

 winmostar チュートリアル

# Gaussian QST2・QST3計算

V11.16.2

2026年6月5日 株式会社クロスアビリティ

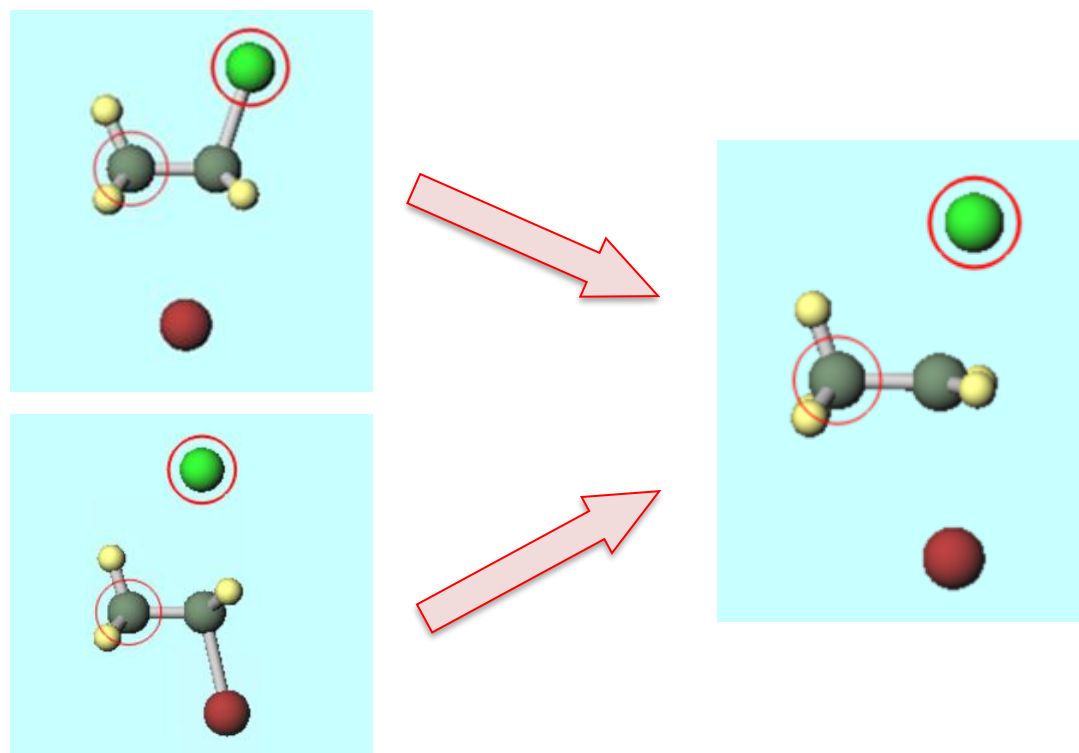
QST計算はV11.16.2以降で実行可能です。

# 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

- ブロモエタン ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$ ) と  $\text{Cl}^-$  イオンの真空中での化学反応について、TS(遷移状態、Transition State)構造をB3LYP/6-31G\*レベルでQST2法、QST3法で計算します。得られた構造で振動計算も行い、虚(表示上は負)の振動数が1つの遷移状態であることを確認します。
- QST2法では、反応前と反応後の構造を入力で与え、QST3法では反応前と反応後の構造の他にTSの初期構造も与えて、計算を行います。

