

 winmostar チュートリアル

# Gaussian

## 溶媒和自由エネルギー計算

V11.12.5

2025年9月29日 株式会社クロスアビリティ

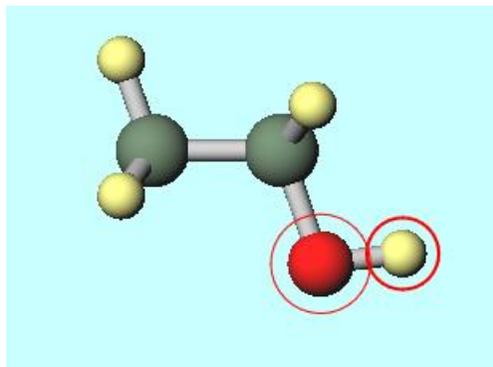
# 本書について

- 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

溶媒を水としてエタノール分子の溶媒和自由エネルギーを計算します。溶媒和自由エネルギーを再現するようにパラメータが設定されたSMD法を用いて、B3LYP/6-31G\*レベルで計算します。

原著論文[1]と同様に、まず真空中で構造最適化を行い、その構造でSMD法を追加した溶媒を考慮したエネルギー計算を行い、真空中と溶媒中のエネルギー差から溶媒和自由エネルギーを算出しました。



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

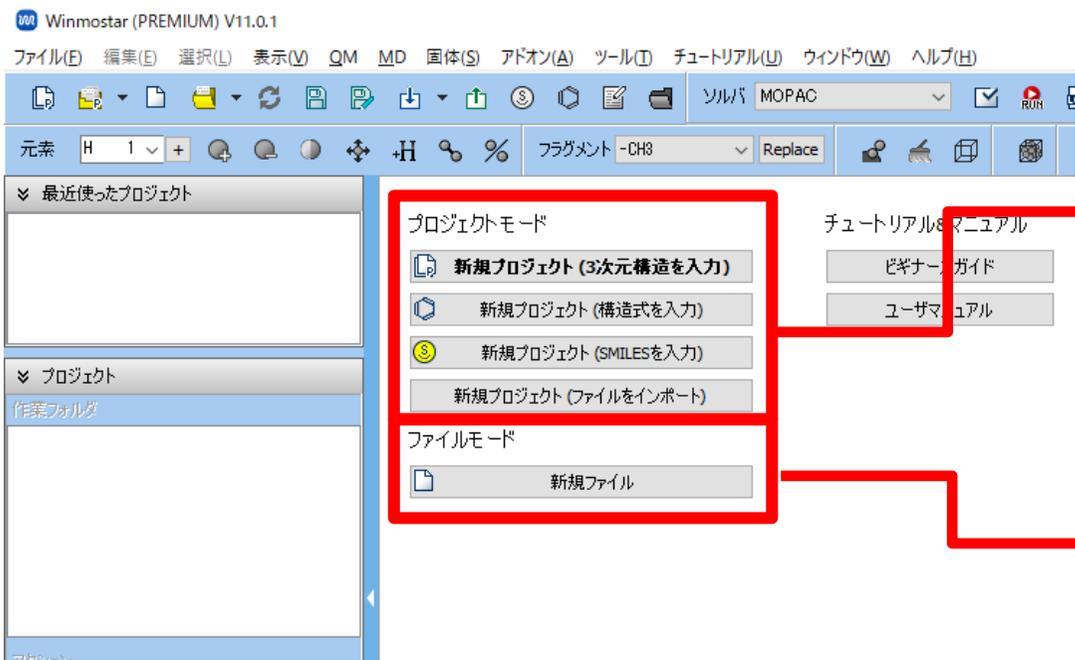
[1] J. Phys. Chem. B,, 113 (18), 2009, 6378.

