## **M** winmostar チュートリアル



V11.3.0

2023年3月17日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
  - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



気相中の孤立したプロピレン分子のエネルギー、イオン化ポテンシャル、安定構造、分子軌道のエネルギーと形状、IRスペクトル、ゼロ点エネルギーをMOPACによるAM1法の半経験的量子化学計算から取得します。



#### 注意点:

 Hartree-Fock法に近似を導入した半経験的分子軌道法は高速に計算できますが、定量的、場合 によっては定性的にも実験値とずれることがあります。より高い精度で計算を行いたい場合は、 GAMESS、GaussianまたはNWChemを使用してください。

謝辞 :本資料作成にあたり元富山大学の木原寛氏の資料を参考にしました。 winmostar Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

### 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MOPACチュートリアルを参照してください。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1





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先にファイル | 閉じるをクリックします。)
- 2. プロジェクト名に「propylene\_mopac」と入力し保存をクリックします。



# I. 系のモデリング

初期構造の作成方法の詳細は分子モデリング有機分子編チュートリアルを参照してください。 ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

- 1. ファイル | インポート | Samplesファイル | propylene.xyzをクリックします。
  - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりにファイル | ファイルをインポートを使います。
- 2. 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。
- 3. 分子表示エリアに所望の分子が出現することを確認します。

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(I) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H) ファイルをインポート 新規プロジェクト(N) Ctrl+Alt+N 👍 🔹 🟥 🗊 👔 🚰 🚽 ソルバ GAMESS Sector 10 Sec 現在の構造で新規プロジェクト(N) +H 💊 🄏 フラグメント - CH3 Replace 🖌 🥖 🕼 プロジェクトを開く(P)... Ctrl+Alt+O 現在の内容を破棄して新しい分子構造を読み込みますか? 最近使ったプロジェクトを開く(R) 一時ファイル (temp.wmm) 铝 プロジェクト(P) N= 2 CH M= 13.02 Marked Order: 1 - 2 - 0 - 0 新規ファイル(N) Ctrl+N 破棄して読み込み 込み キャンセル ファイルを開く(O)... Ctrl+O Length= 1.1 Angle= \* 0 1aki.pdb 最近使ったファイルを開く(R) 1qlx.pdb 万 再度読み込み(R) 1uao.pdb N Y 3htb.pdb P ト 書き保存(S) Ctrl+S al slab.cif 名前を付けて保存(A)... Z au.cif 閉じる(C)... Ctrl+W E au slab.cif 「」 ファイルをインポート(F)... bisapc.dat O 最近使ったファイルをインポート(R) c60.dat インポート(1) (s)SMILES... caffeine.dat 「1 ファイルをエクスポート(F)... Û. 構造式(O)... ca\_fcc\_prim.mol2 エクスポート(E) Samplesファイル(S) ch4.mol2 Fi'l 情報を見る(1) 「イーテキストエディタで閉く(の) nial.cif pio\_ab.com propylene.xyz si.cif **WINMOSTAR** Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

×

- 1. ツールバーの**ソルバ**から**MOPAC**を選択します。
- 2. **(ワークフロー設定)** をクリックします。



1. Presetから「Optimize+IR」を選択します。

🚾 мора	C Workflow Setup			– 🗆 X
Preset Op	timize + IR			# of Jobs: + 2 -
				Enable scan calculation Config
1st job				
Task	Optimize $\checkmark$	Method AM1	$\sim$	UHF
Charge	0 ~	Multiplicity 1 $\checkmark$		
				Details
2nd job				
Task	IR ~	Method AM1	$\sim$	UHF
Charge	0 ~	Multiplicity 1 $$ $$		
Same o	conditions as previous job	Continue from previous job	$\sim$	
				Details
Reset	. Import 🔻 I	Export		OK Cancel



今回のケースでは、①Optimizeの計算が実行された後に②IRの計算が実行されます。連続して実行される計算の間で原子座標の情報は自動で引き継がれ、①の最終構造は②の初期構造と一致します。各計算は個別の作業フォルダの中で実行されます。

reset Optimize + IR
Enable scan calculation Config
1st job
Task Optimize V Method AM1 V UHF
Charge 0 V Multiplicity 1 V
Details
Charge 0 V Multiplicity 1 V
Same conditions as previous job Continue from previous job ~
Details
Reset Import 🔽 Export OK Cancel