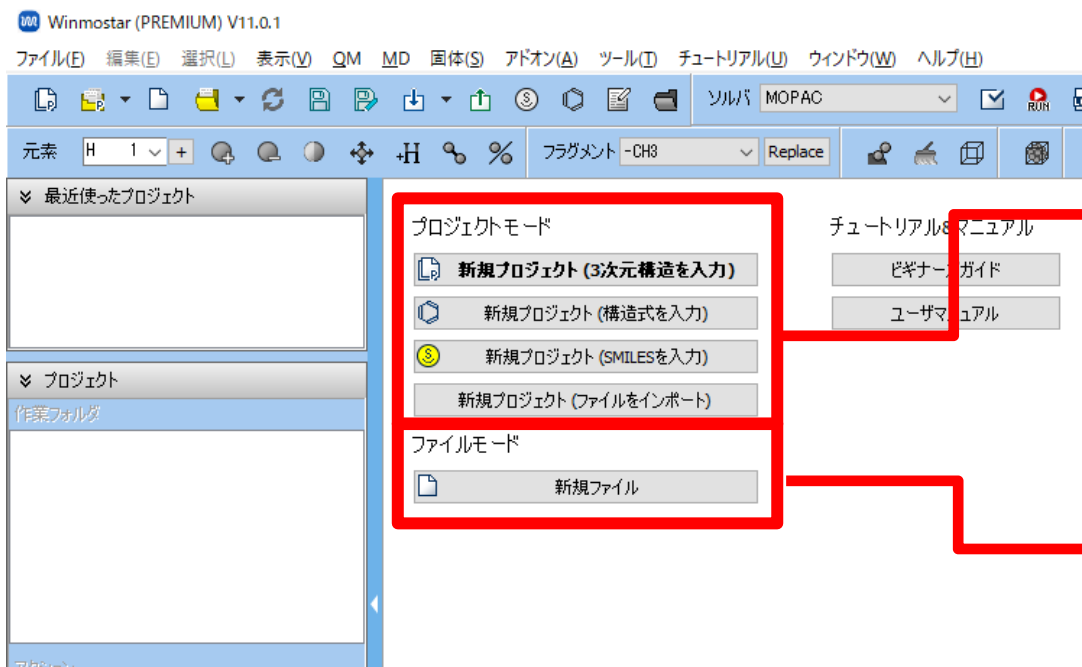


# Winmostar V11の動作モード

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。

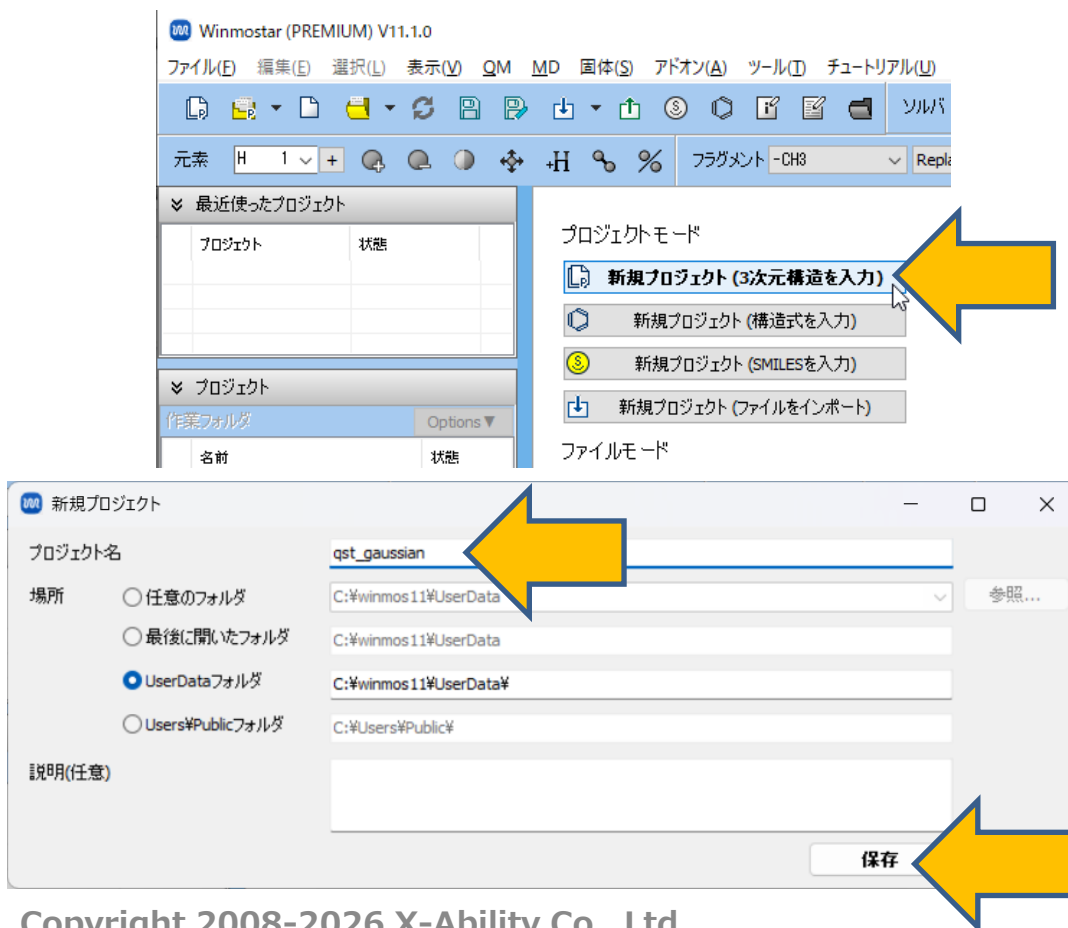
## ファイルモード

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。

# 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「qst\_gaussian」と入力し**保存**をクリックします。



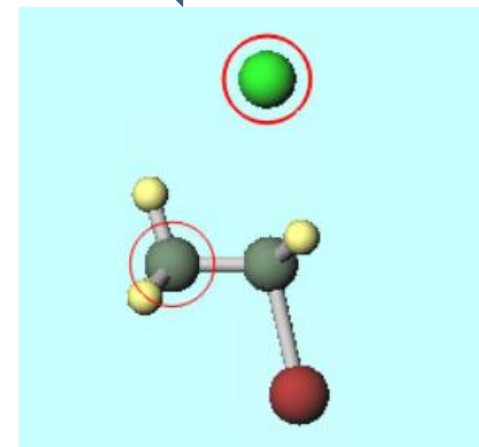
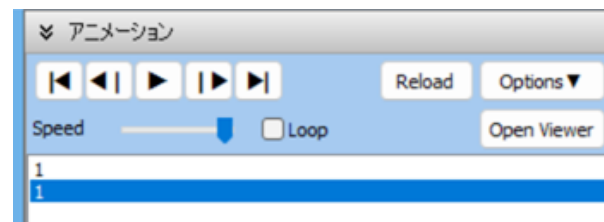
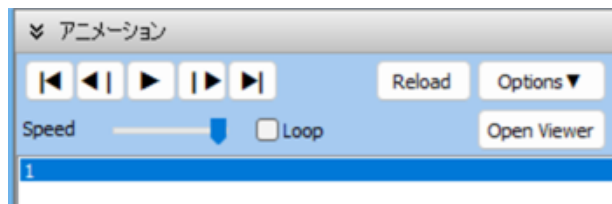
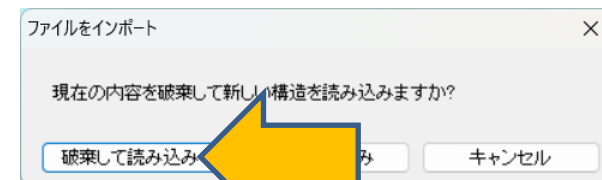
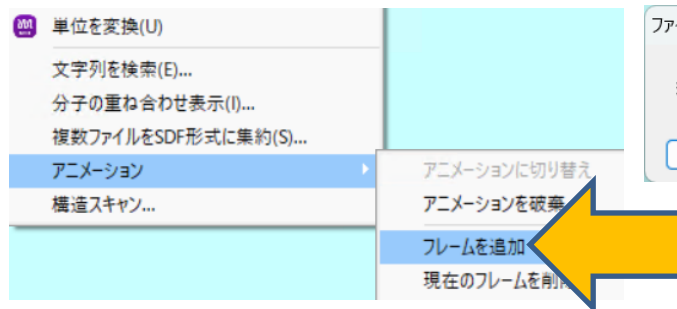
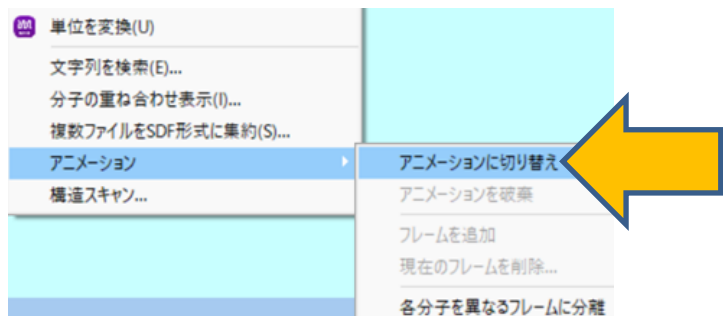
# I. 系のモデリング

1. ファイル | インポート | Samplesファイル | c2h5cl\_br\_reac.xyzをクリックします。ファイルをインポートダイアログで破棄して読み込みをクリックします。

The image shows a software interface for molecular modeling. On the left, the 'File' menu is open, showing options like '新規プロジェクト(N)', 'プロジェクトを開く(P)...', '新規ファイル(N)', 'ファイルを開く(O)...', '再度読み込み(R)', '上書き保存(S)', '名前を付けて保存(A)...', '閉じる(C)...', 'ファイルをインポート(F)...', 'インポート(I)', and 'ファイルをエクスポート(F)...'. The 'インポート(I)' option is selected, and a submenu is visible with 'SMILES...', '構造式(O)...', and 'Samplesファイル(S)'. The 'Samplesファイル(S)' option is also selected, and a list of files is shown on the right. The file 'c2h5cl\_br\_reac.xyz' is highlighted in blue, with a yellow arrow pointing to it. In the center, a dialog box titled 'ファイルをインポート' (Import File) is open, asking '現在の内容を破棄して新しい構造を読み込みますか?' (Do you want to discard the current content and load the new structure?). The dialog has three buttons: '破棄して読み込み' (Discard and Load), '読み込み' (Load), and 'キャンセル' (Cancel). A yellow arrow points to the '破棄して読み込み' button. On the right, a ball-and-stick molecular model is shown, with a yellow arrow pointing to it. The model consists of a central carbon atom (grey) bonded to two hydrogen atoms (white) and one chlorine atom (green). The chlorine atom is highlighted with a red circle. Below the model, a single red sphere is shown.