# 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。

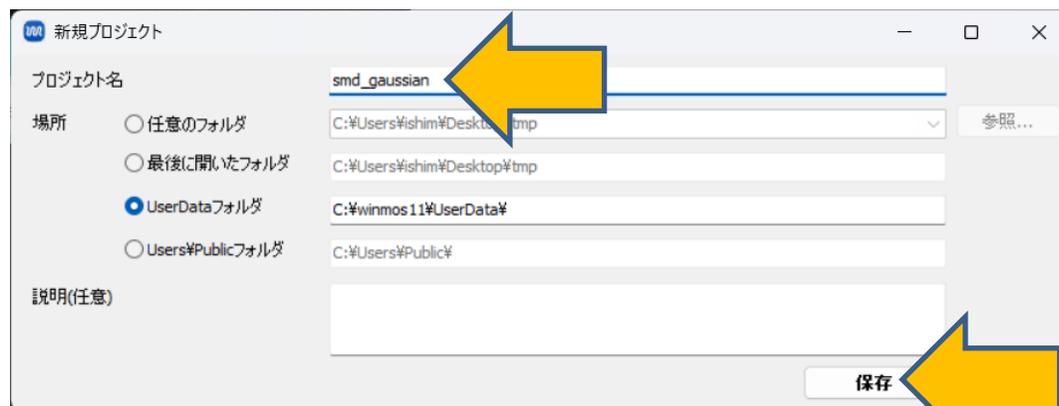
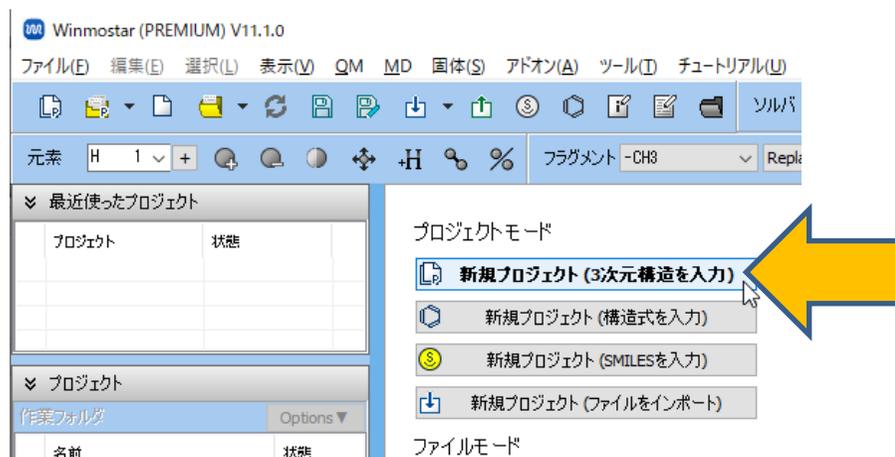
## ファイルモード

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。

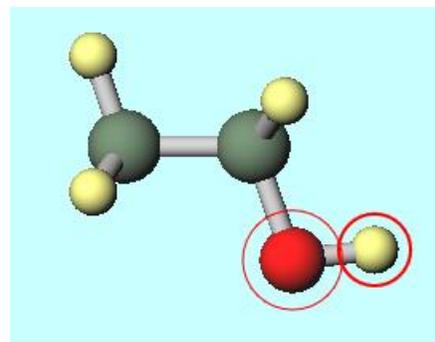
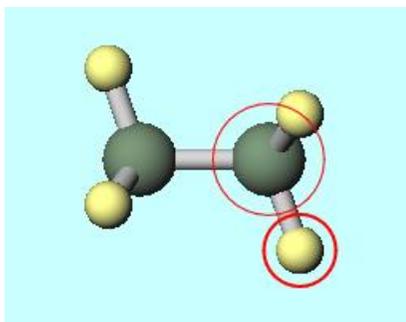
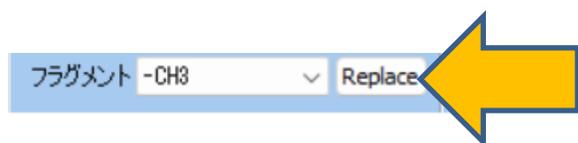
# I. 系のモデリング

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「smd\_gaussian」と入力し**保存**をクリックします。



