

 winmostar チュートリアル

Gaussian NBO電荷計算

V10.3.3

2021年1月25日 株式会社クロスアビリティ

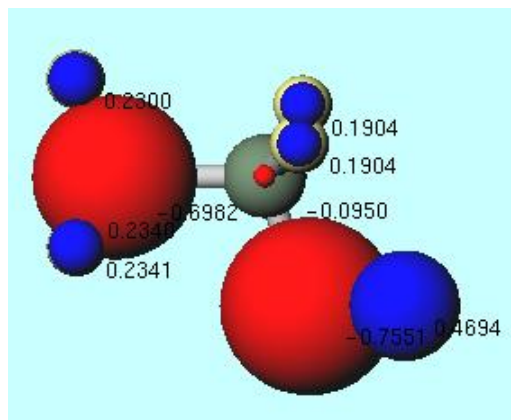
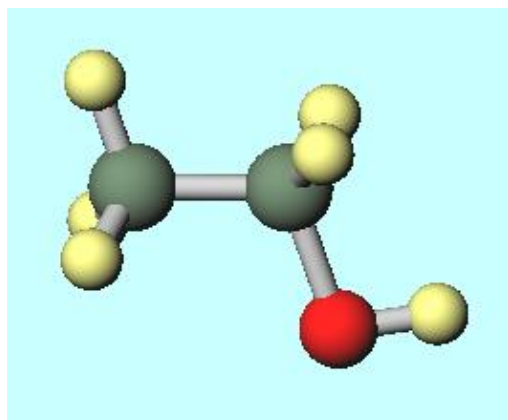
本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)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(C₂H₅OH)分子の構造最適化計算及びその最適化構造でのNatural Bond Orbital(NBO)電荷計算を、B3LYP/6-31G*レベルでGaussianを用いて実行します。NBO電荷は、Natural Population Analysis(NPA)電荷とも呼ばれます。

最後に、様々な基底関数でNBO電荷とMulliken電荷を比較し、電荷計算の基底関数依存性を示します。Mulliken電荷はどのソルバでも計算可能ですが、基底関数依存性が大きく、リチウム原子を含むなどイオン性の特徴を持つ分子では、異常な値になる場合があります^[1]。

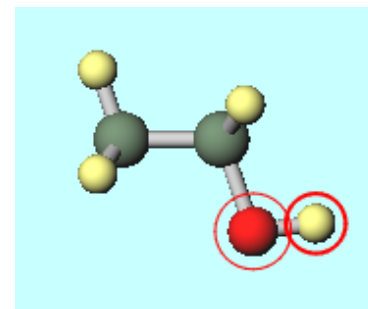
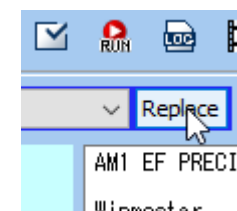
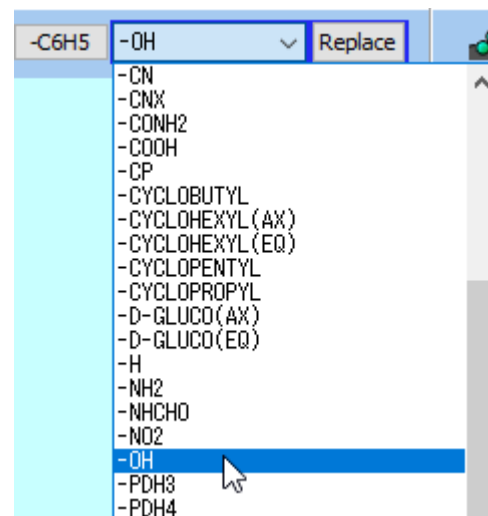
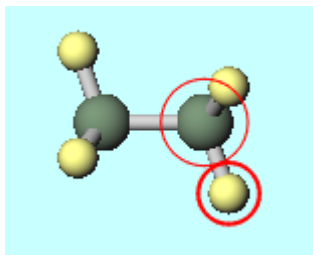
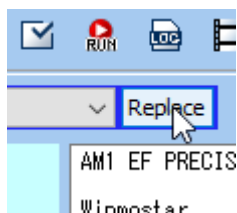
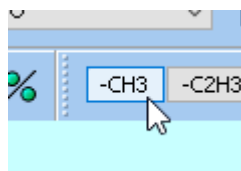


Number	Element	Charge
1	C	-0.6982
2	C	-0.09498
3	H	0.23004
4	H	0.23401
5	H	0.23409
6	H	0.19039
7	H	0.19037
8	O	-0.7551

[1] A. E. Reed, R.B. Weistock, F. Weinhold, J. Chem. Phys. **83**, 735 (1985).