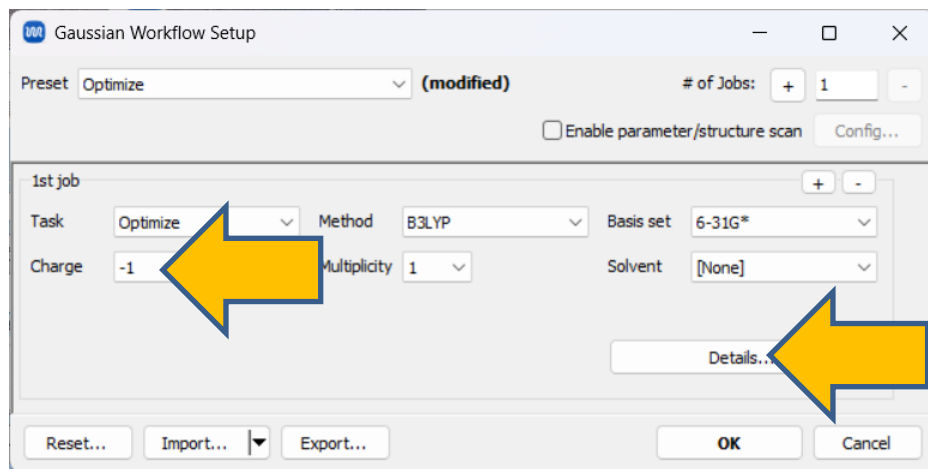
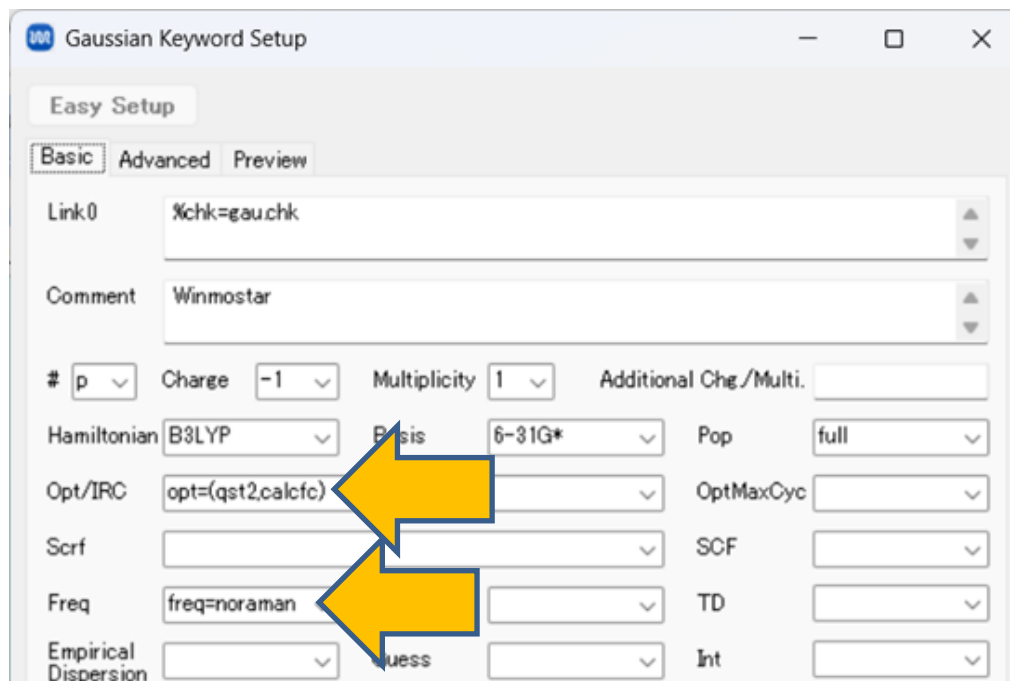
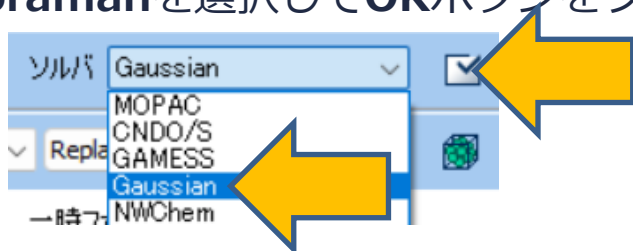
# I. 系のモデリング

1. ツール | アニメーション | アニメーションに切り替えを選択します。「Are you sure you want to switch to animation?」では、「はい」を選択します。
2. ツール | アニメーション | フレームを追加を選択します。
3. ファイル | インポート | Samplesファイル | c2h5cl\_br\_prod.xyzをクリックします。ファイルをインポートダイアログで破棄して読み込みをクリックします。



