

 winmostar チュートリアル

# NWChem

## 部分構造最適化計算

V11.16.0

2026年4月6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v11.16.0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。

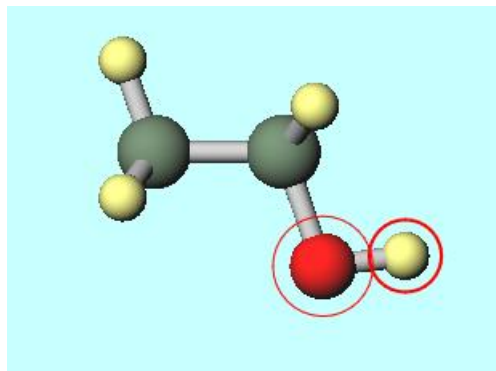
# 本書について

- 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Z-Matrix座標を使った結合長、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。

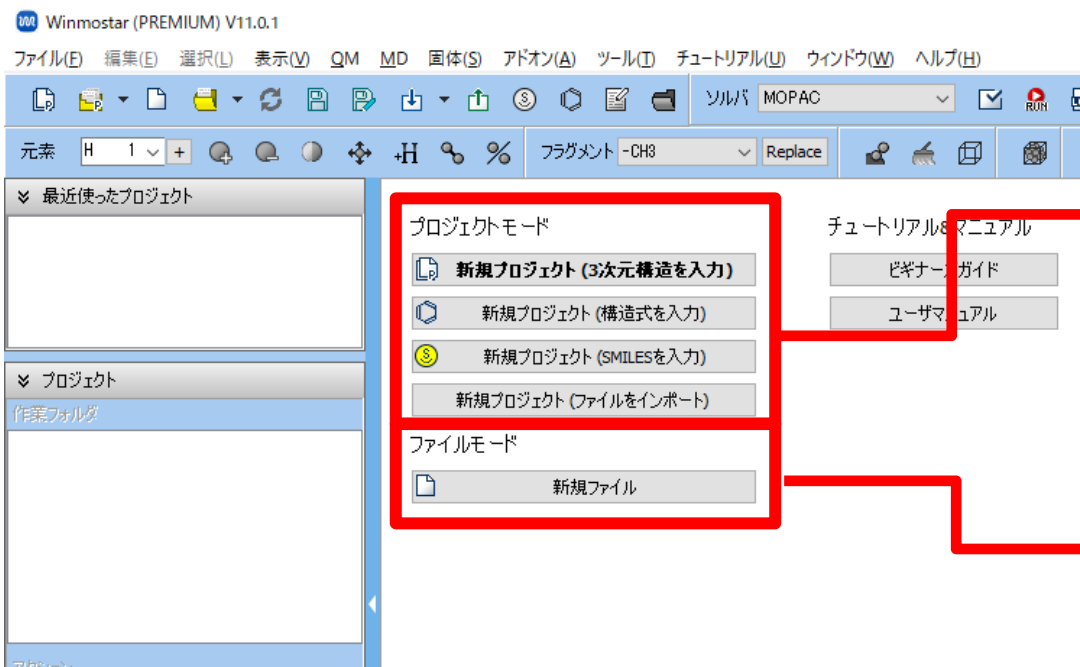


# Winmostar V11の動作モード

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NWChem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

