



Gaussian

部分構造最適化計算

V11.14.1

2025年11月10日 株式会社クロスアビリティ

最適化フラグを変更機能を使ったCartesian座標一部固定の構造最適化はV11.14.1以降で実行可能です。
それ以前のバージョンでは、補足に書かれているキーワードを直接入力してください。

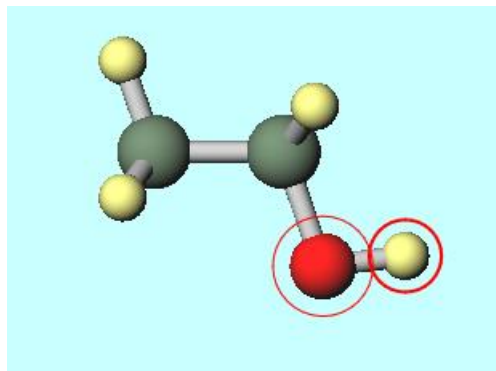
本書について

- 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

エタノール分子を対象として、前半はCartesian (xyz) 座標一部固定の構造最適化計算、後半は結合長、結合角、二面角一部固定の構造最適化計算をB3LYP/6-31G*レベルで行います。

前半は2つの炭素原子のCartesian座標を固定し、後半はO-H結合長、H-O-C結合角、H-O-C-C二面角を固定して構造最適化を行います。