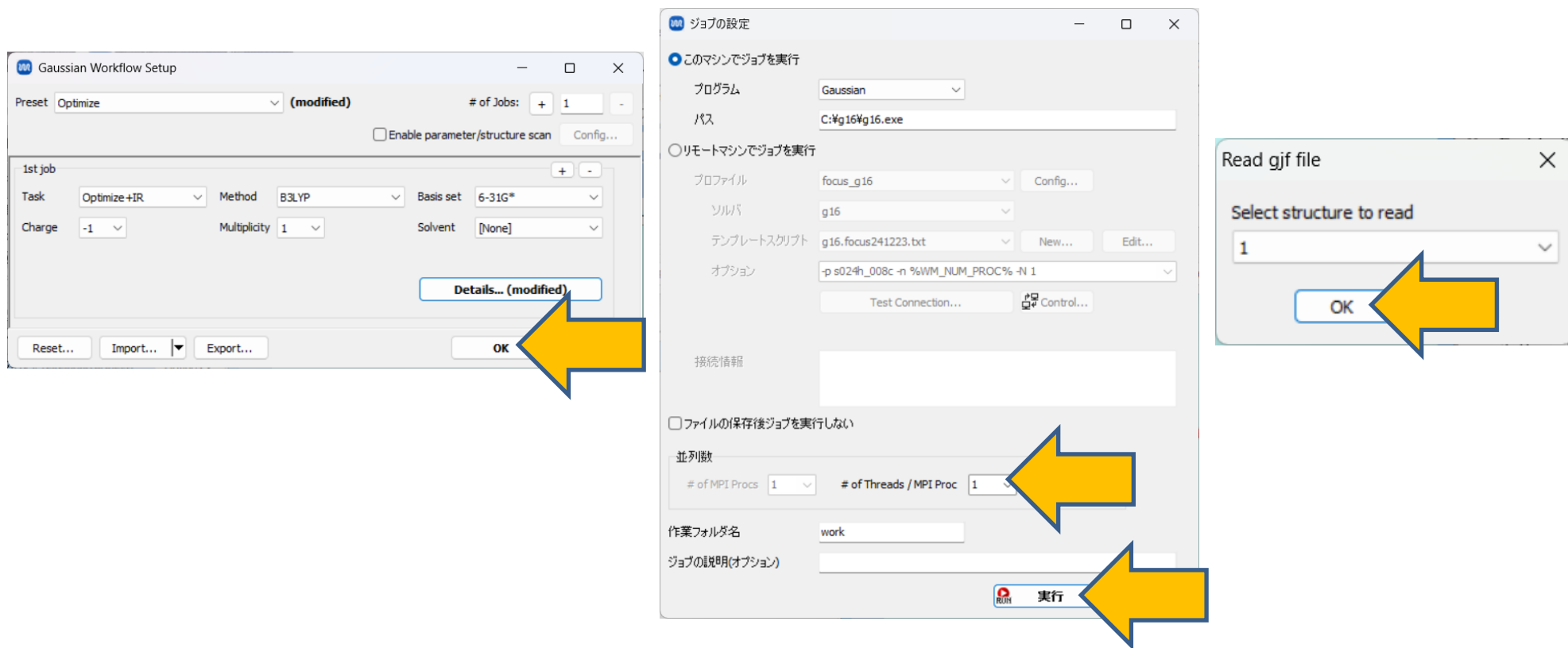
## II. 計算の実行 (QST2計算)

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、Chargeを-1に変更しDetailsボタンをクリックします。
3. Gaussian Keyword Setupウィンドウで、Opt/IRCではopt=(qst2,calcfc)、Freqではfreq=noramanを選択してOKボタンをクリックします。



## II. 計算の実行 (QST2計算)

1. Gaussian Workflow Setupウィンドウで、**OK**ボタンをクリックします。
2. ジョブの設定ウィンドウで、計算機のコア数に応じて**# of Threads/MPI Proc**を設定して、**実行**ボタンをクリックします。「Select structure to read」では「**1**」を選択して**OK**ボタンをクリックします。



# III.結果解析 (QST2計算)

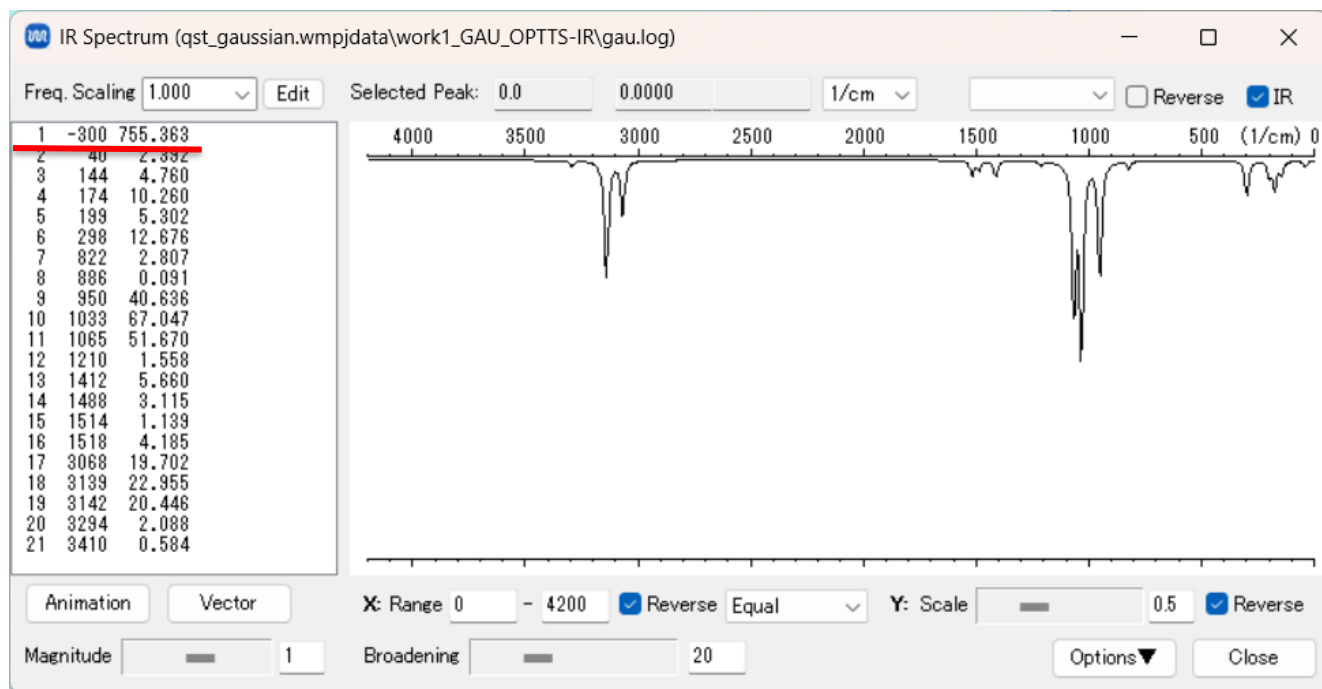
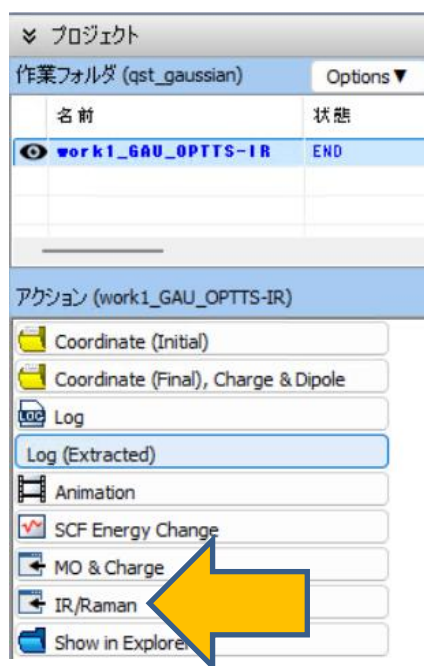
1. 計算が終了してwork1\_GAU\_OPTTS-IRの作業フォルダの状態が**END**に変化した後、**作業フォルダ**のwork1\_GAU\_OPTTS-IRをクリックし、**アクション**の**Animation**をクリックします。
2. アニメーション操作エリアの再生ボタンをクリックして、最終の遷移状態の構造及びエネルギーを確認します。エネルギーはLog(Extracted)ボタンをクリックして、最後のSCF Doneの値でも確認できます。