- 1. MOPAC Workflow Setupウィンドウ右下のOKをクリックします。
- ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします。バックグラウンドでWinmostar Job Managerが起動し、右図のような黒いコンソールウィンドウが出現し、計算が開始されます。 (MOPACのリモートジョブ実行には将来対応予定です)

<ul> <li>© c0x9v2r5/s7/s7/s</li> <li>U/S - FV2v2r5/s7/s7/s</li> <li>U/S - FV2v2r5/s7/s7/s7/s</li> <li>U/S - FV2v2r5/s7/s7/s7/s</li> <li>U/S - FV2v2r5/s7/s7/s7/s7/s7/s7/s7/s7/s7/s7/s7/s7/s7/</li></ul>	🕺 ジョブの設定	-				
OUE-http://citality.cital	●このマシンでジョブを実行			選択Winmostar/JM pr	opylene_Job1 2021/06/02 3:59:43	
JUD74/JL       pse_example       Config         JUDX       mopac	〇リモートマシンでジョブを実	T		vICQD59=C:¥Users¥Put vICQD60=C:¥Users¥Pu	blic¥gamess-64¥scratch¥propylene_work blic¥gamess-64¥scratch¥propylene_work	<1_GMS_OPT_gms_tmp.F59 <1_GMS_OPT_gms_tmp_F60
yw/r       mopac         f>////-h201/p       Default       New       Edt         f>////-h201/p       Default       New       Edt         f/j/ja/       Hindes=1:pp=%WM_NM_RCC%-Hwaltne=23:50:00       Image: the intervence of	プロファイル	pbs_example $\checkmark$ Config		/CQD61=C:¥Users¥Pu /CQD61=C:¥Users¥Pu	blic¥gamess-64¥scratch¥propylene_worl	<1_GMS_OPT_gms_tmp.F61
\$\vec{F127}\nu       \$\ve	אתע	mopac $\lor$		VCQD63=C:¥Users¥Pu VCQD63=C:¥Users¥Pu	blickgamess-644scratch4propylene_worl	<1_GMS_OPT_gms_tmp.F63 <1_GMS_OPT_gms_tmp.F63 <1_GMS_OPT_gms_tmp.F64
オプション すのdes=1:pp=%WM_NUM_PROC% + walture=23:50:00 Test Connection 除Control 接続情報 症状では、このののにない。、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、	テンプレートスクリプト	(Default) V New	Edit	WRINT1=C:¥Users¥Pi	ublickgamess-644scratch4propyrene_work	rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F61 rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F61
Test Connection       Image: Control         Test Connection       Image: Control         #RNINT5=0: #Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_OPT_ams_tmp.F66         Image: Control       Image: Control         ##RINT5=0: #Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_OPT_ams_tmp.F66         Image: Control       Image: Control         ##RINT5=0: #Users#Public#gamess=64#scratch#propylene_work1_GMS_OPT_ams_tmp.F66         Image: Control       Image: Control	オブション	-I nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC% -I walltime=23:50:00	~	VMRINT3=C:¥Users¥Pi VMRINT3=C:¥Users¥Pi	ublic¥gamess-64¥scratch¥propylene_wol ublic¥gamess-64¥scratch¥propylene_wol	rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F63 rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F63
#######         #######         ########         ########         ########         ########         #########         ####################################		Test Connection		WRINTS=C:¥Users¥P	ublic¥gamess-64¥scratch¥propylene_wol	rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F65