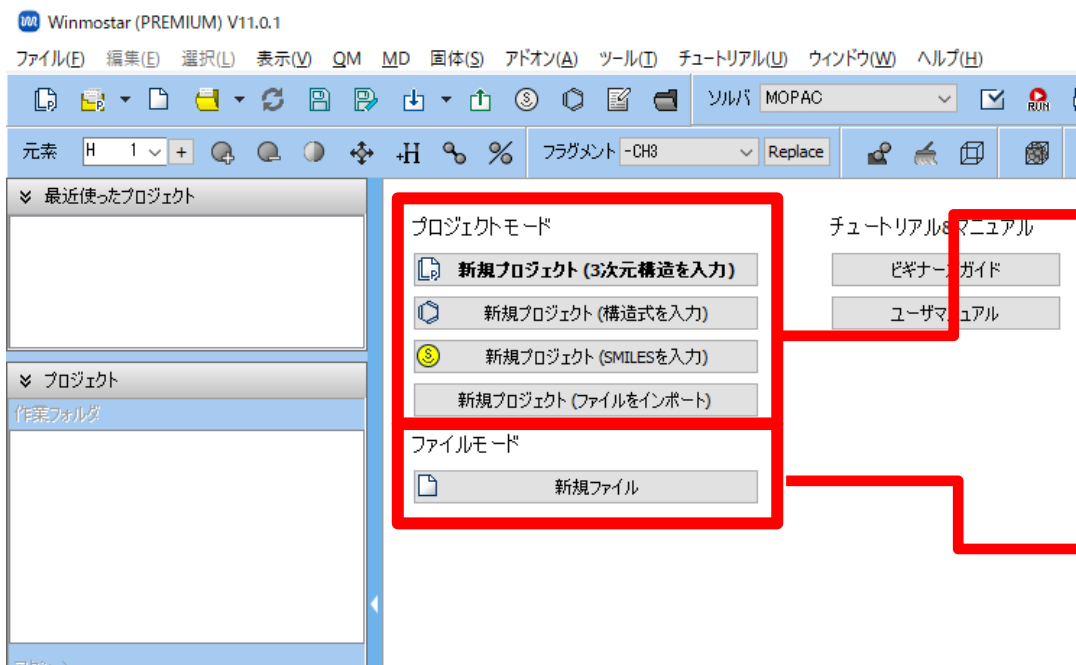


Winmostar V11の動作モード

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

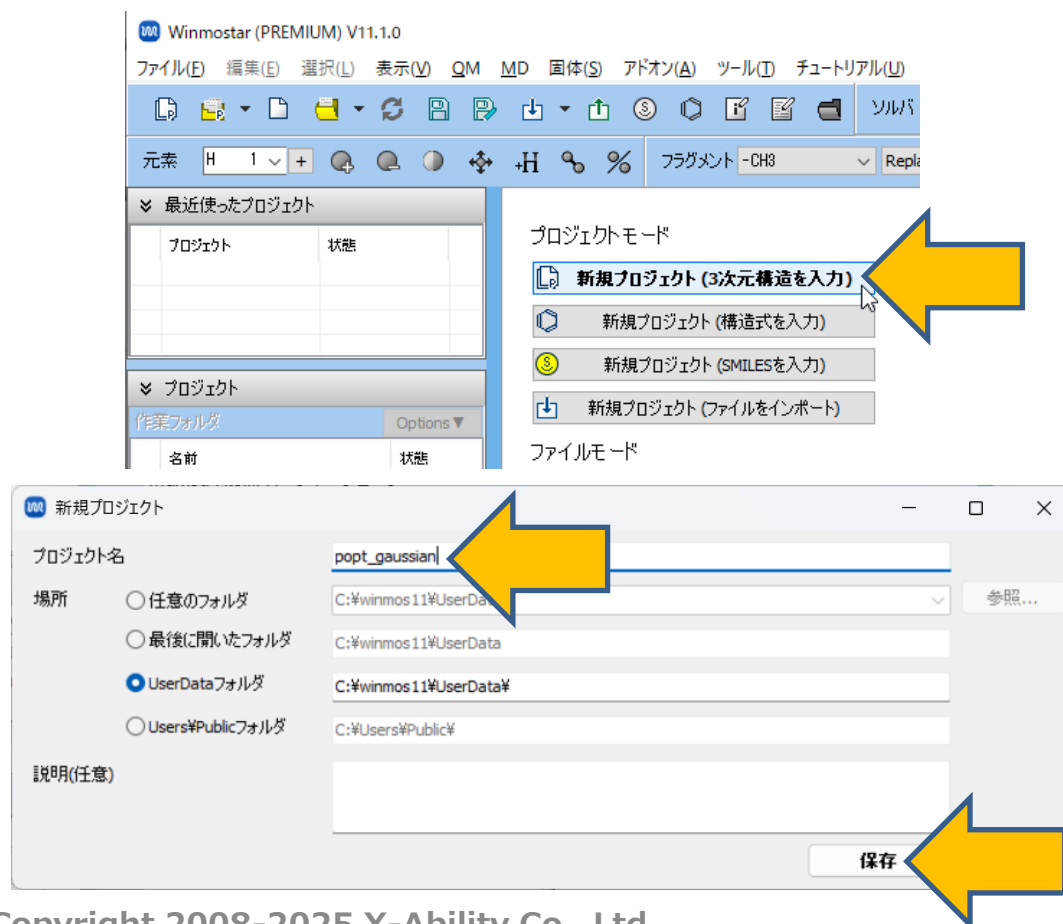
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

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。

1. Cartesian座標一部固定構造最適化

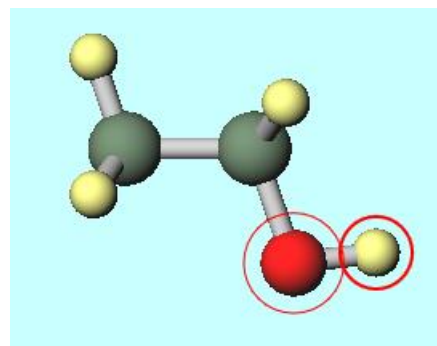
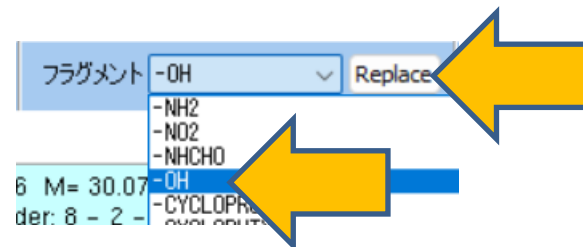
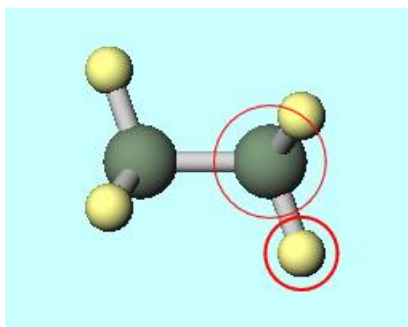
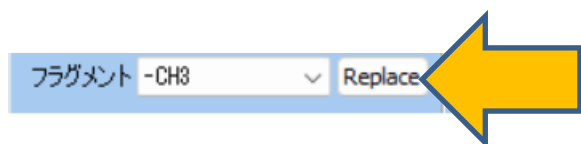
I. 系のモデリング