The screenshot displays the software interface for the QST2 calculation. On the left, the 'プロジェクト' (Project) tree shows the '作業フォルダ (qst\_gaussian)' containing 'work1\_GAU\_OPTTS-IR'. The 'アクション (work1\_GAU\_OPTTS-IR)' panel includes buttons for 'Coordinate (Initial)', 'Coordinate (Final), Charge & Dipole', 'Log', 'Log (Extracted)', 'Animation', 'SCF Energy Change', 'MO & Charge', 'IR/Raman', and 'Show in Explorer'. The 'Animation' button is highlighted with a yellow arrow. The main window shows a 3D molecular model of a diatomic molecule with a red circle around the transition state. The 'アニメーション' (Animation) panel on the right features playback controls (play, stop, refresh) and a 'Speed' slider. A yellow arrow points to the play button. Below the animation controls, the energy values for the last 9 frames are listed: 6 E(RB3LYP) = -3111.19417933 11, 7 E(RB3LYP) = -3111.19418400 8, 8 E(RB3LYP) = -3111.19418462 8, and 9 E(RB3LYP) = -3111.19418462 1. The 'Frame' field shows '9 / 9'. The 'Result' field indicates 'Optimization completed.'. Below the animation panel, the 'Log (Extracted)' output is shown, with the final SCF Done value highlighted in red: SCF Done: E(RB3LYP) = -3111.19418462 A.U. after 8 cycles. The output also includes convergence criteria for Maximum Force, RMS Force, Maximum Displacement, and RMS Displacement.

```
SCF Done: E(RB3LYP) = -3111.19418400 A.U. after 8 cycles
Maximum Force 0.000091 0.000450 YES
RMS Force 0.000015 0.000300 YES
Maximum Displacement 0.003969 0.001800 NO
RMS Displacement 0.000580 0.001200 YES
SCF Done: E(RB3LYP) = -3111.19418462 A.U. after 8 cycles
Maximum Force 0.000014 0.000450 YES
RMS Force 0.000004 0.000300 YES
Maximum Displacement 0.001283 0.001800 YES
RMS Displacement 0.000297 0.001200 YES
Optimization completed.
-- Stationary point found.
Dipole polarizability, Alpha (input orientation).
(esu units = cm**3 SI units = C**2 m**2 J**(-1))
```

# III.結果解析 (QST2計算)

1. アクションのIR/Ramanをクリックします。
2. IR Spectrumウィンドウの左の表の1番目に虚（表示上は負）の振動数が1つだけ存在し、遷移状態の構造が得られたことを確認します。

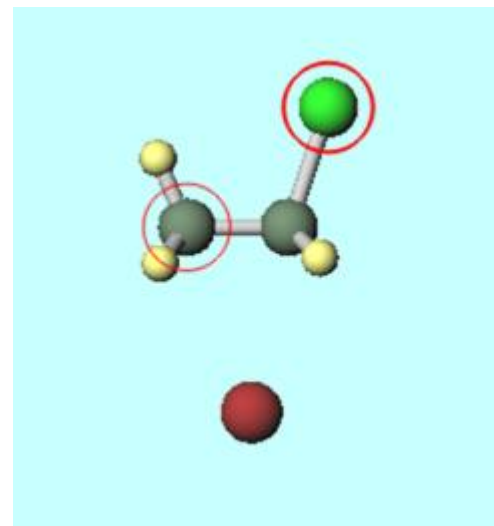
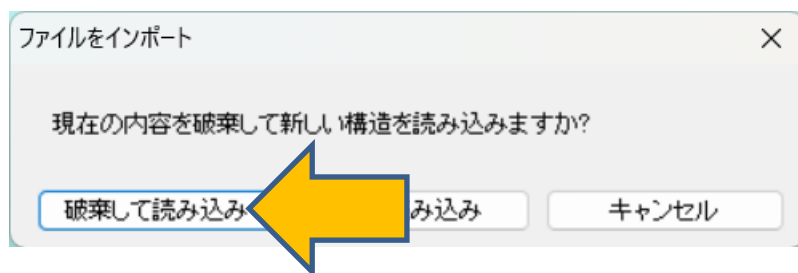


## 補足 初期構造に起因するエラーの確認方法

- QST2計算では、Gaussianは入力で指定する2つの構造のほぼ中間の構造を作成します。片方の構造が大きく崩れている場合や原子の並びが異なる場合、Gaussianが初期構造を作れずに計算実行直後に止まります。
- 実行直後にAbortになった場合、Logをクリックして、開いたテキストファイルのほぼ最後に「RedCar/ORedCr failed for GTrans.」の行があると、上記の理由で止まっています。2つの構造を確認してください。原子の並びが異なっている場合は、**編集 | 番号の取り直し/ソート | 選択2原子間で交換**などの操作で片方のファイルの並びを変更、保存して、再度**ファイル | インポート**の操作からやり直してください
- 原子の並びが2つの構造で問題なくGaussianが初期構造を作れても、初期構造が大きく崩れていると、構造最適化1サイクル目でSCFが収束せずにエラーで止まります。この場合は、入力で指定する片方もしくは両方の構造を調整して、再度計算を行ってください。

## IV.系のモデリング

1. **ファイル | インポート | Samplesファイル | c2h5cl\_br\_reac.xyz**をクリックします。「出力可能なファイル形式(wmm)に変更し編集を続行しますか?」では「はい」、「現在の内容を破棄して新しい構造を読み込みますか?」では「廃棄して読み込み」を選択します。