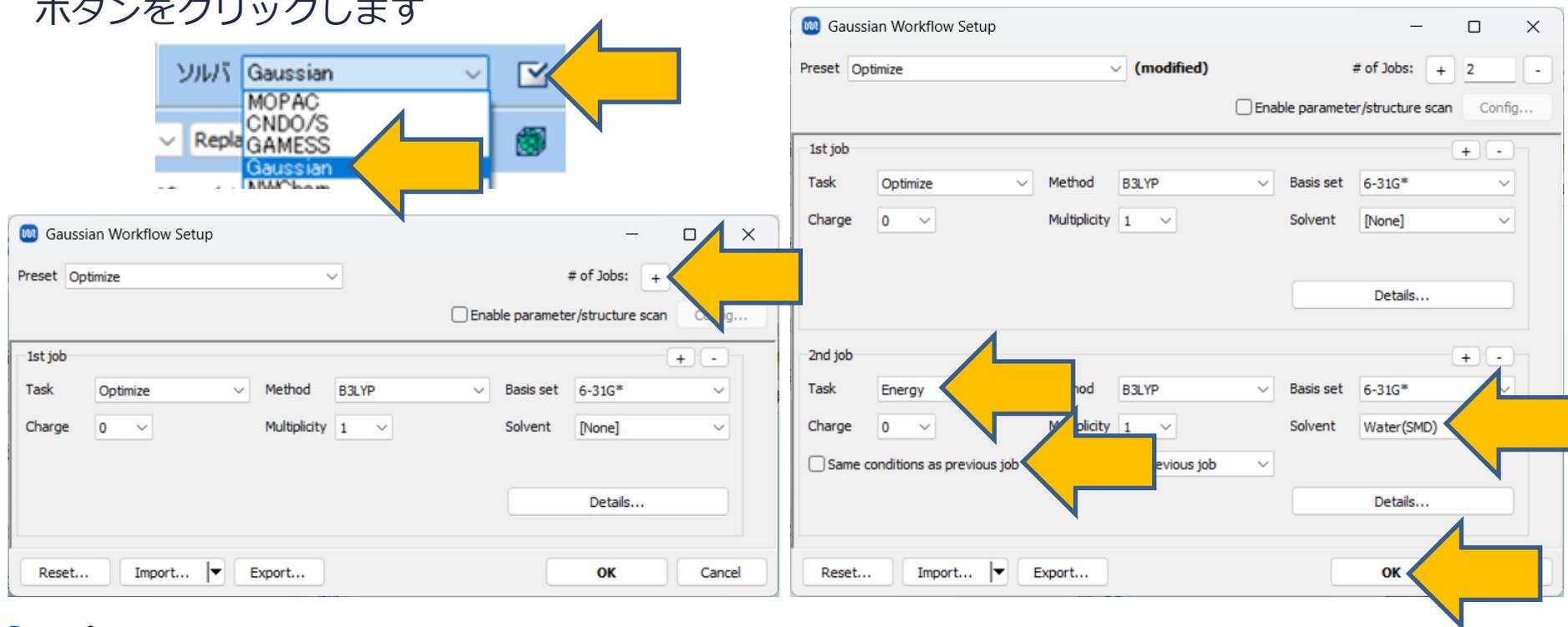
# I. 系のモデリング

1. フラグメントを選択はCH3のまま、その右にあるReplaceボタンを2回クリックします。
2. フラグメントを選択を-OHに変更して、その右にあるReplaceボタンを1回クリックします