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「popt_gaussian」と入力し**保存**をクリックします。



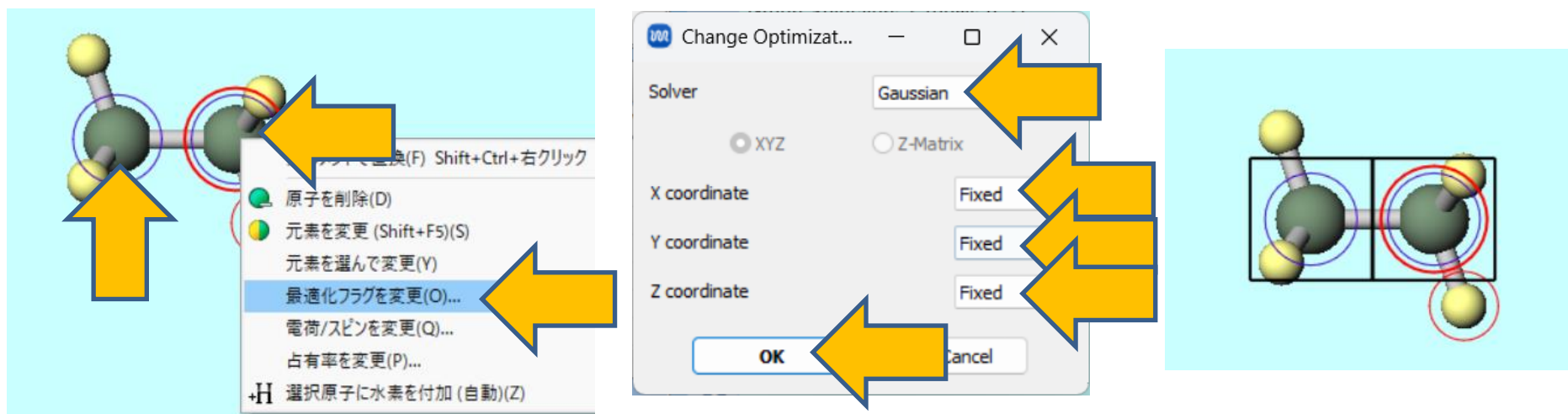
I. 系のモデリング

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



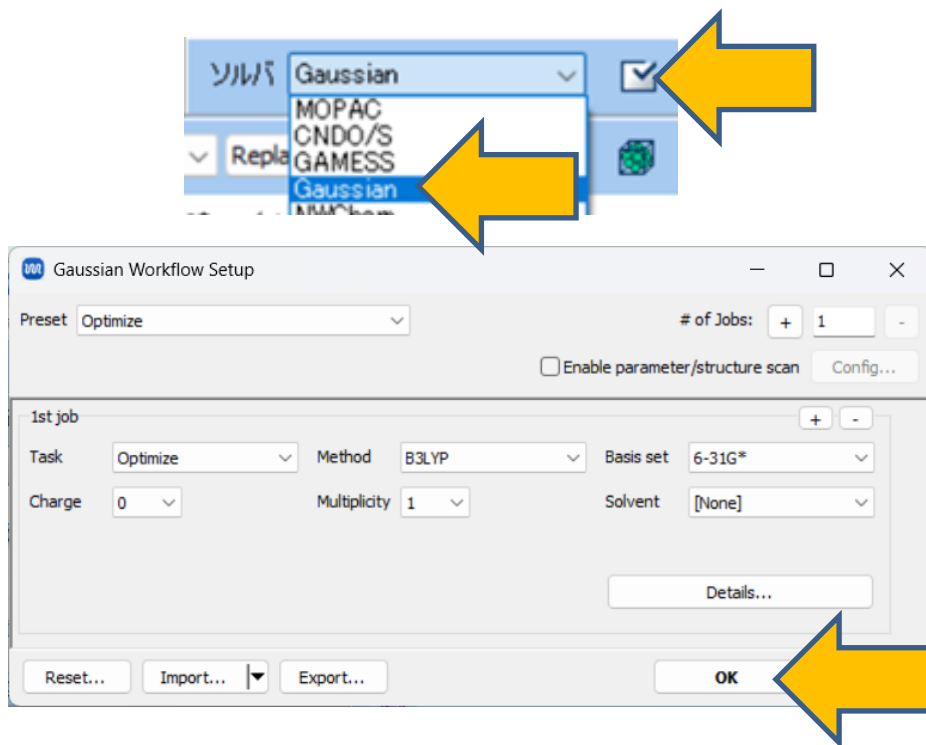
I. 系のモデリング

1. **Ctrlボタン**を押したまま2つの炭素原子を左クリックして、炭素原子2つを青丸が付いた選択状態にします。