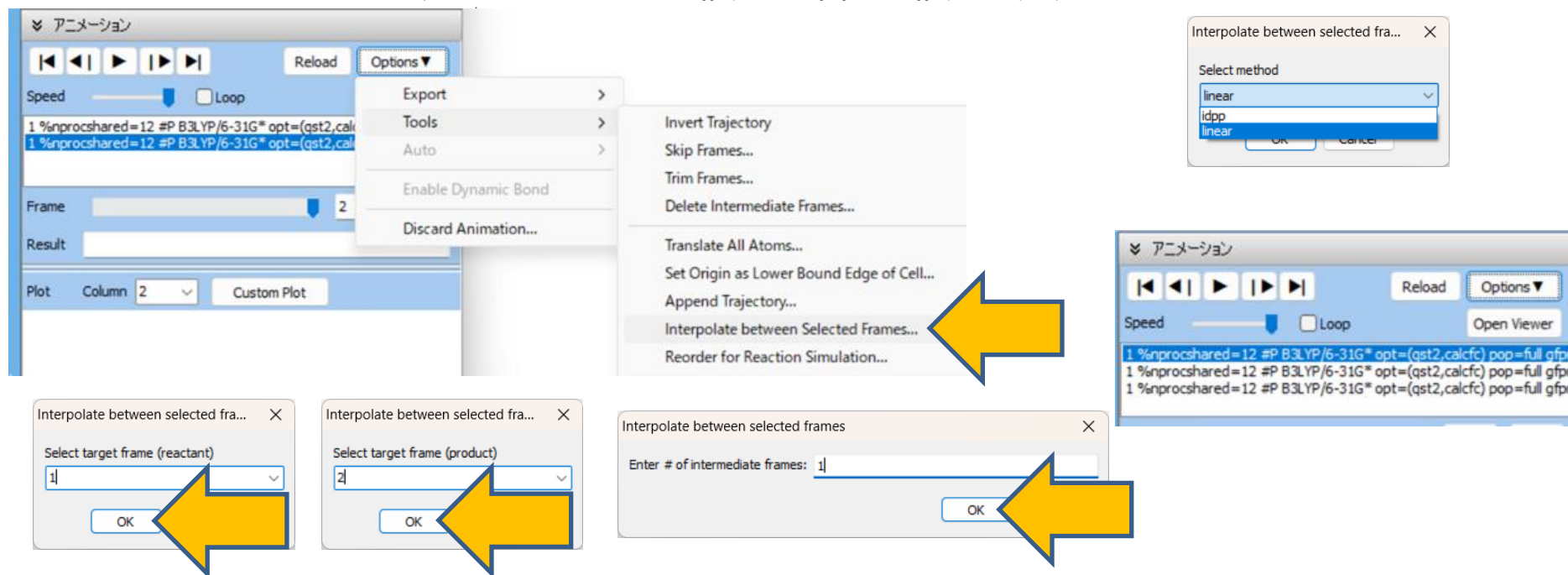
# IV.系のモデリング

1. ツール | アニメーション | アニメーションに切り替えを選択します。「Are you sure you want to switch to animation?」では、「はい」を選択します。
2. ツール | アニメーション | フレームを追加を選択します。
3. ファイル | インポート | Samplesファイル | c2h5cl\_br\_prod.xyzをクリックします。ファイルをインポートダイアログで破棄して読み込みをクリックします。

The image shows a series of screenshots from a software interface. The first three screenshots show the menu navigation: 'Animation' > 'Switch to Animation', 'Animation' > 'Add Frame', and the 'Import File' dialog box with 'Overwrite and Load' selected. The next two screenshots show the 'Animation' control panel with playback buttons and a speed slider. The final screenshot shows a 3D ball-and-stick model of a molecule with a red circle highlighting a specific atom.

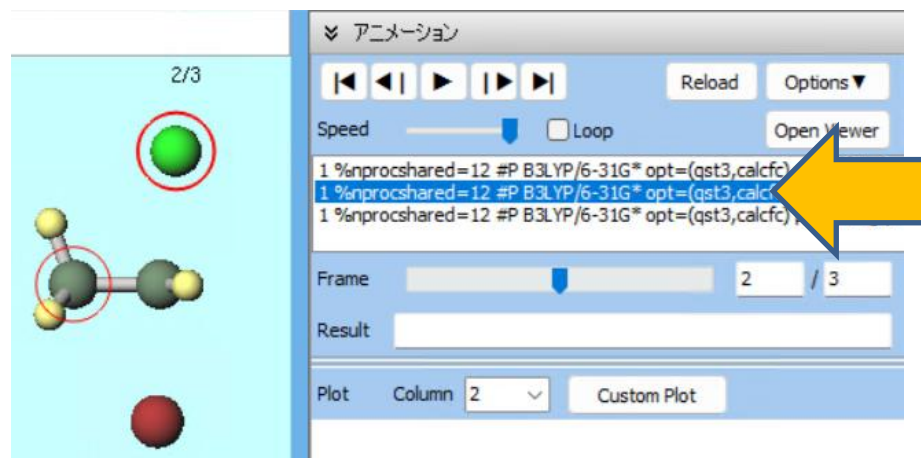
# IV.系のモデリング

1. アニメーション表示エリアの**Options | Tools | Interpolate between Selected Frames**を選択します。「Are you sure you want to switch to animation?」では、「はい」を選択します。
2. Selected target frame (reactant)、 Selected target frame (product)、 Enter # of intermediate framesでは、OKをクリックします。
3. Selected methodで**linear**を選択してOKをクリックすると、アニメーションのフレーム数が3つになり、前2ページで読み込んだ2つの構造の中間の構造が追加されます。



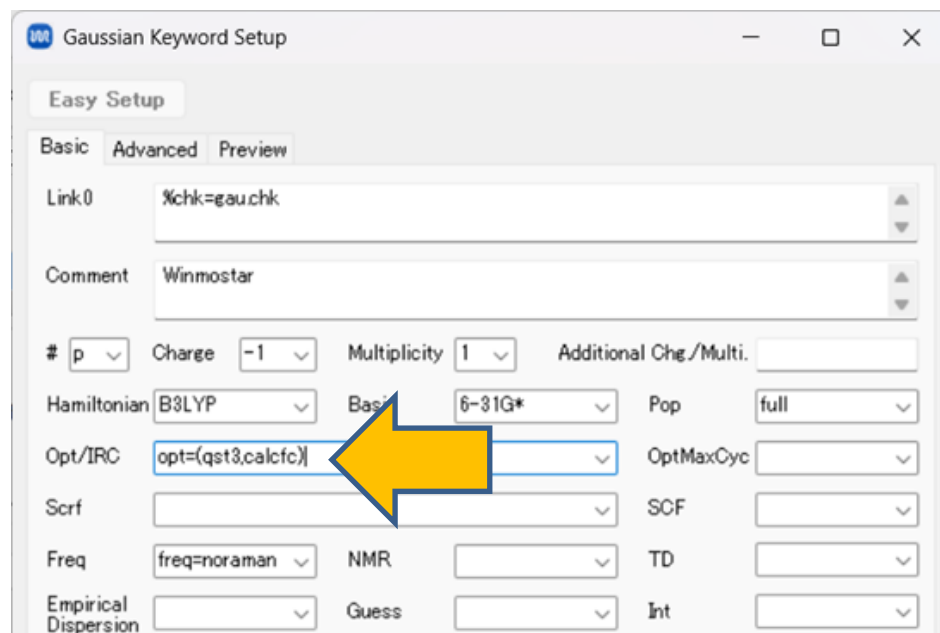
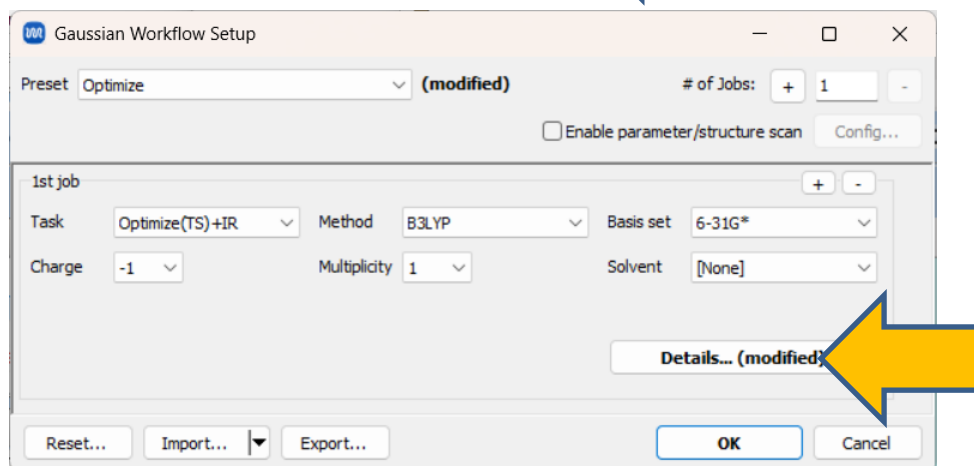
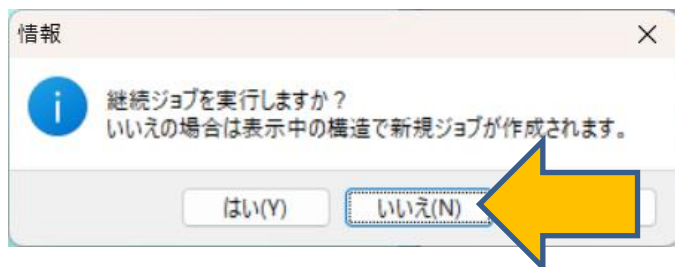
## IV.系のモデリング