İdkidani         İdkidani         Image: State in the intervence of the		0.2		DCPHFH2=C:¥Users¥P	ublic#gamess=64#scratch#propylene_wol ublic#gamess=64¥scratch¥propylene_wol	rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F66 rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F67
1200:1040         1200:1040         □ ファイルの保存後ジョガを実行しない	+立くまりままで			JCPHF21=C:¥Users¥Pı ELNUINT=C:¥Users¥P	ublic¥gamess-64¥scratch¥propylene_wo ublic¥gamess-64¥scratch¥propylene wo	rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F68 rk1 GMS OPT gms tmp.F67
<pre>pr/uk/uk/#fdk3j376#fifuk/uk/</pre>	计变新元")音平限			NUNUINT=C:¥Users¥P	ublic¥gamess-64¥scratch¥propylene_wo	rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F68
□ ファイノム0/#存後ジョブを実行しない ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓				NUMOCAS=C:¥Users¥P	ublic#gamess=64#scratch#propyTene_work ublic#gamess=64#scratch#propyTene_wo	rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F70
並列啟	□ ファイルの保存後ジョブを罰	実行しない		NUELCAS=C:¥Users¥Pu RIVMAT=C:¥Users¥Pu	ublic¥gamess-64¥scratch¥propylene_wor	rk1_GMS_OPT_gms_tmp.F72 /1_GMS_OPT_gms_tmp_F51
#29708X       # of Threads / MPI Proc       1          # of MPI Procs       1       # of Threads / MPI Proc       1         fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1          fright       # of Threads / MPI Proc       1           fright       # of Threads / MPI Proc       1           fright       # of Threads / MPI Proc       1           fright       # of Threads / MPI Proc       1           fright <t< td=""><td>** TUFF</td><td></td><td></td><td>RIT2A=C: ¥Users¥Pub</td><td>lic¥gamess-64¥scratch¥propylene_work</td><td>1_GMS_OPT_gms_tmp.F52</td></t<>	** TUFF			RIT2A=C: ¥Users¥Pub	lic¥gamess-64¥scratch¥propylene_work	1_GMS_OPT_gms_tmp.F52
# of MPI Procs 1	业产生的复数			RII3A=C:¥Users¥Pub RIT2R=C•¥Users¥Pub	lic¥gamess-64¥scratch¥propylene_work` Lic¥gamess-64¥scratch¥propylene_work`	1_GMS_OPI_gms_tmp.F53 1_GMS_OPT_gms_tmp_F54
ビスフォルダ名 UPL 2015: ¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_OPT_gms_tmp.F70 ジンジンジンジンジンジンジンジンジンジンジンジンジンジンジンジンジンジンジン	# of MPI Procs 1	✓ # of Threads / MPI Proc 1 ✓		RIT3B=C: ¥Users¥Pub	lic¥gamess-64¥scratch¥propylene_work	1_GMS_OPT_gms_tmp.F55
作業フォノレタ名 work				DEN2P1=C:¥Users¥Puk	blic¥gamess-64¥scratch¥propylene_work	<1_GMS_OPT_gms_tmp.F70
通 実行 していたいは、「Annual Control of	作業フォルダ名	work		DENZPZ-C:#Users#Pur DEN2P3=C:#Users#Pu	blic¥gamess-64¥scratch#propylene_work blic¥gamess-64¥scratch¥propylene work	<1_GMS_OPT_gms_tmp.F71 <1_GMS_OPT_gms_tmp.F72
脱 実行 し LEN2NM=C: ¥Users¥Public¥gamess=64¥scratch¥propylene_work1_GMS_OPT_gms_tmp.F74 -				DEN2P4=C:¥Users¥Pu	blic¥gamess-64¥scratch¥propylene_worl	<1_GMS_OPT_gms_tmp.F73
N2				DEN2NM=C:¥Users¥Pu	blic¥gamess-64¥scratch¥propylene_work	<1_GMS_OPT_gms_tmp.F74
		W				