 2. どちらかの炭素原子を右クリックして、**最適化フラグを変更**を選択します。
 3. **Solver**を**Gaussian**、**X、Y、Z Coordinate**を全て**Fixed**に変更して、OKボタンをクリックします。正常に設定されると、座標固定が設定された原子に黒い四角の枠が追加されます。
- GaussianはX、Y、Z個別の固定には対応していないため、X、Y、Z Coordinate全てをFixedにしてください。



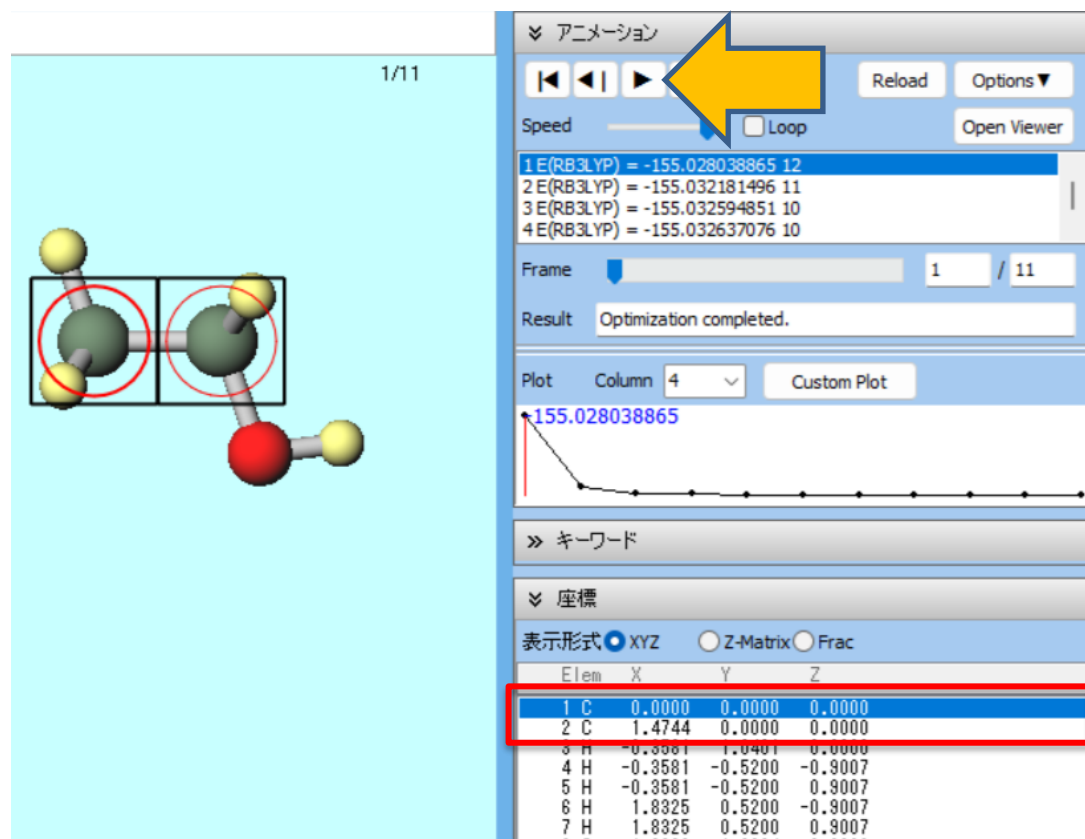
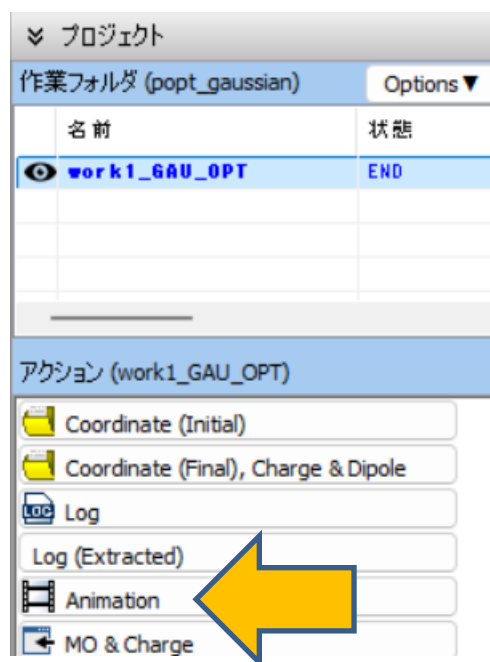
II. 計算の実行