1. アニメーション表示エリアの2番目のフレームをクリックして、前ページで作成した初期遷移状態構造が適切かどうかを確認します。本書では、確認だけで追加の操作は必要ありません。
  - 必要に応じて、この2番目のフレームの構造を調整してください。
  - 大きく構造が崩れる場合は、読み込んだ2つのファイルの構造の原子の並びが対応していない可能性があります。**編集 | 番号の取り直し/ソート | 選択2原子間で交換**などの操作で片方のファイルの並びを変更、保存して、再度**ファイル | インポート**の操作からやり直してください。



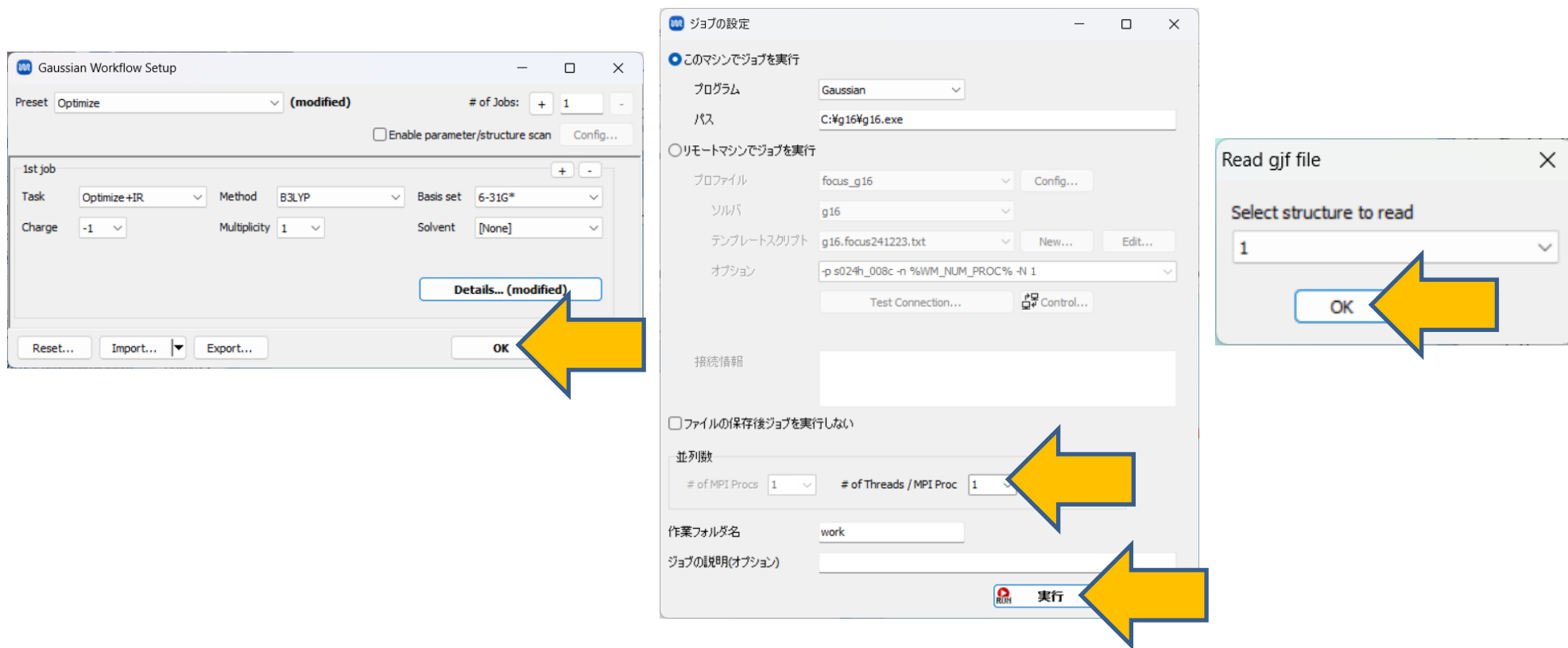
# V. 計算の実行 (QST3計算)

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?」には、「いいえ」を選択します。
2. Chargeは「-1」のまま、Details (modified)ボタンをクリックします。
3. Gaussian Keyword Setupウィンドウで、Opt/IRCでは「opt=(qst3,calcfc)」を選択して、Freqは「freq=noraman」のままOKボタンをクリックします。