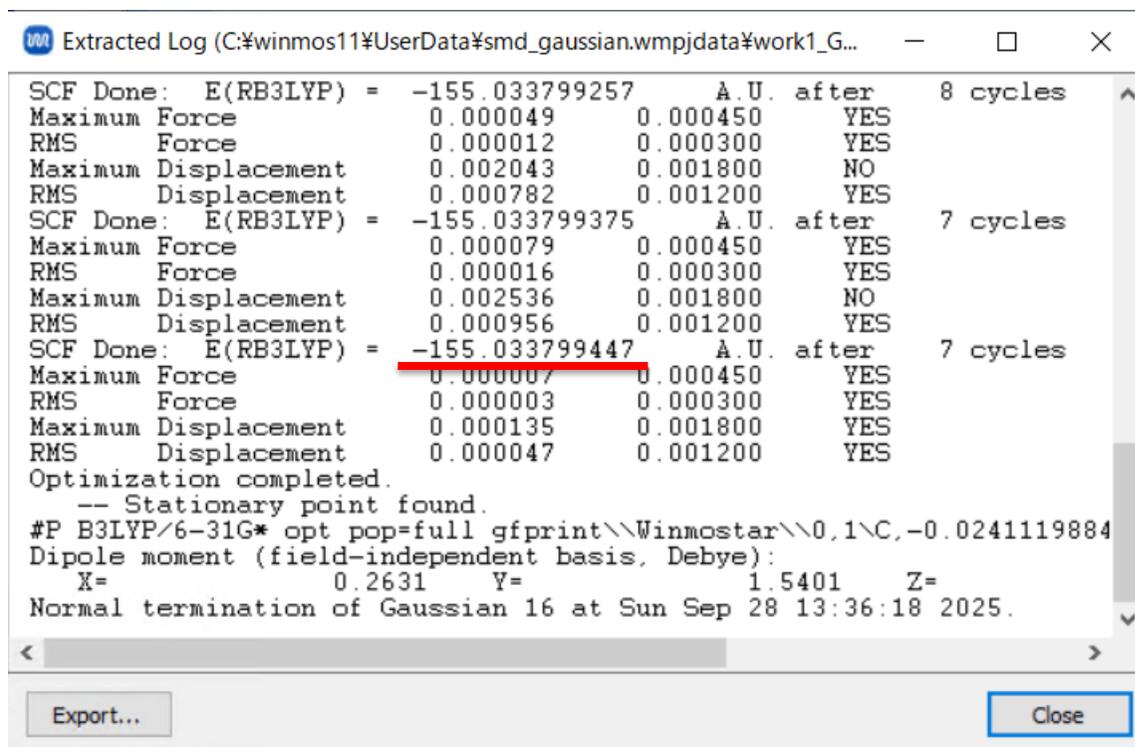
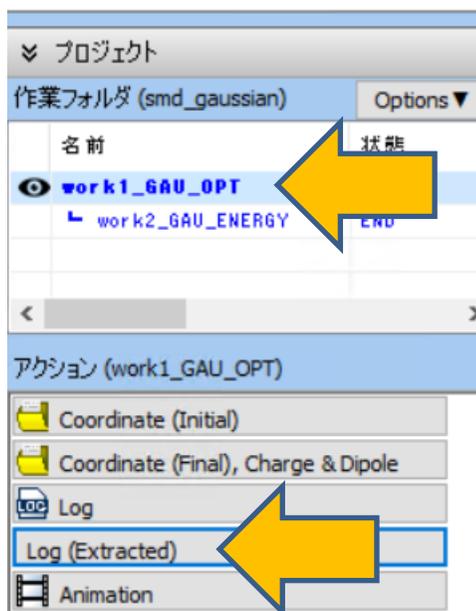
## II. 計算の実行

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**# of Jobs:**の右の**+**ボタンをクリックします。
3. **2nd job**のSame conditions as previous jobのチェックを外して、**Task**から**Energy**、**Solvent**から**Water(SMD)**を選択して、**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