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**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**の作業フォルダの状態が**END**に変化した後、**アクション**の**Animation**をクリックします。アニメーションエリアの再生ボタンをクリックして、構造最適化の経過で固定した2つの炭素原子(**1C**及び**2C**)の座標が変わらないことを確認します。
- 分子が大きい場合、Gaussianの座標の内部処理の仕様上、固定の設定をしてもわずかに座標が動くことがあります。



補足 キーワードを直接入力する方法

最適化フラグを変更機能を使わずに設定する場合：

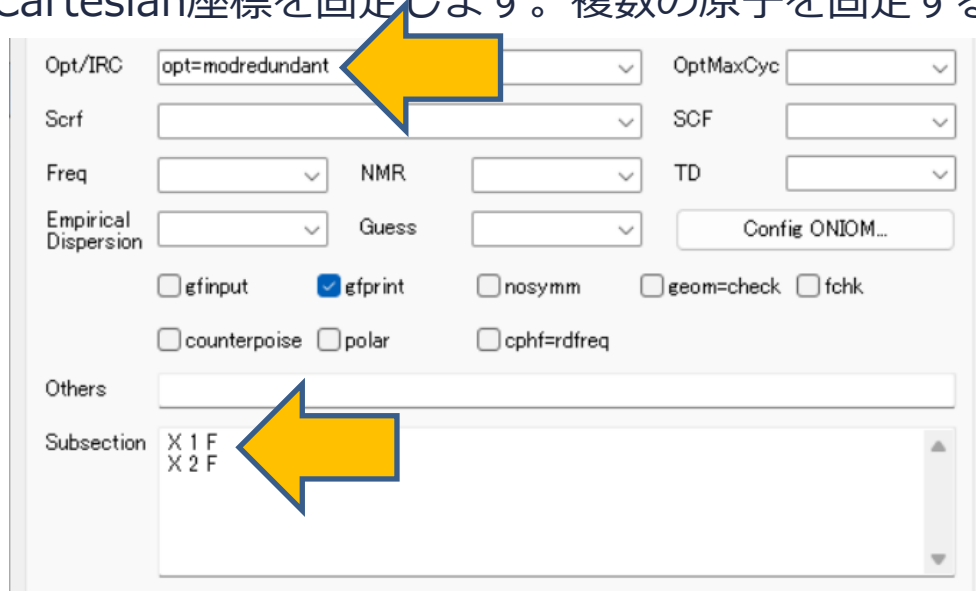
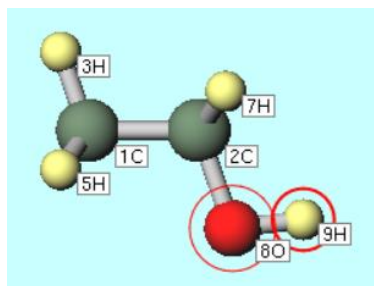
1. Gaussian Workflow Setupウィンドウで**Details**ボタンをクリックします。
2. Gaussian Keyword Setupウィンドウで**Opt/IRC**を**opt=modredundant**に変更します。
3. 2つの炭素原子（**1C**と**2C**の1番目と2番目の原子）を固定する場合、**Subsection**欄に