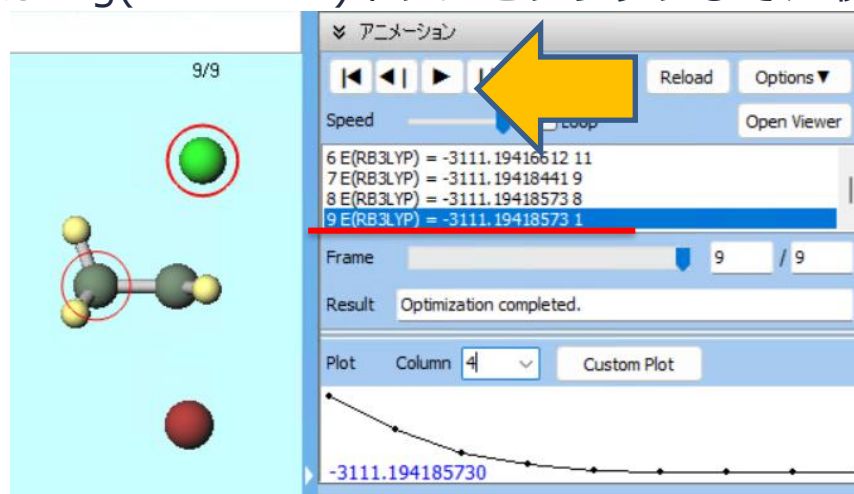
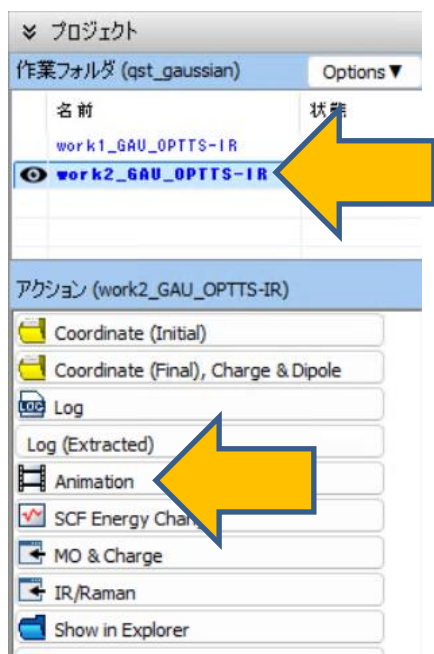
# V. 計算の実行 (QST3計算)

1. Gaussian Workflow Setupウィンドウで、**OK**ボタンをクリックします。
2. ジョブの設定ウィンドウで、計算機のコア数に応じて**# of Threads/MPI Proc**を設定して、**実行**ボタンをクリックします。「Select structure to read」では「**1**」を選択して**OK**ボタンをクリックします。



# VI. 結果解析 (QST3計算)

1. 計算が終了してwork2\_GAU\_OPTTS-IR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\_OPTTS-IRをクリックし、**アクション**の**Animation**をクリックします。
2. アニメーション操作エリアの再生ボタンをクリックして、最終の遷移状態の構造及びエネルギーを確認します。エネルギーはLog(Extracted)ボタンをクリックして、最後のSCF Doneの値でも確認できます。



```
SCF Done: E(RB3LYP) = -3111.19418441 A.U. after 9 cycles
Maximum Force 0.000250 0.000450 YES
RMS Force 0.000048 0.000300 YES
Maximum Displacement 0.008243 0.001800 NO
RMS Displacement 0.001150 0.001200 YES
SCF Done: E(RB3LYP) = -3111.19418573 A.U. after 8 cycles
Maximum Force 0.000043 0.000450 YES
RMS Force 0.000009 0.000300 YES
Maximum Displacement 0.001438 0.001800 YES
RMS Displacement 0.000237 0.001200 YES
Optimization completed.
-- Stationary point found.
Dipole polarizability, Alpha (input orientation).
```

# VI.結果解析 (QST3計算)

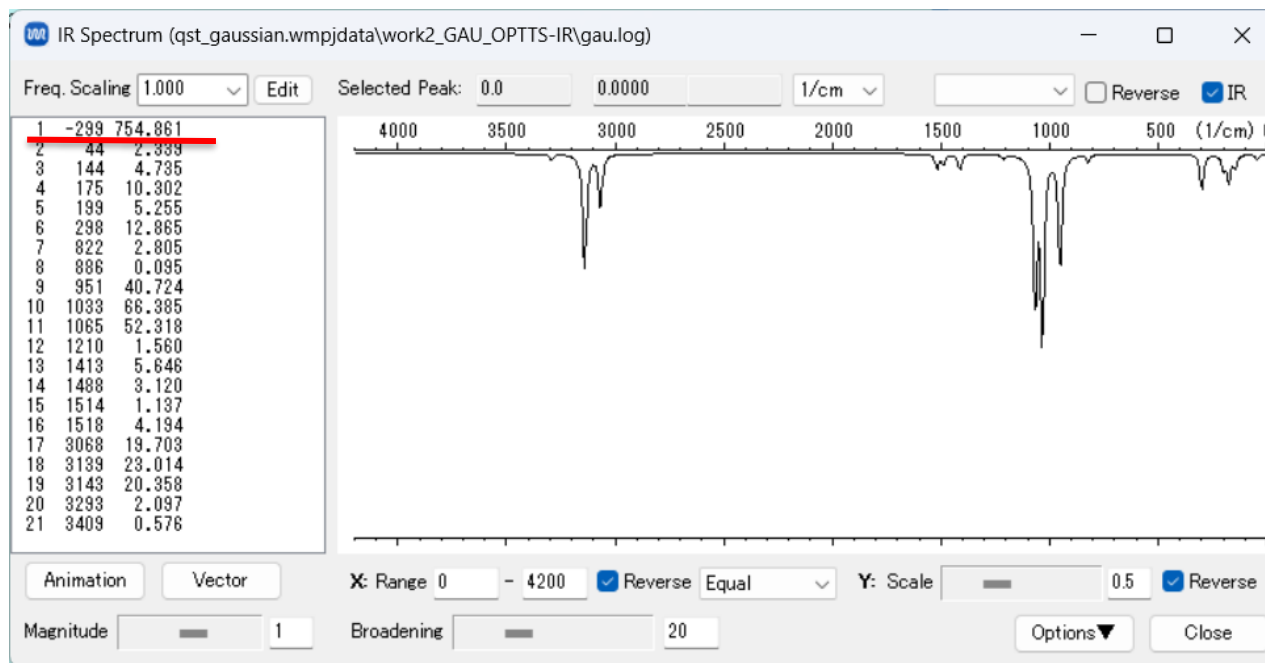
1. アクションのIR/Ramanをクリックします。
2. IR Spectrumウィンドウの左の表の1番目に虚（表示上は負）の振動数が1つだけ存在し、遷移状態の構造が得られたことを確認します。

プロジェクト  
作業フォルダ (qst\_gaussian) Options ▼

名前	状態
work1_GAU_OPTTS-IR	END

アクション (work1\_GAU\_OPTTS-IR)

- Coordinate (Initial)
- Coordinate (Final), Charge & Dipole
- Log
- Log (Extracted)
- Animation
- SCF Energy Change
- MO & Charge
- IR/Raman**
- Show in Explorer



# 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