補足:入力ファイルを自分で修正したい場合やリモートサーバに自分でコピーして使用したい場合は、ジョブの設定ウィンドウでファイルの保存後ジョブを実行しないにチェックを入れ実行をクリックします。保存後に計算を実行したい場合はファイル | プロジェクト | 選択された作業フォルダ | Runをクリックします。

- メインウィンドウに戻ると(計算実行中でも構いません)、プロジェクト表示エリアにMOPAC Workflow Setupウィンドウの各ジョブに対応する2つの作業フォルダの親子関係がツリー状に表 示されます。
- 2. 分子表示エリアには自動的に最初の作業フォルダ(work1\_MOP\_OPT)の入力ファイルが開かれます。分子表示エリアの上部でもそのことを確認できます。

[	D 📑 🖬	- 1	Ø	B	₽	Ŀ	• 0	<u>î</u> (	0	ľ	<u> </u>		אוע N	OPAC		~		RON	•	Ħ	∽~	-	54	ル/電荷	(ラベル/1
元	素 H 1 V +	<b>Q</b>	<b>Q</b> (	•	<b>•</b> ∳•	+Н	۹,	%	フラグ:	אטר <mark>- כ</mark> ו	нз	\ \	~ Replace	<b>2</b>	4	Ø	٢	e	¢.	⊧ <u></u> ‡⊒					
≽	最近使ったプロジェクト					tB						work1	L_MOP_OP	•	1ル <mark>(</mark> መ	op_tmp.o	lat)							≫ アニメ・	ーション
0	プロジェクト propylene	状態 PEND(	2/2)				N= 9 Mark	C3H6 ed Oro	6 M= 4 der: 9 -	2.08 - 1 - 2 -	- 0		<b>E4 7</b> 0/											≫ キーワ	
							Leng	ed Ato th= 3.2	0m: X= 207932	2.81604 Angle=	28.617	.2394 726 Di	ihedral= '	Lper= *										≫ 座標	
						×																		表示形式	● XYZ
×	プロジェクト				L																			Elem	X 0.000
作真	美フォルダ (propylene_n	nopac)	Opti	ons 🔻	L																			2 0	1.3310
	名前		状態			12																		4 H 5 H	-0.5861 -0.5946
0	work1_MOP_OPT		RUN																					6 H	1.8972
L	work2_MOP_IR		PEND			0									2									8 H 9 H	1.5394
						ф																			
۲				2	•	⊞							T	Ì									Þ		
アク	ション (work1_MOP_OP	т)				0							~ <u>}</u> ~		6										
-	Coordinate (Initial)					0																			

ファイル(F) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(T) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)

- 計算の進行状況に応じて、プロジェクト表示エリアで各作業フォルダの状態がPEND(黒) →RUN(緑)→END(青)と変化します。
- 全ての作業フォルダの状態がEND(青)に変化するまで待ちます。この際最近使ったプロ ジェクトの「propylene\_mopac」の状態もALL END(青)に変化します。



- 1. 各計算のログの主要な内容を見たい場合は、プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象と なる計算の作業フォルダをクリックして選択し、アクションのLog (Archive)をクリックしま す。ここでMOPAC定義の生成熱(HEAT OF FORMATION)、イオン化ポテンシャル (IONIZATION POTENTIAL)を確認することができます。
- 2. 完全なログを見たい場合はLogをクリックします。

	5 B I		I mop_tmp.arc - Xt版 - L X
元素    1 -> + Q	e 🥥 🔸	<b>•</b> ∳•	ファイル(E) 編集(E) 書式(Q) 表示(V) ヘルフ(H)
よび使ったプロジェクト     よ		ì	
プロジェクト 状態			SOMMARY OF AMIT CALCOLATION
∋ propylene ALL E	ND		VERSION 6.03
			СЗ Н6
≠ プロジェクト	*		AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK
葉フォルダ (propylene_mopac)	Options ▼		Winmostar
名前	状態		
work1_MOP_OPT	END		GRADIENTS WERE INITIALLY ACCEPTABLY SMALL
work2_MOP_IR	END		SCF FIELD WAS ACHIEVED
: クジョン (work1_MOP_OPT) Coordinate (Initial) Coordinate (Final) 違 Log Log Log (Archive)	,		HEAT OF FORMATION = 6.570561 KCAL ELECTRONIC ENERGY = -1385.432872 EV CORE-CORE REPULSION = 919.104336 EV DIPOLE = .22966 DEBYE NO. OF FILLED LEVELS = 9 IONIZATION POTENTIAL = 9.991777 EV MOLECULAR WEIGHT = 42.080 SCF CALCULATIONS = 1 COMPUTATION TIME = .016 SECONDS
MO & Charge			AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK
			Winmostar C .0000000 0 .000000 0 .000000 0 0 02259 C 1.3310450 1 .000000 0 .000000 0 1 0 01619