X 1 F

X 2 F

を記入します。

- X 原子の並びの番号 F で原子のCartesian座標を固定します。複数の原子を固定する場合は1行に1原子ずつ書いてください。

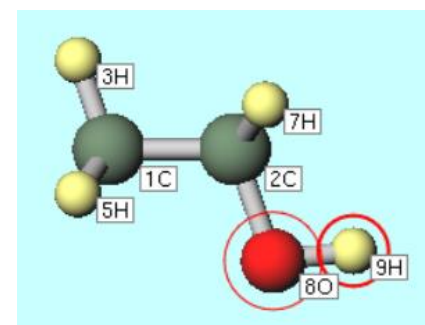
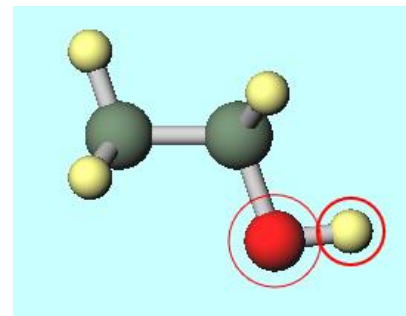
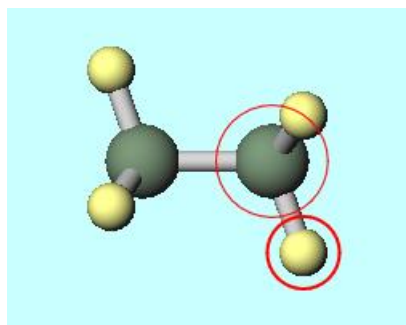
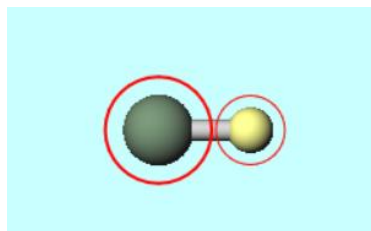
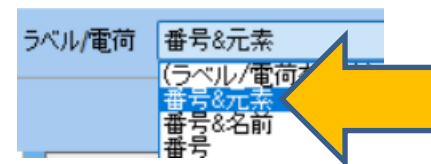
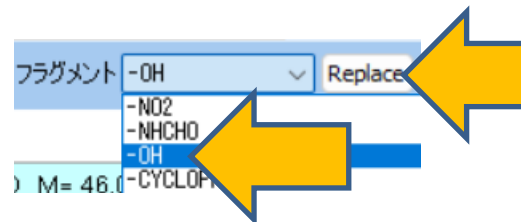
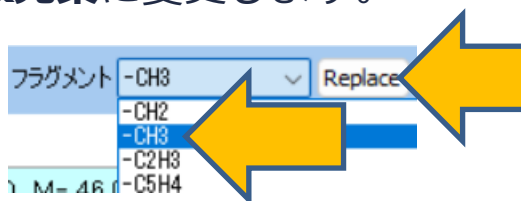
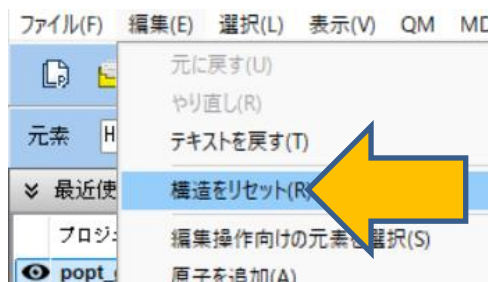


Opt/IRC	opt=modredundant	OptMaxCyc	
Scrf		SCF	
Freq		NMR	
Empirical Dispersion		Guess	
☐ ginput ☒ gprint ☐ nosymm ☐ geom=check ☐ fchk			
☐ counterpoise ☐ polar ☐ cphf=rdfreq			
Others			
Subsection			
X 1 F			
X 2 F			