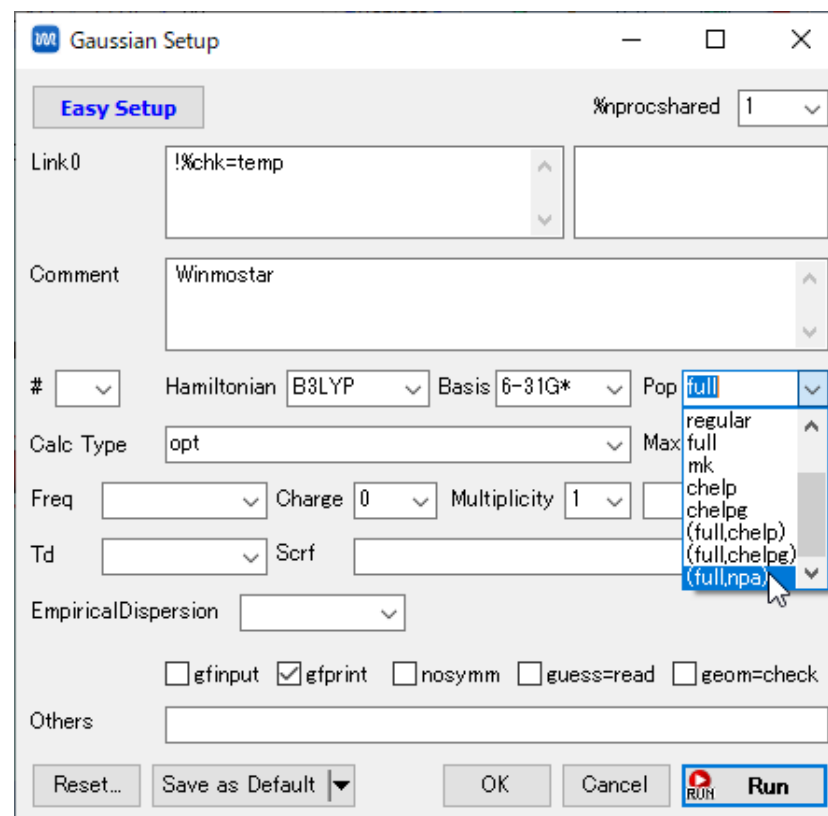
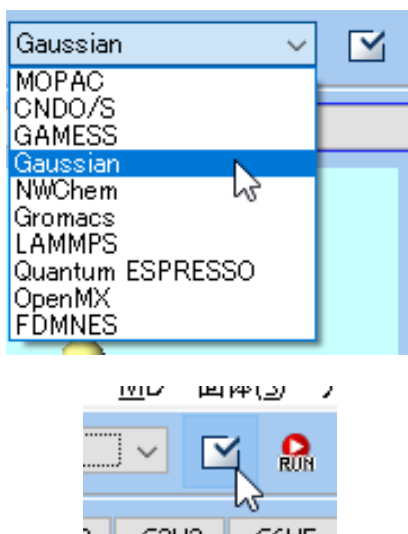
I. エタノールのモデリング

1. メインウィンドウ上部の**-CH3**ボタンをクリックし、その右にある**Replace**ボタンを2回クリックしてエタンを作成する。
2. **フラグメントを選択**から**-OH**を選択し、**Replace**ボタンを1回クリックしてエタノールを作成する。