#### 補足計算の継続

//// W

本書では本ページの操作は不要です。

- 1. すでに完了した計算から最終状態の原子座標を引き継いで計算を開始したいときは、まず **(ワークフロー設定)**をクリックします。
- 2. 情報ダイアログではいをクリックします。
- 3. ジョブの継続元の作業フォルダを選択で継続元の作業フォルダを選択してからOKをクリック します。
- 4. MOPAC Workflow SetupウィンドウでP.8と同様に設定を行い計算を開始します。

※ファイルモードのように継続元ジョブの最終構造をメインウィンドウに表示しておく必要はありません。

ジョブの維続元の作業フ	フォルダを選択し	てください		
字前				
	状態	7077111	說明	
work1_MOP_OPT	END	Local Job 🧹		
work2_MOPJR	END	Local Job		
			OK	
			UK	
	各前 work1_MOP_OPT ► work2_MOPJR	名前 work1 MOP_OPT END work2_MOPJR END END END END END END END END	名前 work1 MOP_OPT END Local Job work2 MOPJR END Local Job V Co Ltd.	Shi 状態 フロファイル work1 MOP_OPT END Local Job work2 MOPJR END Local Job □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □

#### 補足計算の継続

本書では本ページの操作は不要です。

すでに完了した計算の最終状態の分子構造を編集してから計算を開始する方法を紹介します。

- プロジェクト表示エリアの作業フォルダで編集元構造の作業フォルダをクリックし、アクションでCoordinate (Initial)(初期構造を編集する場合)またはCoordinate (Final)(最終構造を編集する場合)をクリックします。
- 2. 各種ツールボタンや編集メニュー以下の機能を利用して分子構造を編集します。「…出力可能 なファイル形式に編集し続行しますか?」と表示されたらはいをクリックします。
  - 一旦作業を中断したい場合は、 (2)(上書き保存)ボタンをクリックすると構造が保存され、Winmostarの再起動後でもプロジェクトを開きなおすと編集中の構造が再び出現します。または、 (1)(ファイルをエクスポート)をクリックし構造ファイルとして保存し、必要な段階で (1)(ファイルをインポート)をクリックして保存した構造ファイルの構造を読み込みます。

#### III.結果解析 安定構造

以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

- **1. プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で構造最適化計算の作業フォルダ (work1\_MOP\_OPT)をクリックします。
- 2. アクションでCoordinate (Final) をクリックすると、分子表示エリアに構造最適化計算の最 終構造が表示されます。



#### III.結果解析 安定構造(結合長、結合角)

 原子間距離は、2つの原子を続けてクリックすると Length(Å)に表示されます。

 結合角は、3つの原子を続けてクリックすると Angle(degree)に表示されます。

 二面角は、4つの原子を続けてクリックすると Dihedral(degree)に表示されます。

Winmostar Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

N= 9 C3H6 M= 42.08 Marked Order: 1 - 5 - 2 - 6 Marked Atom: X= 0 Y= 0 Z= 0 Length= 1.09783 Angle= 31.59992 Dihedral= -0.03733 Lper= 0.0004



N= 9 C3H6 M= 42.08 Marked Order: 2 - 1 - 5 - 6 Marked Atom: X= 1.331045 Y= 0 Z= 0 Length= 1.331045 Angle= 122.79432 Dihedral= -0.02103 Lper= 0.0004



N= 9 C3H6 M= 42.08 Marked Order: 6 - 2 - 1 - 5 Marked Atom: X= 1.897197 Y= -0.947113 Z= 0.000397 Length= 1.103427 Angle= 120.86955 Dihedral= 179.97598 Lper= 0.00039



## III.結果解析 安定構造 (Mulliken電荷)

最終構造が表示された状態では、分子表示エリアの下部に「Charges Available: Mulliken…」と 表示され、Mulliken電荷が割り当てられていることが分かります。この状態でツールバーの**ラベ ル/電荷**を「Mulliken電荷」に変更すると分子表示エリアで各電子のMulliken電荷を確認できます。





Charges Available: Mulliken (Qtot=0.00,Qrms= 0.138)