2. 結合長・結合角・二面角一部固定構造最適化

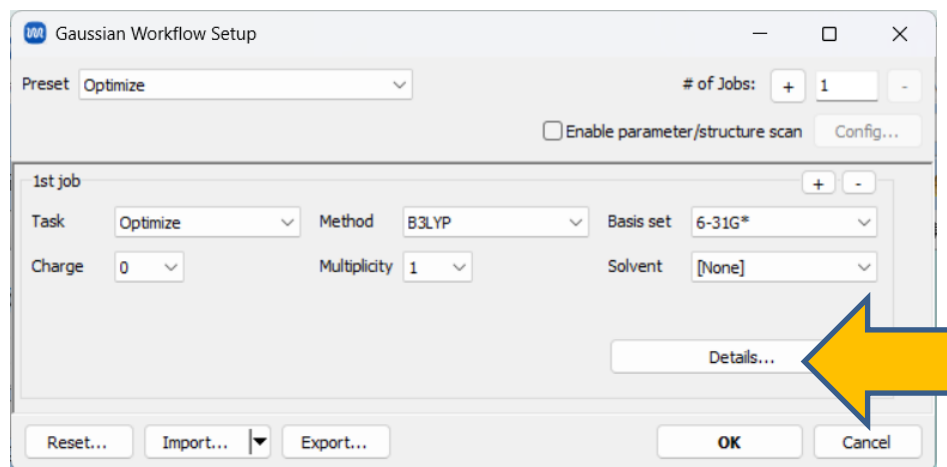
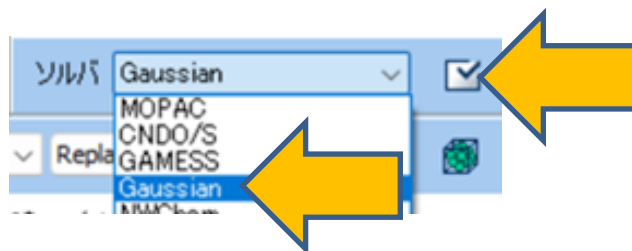
IV.系のモデリング

1. 編集 | 構造をリセットをクリックして、初期状態のCHの状態に戻します。
2. 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2回クリックします。
3. 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。
4. ラベル/電荷を番号&元素に変更します。



V. 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**Details**ボタンをクリックします。



V. 計算の実行

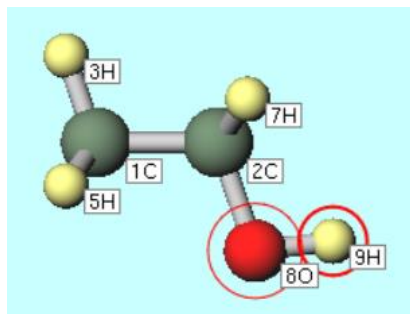
1. Gaussian Keyword SetupウィンドウでOpt/IRCをopt=modredundantに変更します。
2. 8O-9Hの結合長、2C-8O-9Hの結合角、1C-2C-8O-9Hの二面角を固定するため、Subsection欄に

B 8 9 F

A 2 8 9 F

D 1 2 8 9 F

を記入します。



Opt/IRC: OptMaxCyc:

Scrf: SCF:

Freq: NMR: TD:

Empirical Dispersion: Guess: Config ONIOM...

☐ ginput ☒ gprint ☐ nosymm ☐ geom=check ☐ fchk

☐ counterpoise ☐ polar ☐ cphf=rdfreq

Others:

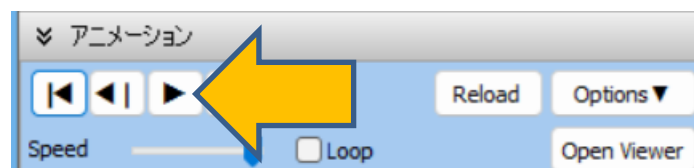
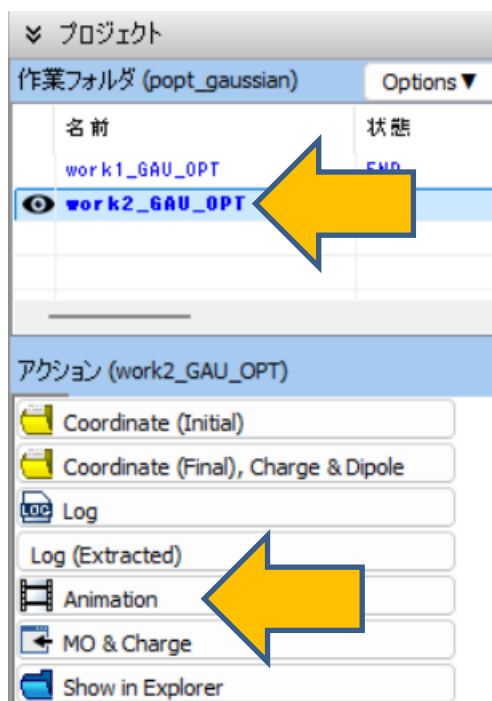
Subsection:

