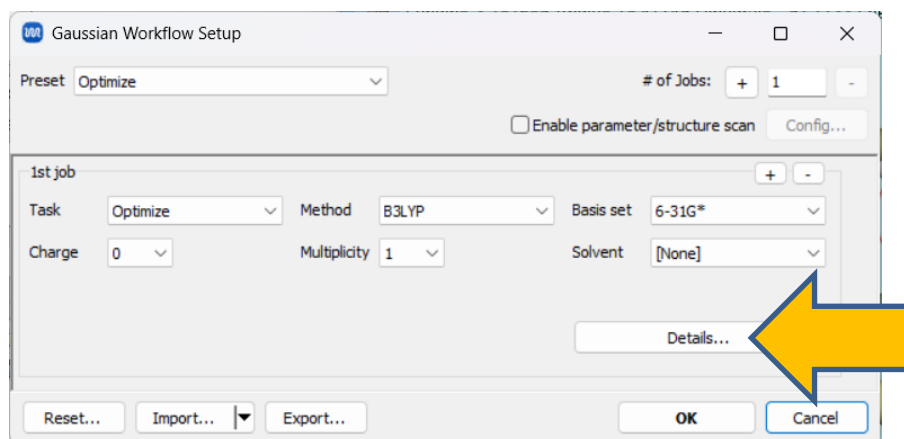
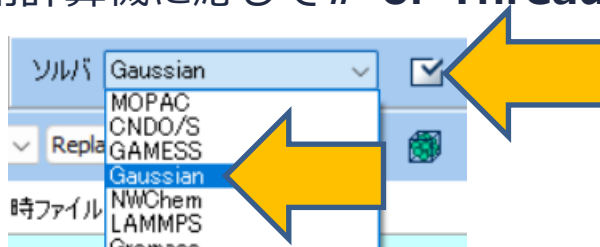
I. 系のモデリング

1. 簡易構造最適化ボタンをクリックして、構造を調整します。



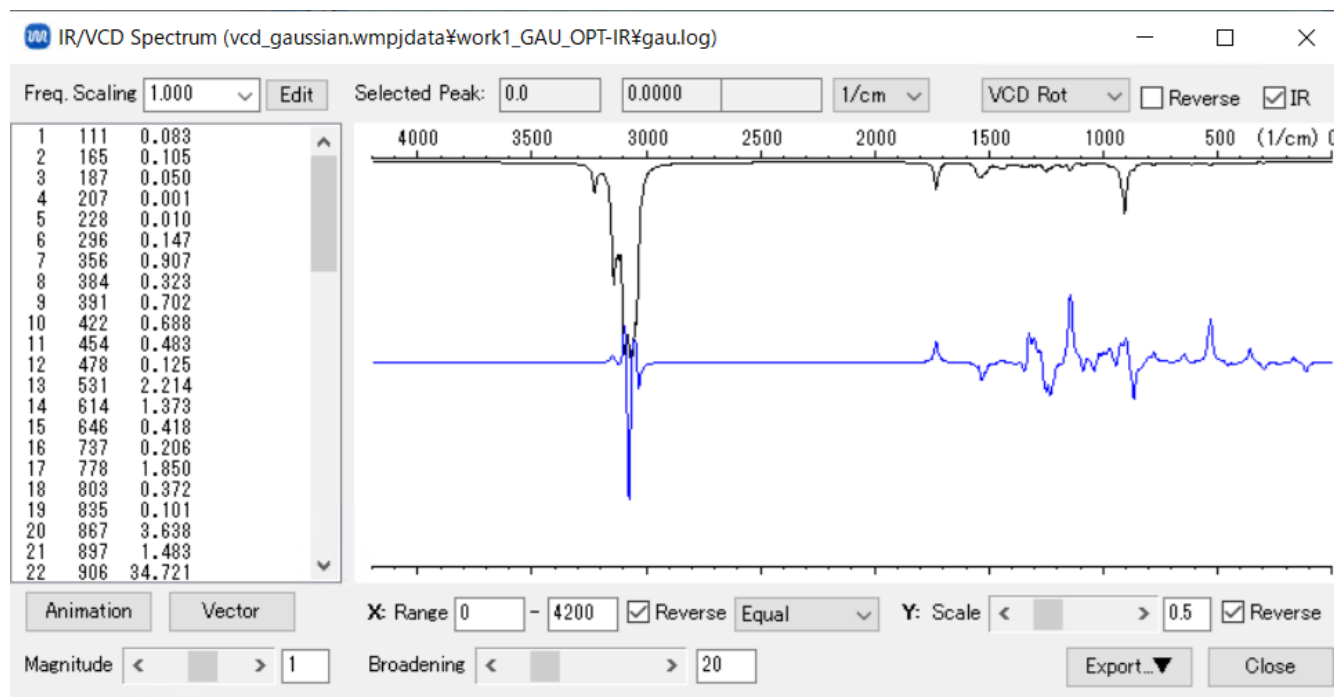
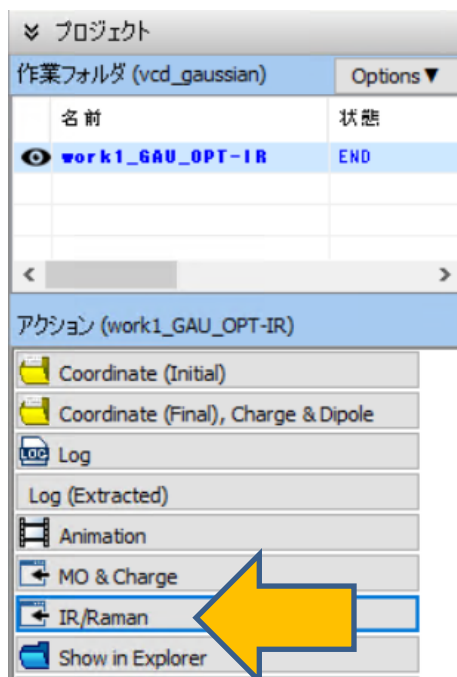
II. 計算の実行（構造最適化計算）

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**Details**ボタンをクリックします。
3. **Gaussian Keyword Setup**ウィンドウで**Freq**を**freq=vcd**に変更して**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



III.結果解析

1. 計算が終了してwork1_GAU_OPT-IRの作業フォルダの状態が**END**に変化した後、**アクション**の**IR/Raman**をクリックします。
2. **IR/VCDスペクトル**ウィンドウに黒線でIR、青線でVCDスペクトルが表示されます。



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