#### III.結果解析 分子軌道

- **1. プロジェクト表示エリア**の作業フォルダで構造最適化計算の作業フォルダ (work1\_MOP\_OPT)をクリックします。
- 2. アクションでMO & Chargesをクリックすると、Energy Level Diagramウィンドウと Surface Setupウィンドウが表示されます。Energy Level Diagramウィンドウでは各分子軌 道のエネルギーやHOMO-LUMOギャップを確認できます。

♥ プロジェクト		1 M Energy Level —		M Surface Setup – 🗆 🗙
◆ クロウエクト 作業フォルダ (propylene_mopac) 名前 ● work1_MOP_OPT ■ work2_MOP_IR	Options 状態 END END	HOMO: 9 HOMO-LUMO Gap: 11.3565 eV LUMO Energy: 1.3647 eV HOMO Energy: -9.9918 eV	□ × hit: ○Hartree ●eV ffset cale ×	Surface Setup     —     X       File(F)     Z       C:¥winmos1130test1¥UserData¥propylene_mopac.wmpjdata¥work1_MOP_OPT¥mo,     Z       Quantity     MO     ✓       Selected MO     9     Show Diagram
< アクション (work1_MOP_OPT) Coordinate (Initial)		$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	_	Parameters         Draw Style       Smooth ~         Draw boundary       Dump cube file         Transparency       0.2       ~         Isosurface Value       0.03         Points       50       Scale
Coordinate (Final) Log Log (Archive) MO & Charge Show in Explorer		4 -15.9311 3 -20.5172 2 -27.8292 1 -35.0601 Excel	Close	Export▼ Draw Close 表示項目 □ 最近 属性 番号

#### III.結果解析 分子軌道

- Energy Level Diagramウィンドウで3D表示したい軌道をクリックして選択し(デフォルト では電子が入っている軌道の中で最もエネルギーが高いHOMOが選択されます)、Surface SetupウィンドウのDrawボタンをクリックします。
- 2. Winmostar Viewerが起動し、1で選択された分子軌道が3D表示されます。

1 20 Energy Level — □ ×	Surface Setup — — X	Winmostar Viewer V11.3.0 mop_tmp.mgf MO #9 isoval=0.03 — □ × File View Help
HOMO: 9     Unit: O Hartree       HOMO-LUMO Gap:     Image: O eV       11.3565 eV     Offset       LUMO Energy:     < >       1.3647 eV     < >       HOMO Energy:     -9.9918 eV       -9.9918 eV     < >	File(F)         C:\$\u00e4winmos1130test1\u00e4UserData\u00e4propylene_mopac.wmpjdata\u00e4work1_MOP_OPT\u00e4mo         Quantity       \u00e4o         Selected MO       9       \u00e5o         Parameters       \u00e4o	
17     5.6636       16     5.1141       15     4.9021       14     4.5829       13     4.4881       12     4.3408       11     3.9583       10     1.3647       9     -9.918       8     -11.8599       7     -12.5426       6     -14.0397       5     -14.3731       4     -15.9311       3     -20.5172       2     -27.8232       1     -35.0601	Parameters Draw Style Smooth ∨ □Draw boundary □Dump cube file Transparency 0.2 ∨ □Draw contour map Isosurface Value 0.03 Points 50 Scale 1.5 Export▼ Draw 表示項目 □最減	

## III.結果解析 ゼロ点エネルギー

- **1. プロジェクト表示エリア**の**作業フォルダ**で振動計算の作業フォルダ(work2\_MOP\_IR)を クリックします。
- 2. アクションでLogをクリックしログファイルを開きます。このファイルでは170行目付近でゼ ロ点エネルギー(ZERO POINT ENERGY)を確認することができます。



# VIII.IRスペクトル計算

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで振動計算の作業フォルダ(work2\_MOP\_IR)をク リックしアクションでIRをクリックしIRスペクトルを確認します。
- 2. IR Spectrumウインドウ上で1850 cm<sup>-1</sup>付近をクリックしてからAnimationボタンをクリックします。Winmostar Viewerが起動し、選択した振動モードの原子の動き(C=Cの伸縮モード)を動画で確認します。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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