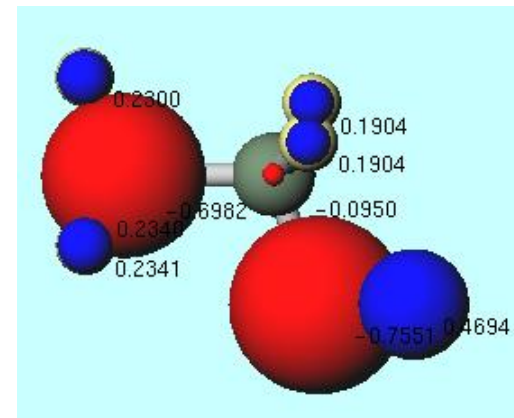
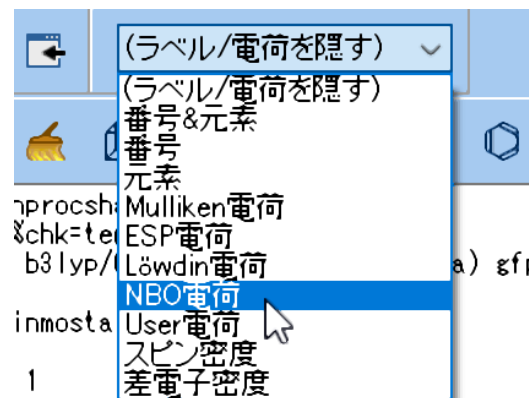
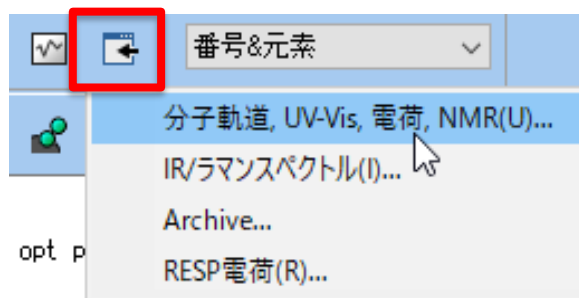
II. 構造最適化+NBO電荷計算

1. ソルバを選択メニューで**Gaussian**を選択して、**キーワード設定**ボタンをクリックする。
2. 開いた**Gaussian Setup**ウィンドウで、**Pop**欄から**(full,npa)**を選択する。
3. **Run**ボタンをクリックする。
4. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（ここでは「ethanol」とする）、**保存**ボタンを押して計算を実行する。