V. 計算の実行

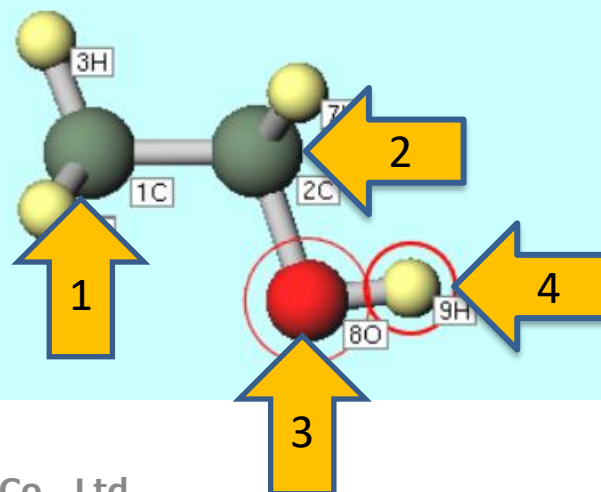
1. **Gaussian Keyword Setup**ウィンドウで**OK**ボタンをクリックします。
2. **Gaussian Workflow Setup**ウィンドウで**OK**ボタンをクリックします。
3. **ジョブの設定**ウィンドウで使用計算機に応じて**# of Threads/MPI Proc**を設定して、**実行**ボタンをクリックします。

VI.結果解析

1. 計算が終了して **work2_GAU_OPT** の作業フォルダの状態が **END** に変化した後、**work2_GAU_OPT** をクリックして **アクション** の **Animation** をクリックします。**1C**、**2C**、**8O**、**9H** の原子を順にクリック後、アニメーションエリアの再生ボタンをクリックします。構造最適化の経過で固定した **8O-9H** の結合長 (Length)、**2C-8O-9H** の結合角 (Angle)、**1C-2C-8O-9H** の二面角 (Dihedral) が変わらないことを確認します。



N= 9 C2H6O M= 46.07
Marked Order: 9 - 8 - 2 - 1
Marked Atom: X= 2.897623 Y= -1.230043 Z= -0.159736 H
Length= 0.96 Angle= 101.7031 Dihedral= 170.00001 Lper= 0.25033



補足 結合長・結合角・二面角固定の指定方法

- 原子1-原子2の結合長を固定する場合
B 原子1の番号 原子2の番号 F
- 原子1-原子2-原子3の結合角を固定する場合
A 原子1の番号 原子2の番号 原子3の番号 F
- 原子1-原子2-原子3-原子4の二面角を固定する場合
D 原子1の番号 原子2の番号 原子3の番号 原子4の番号 F

を1行ずつ**Subsection**欄に記入します。

複数の結合長・結合角・二面角を固定することも可能です。

例：1番目の原子-2番目の原子の結合長、
2番目の原子-8番目の原子の結合長、
1番目の原子-2番目の原子-8番目の原子の結合角を固定する場合

Subsection
B 1 2 F
B 2 8 F
A 1 2 8 F

補足 Cartesian座標固定と結合長・結合角・二面角固定の併用方法

- Cartesian座標固定と結合長・結合角・二面角固定を併用することも可能です。併用する場合は、最適化フラグを変更機能を使わずに、どちらの固定も**Subsection**欄に空行を入れずに記入してください。

例：8番目の原子のCartesian座標、

1番目の原子-2番目の原子の結合長を固定する場合



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