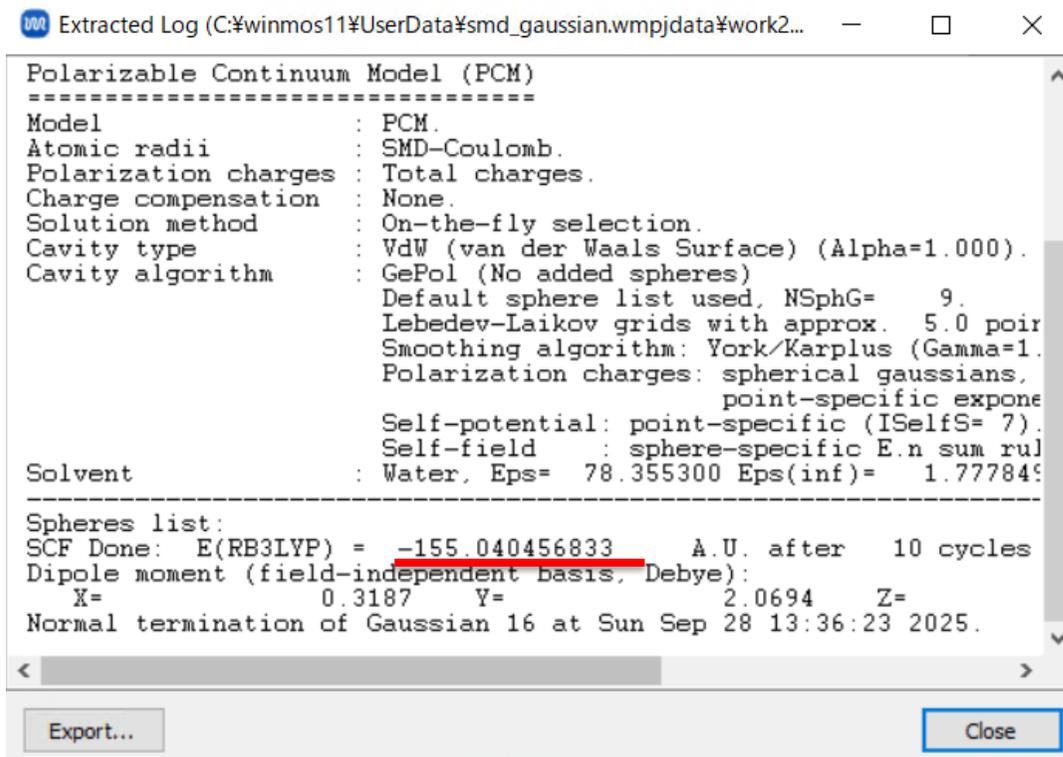
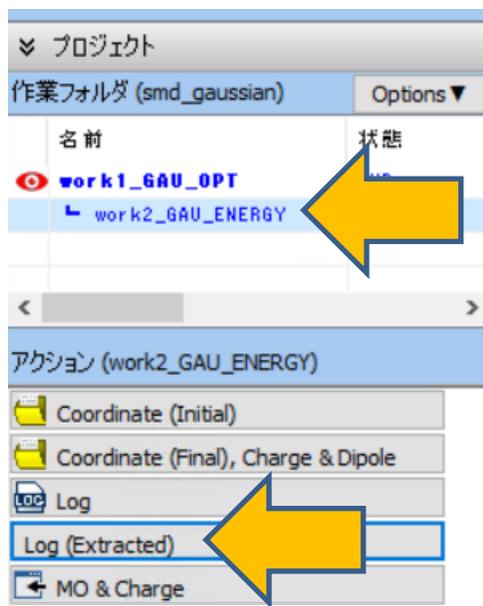
# III. 結果解析

1. 全ての計算が終了してwork2\_GAU\_ENE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work1\_GAU\_OPTをクリックして、**アクション**の**Log (Extracted)** をクリックします。最後のSCF Done:の行のE(RB3LYP) = の後のエネルギー値(-155.03379 Hartree)が真空中のエネルギーです。



# III. 結果解析

1. 作業フォルダのwork2\_GAU\_ENERGYをクリックして、アクションのLog (Extracted) をクリックします。SCF Done:の行のE(RB3LYP) = の後のエネルギー値(-155.04045 Hartree) が水溶液中のエネルギーです。
2. 水溶液中と真空中のエネルギー差4.2 kcal/mol (= -155.04045 - (-155.03379) = -0.0666 Hartree)が計算による溶媒和自由エネルギーで、実験値[2]の-4.9 kcal/molをよく再現しています。



[2] Biochemistry 20(1981) 849.

# 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