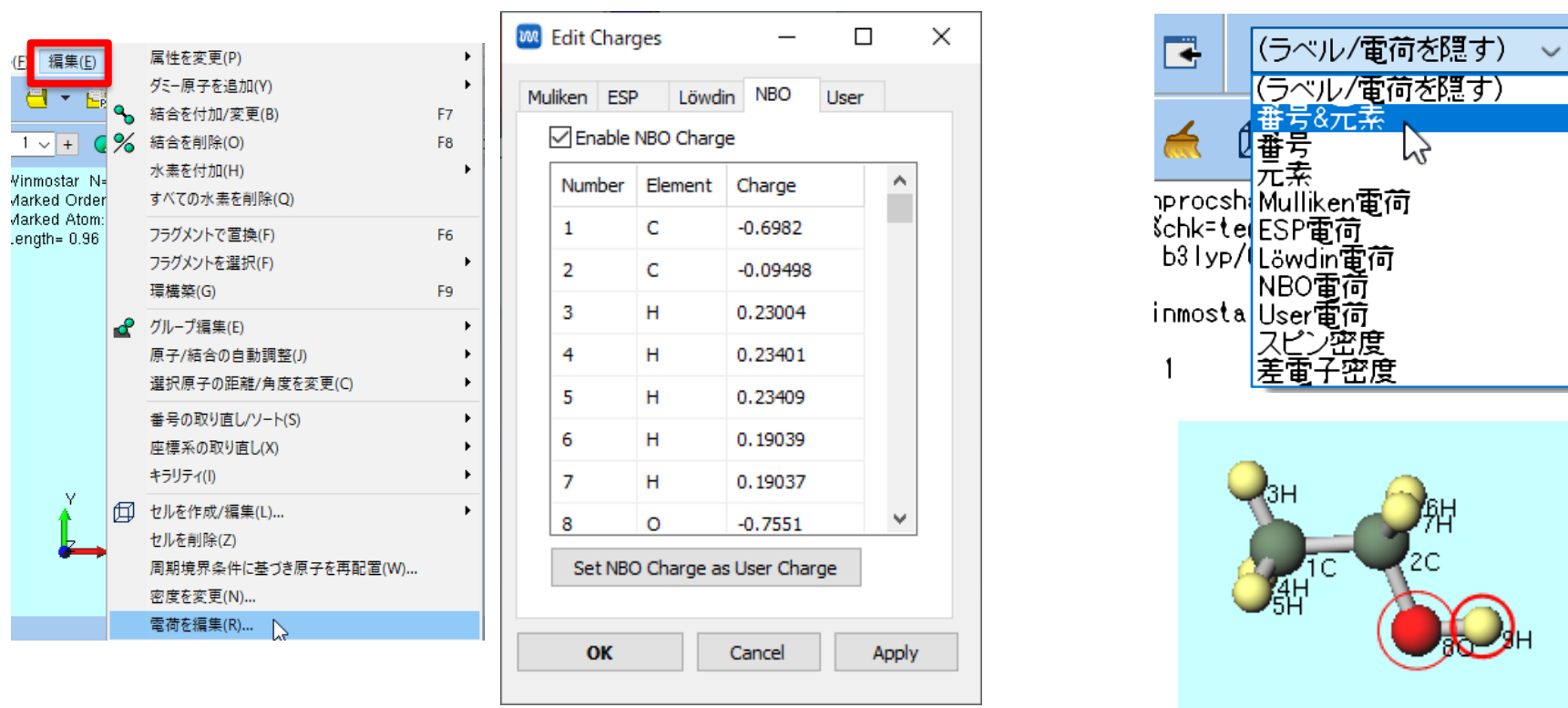
III.NBO電荷表示

1. 結果解析 | 分子軌道,UV-Vis,電荷,NMRをクリックし、デフォルトで選択されるファイル (ethanol.log) を開く。
2. メインウィンドウ右上のラベル/電荷メニューから**NBO電荷**を選択すると、分子表示エリアに NBO電荷が表示される。



III.NBO電荷表示

1. 編集 | 電荷を編集をクリックすると、NBO電荷一覧表が表示される。
2. メインウィンドウ右上のラベル/電荷メニューから番号&元素を選択すると、原子の番号が表示される。



The image shows a software interface for editing NBO charges. On the left, a menu is open with '編集(E)' highlighted. The 'Edit Charges' dialog box is open, showing a table of NBO charges for a molecule. The table has columns for 'Number', 'Element', and 'Charge'. The 'Label/Charge' menu is also open, showing options for hiding labels/charges and selecting '番号&元素' (Number & Element).

Number	Element	Charge
1	C	-0.6982
2	C	-0.09498
3	H	0.23004
4	H	0.23401
5	H	0.23409
6	H	0.19039
7	H	0.19037
8	O	-0.7551

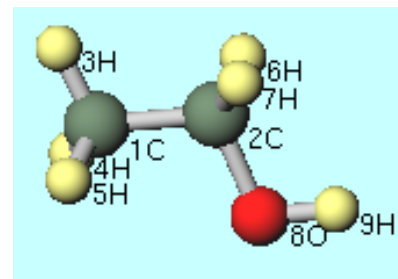
Labels in the molecular structure: 1C, 2C, 3H, 4H, 5H, 6H, 7H, 8O, 9H.

IV. NBO電荷とMulliken電荷の比較

- 下の表では、B3LYP/6-31G(d)最適化構造で、基底関数を変えた場合のB3LYP法でのNBO電荷とMulliken電荷の変化をまとめている。NBO電荷はSTO-3G以外ではおおむね同じ値となったが、Mulliken電荷は基底を良く(基底関数を追加)しても、一定の値に収束していない。
- 各原子のNBO電荷は、電子が多く入る関数に関して極力各原子に局在化するように制限を付けて基底関数の直交化変換を行い、変換された基底関数での電子密度から算出する。基底関数の依存性が小さく、さらに実験の感覚と合う場合が多いことから、現在よく用いられている。
- 各原子のMulliken電荷は、その原子に属する基底関数の重なり積分と電子密度を掛けた値の合計で算出する。隣の原子にまで広がる分散(diffuse)関数などがあると、隣の原子の電子を計算上横取りすることになり、基底関数を変えると電荷が大きく変わる場合がある。

表 B3LYP法でのエタノール分子のNBO電荷とMulliken電荷 (構造 : B3LYP/6-31G(d))

	NBO				Mulliken			
	1C	2C	8O	9H	1C	2C	8O	9H
STO-3G	-0.19	0.05	-0.30	0.20	-0.23	-0.04	-0.29	0.19
6-31G(d)	-0.70	-0.09	-0.76	0.47	-0.44	-0.03	-0.61	0.39
6-31+G(d)	-0.71	-0.12	-0.78	0.49	-0.64	-0.12	-0.66	0.46
6-311G(d,p)	-0.59	0.00	-0.73	0.45	-0.31	-0.02	-0.40	0.24
6-311++G(d,p)	-0.59	-0.02	-0.73	0.45	-0.40	-0.22	-0.30	0.25



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