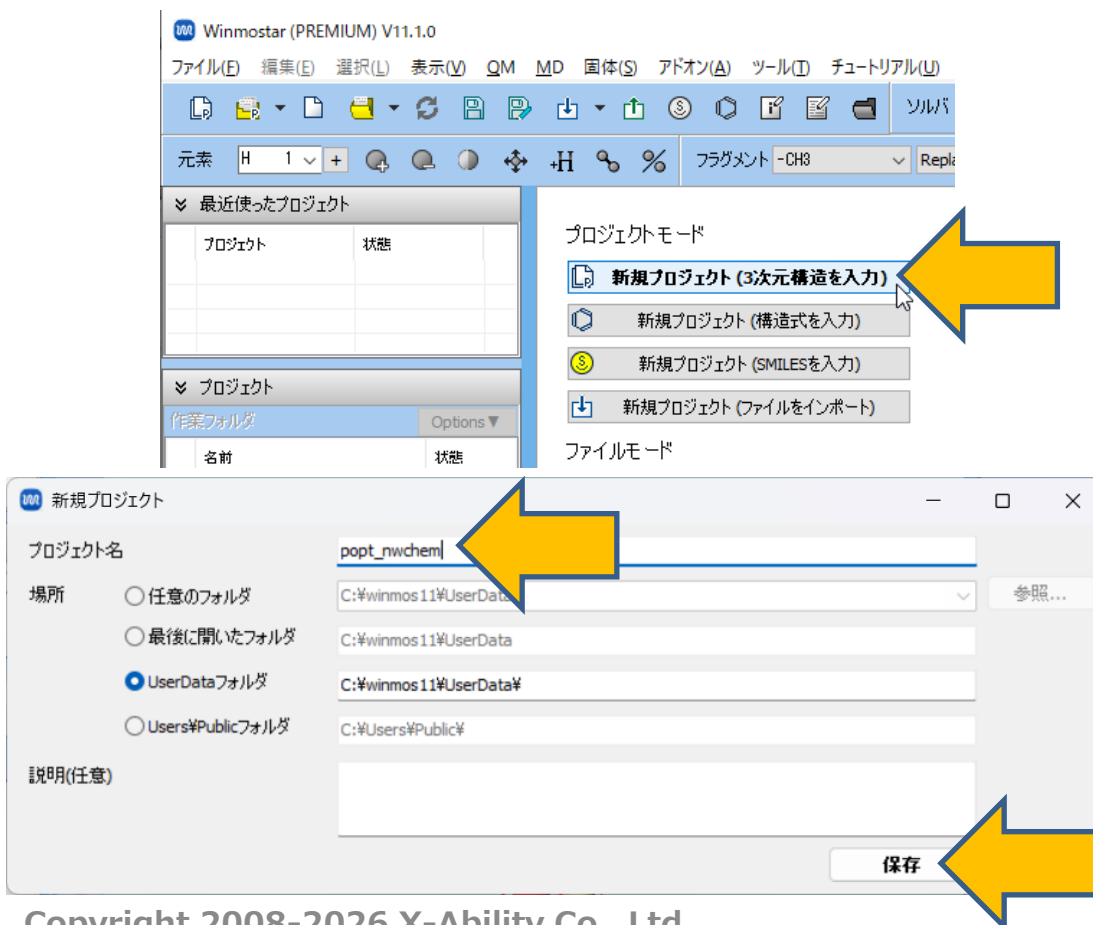
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

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

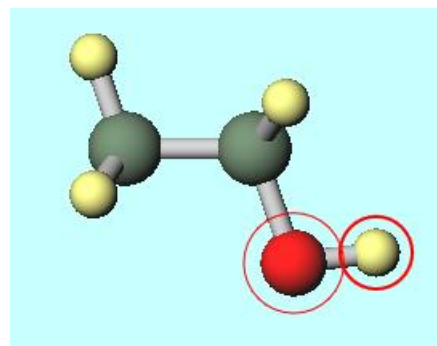
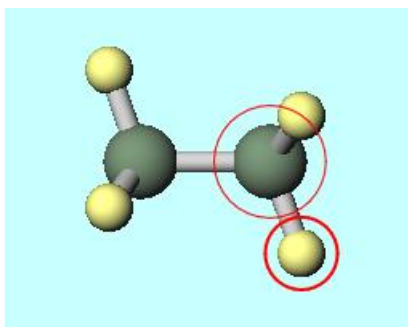
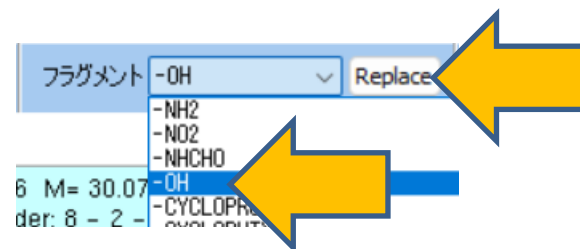
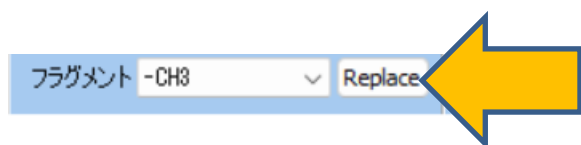
# I. 系のモデリング

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\_nwchem」と入力し**保存**をクリックします。



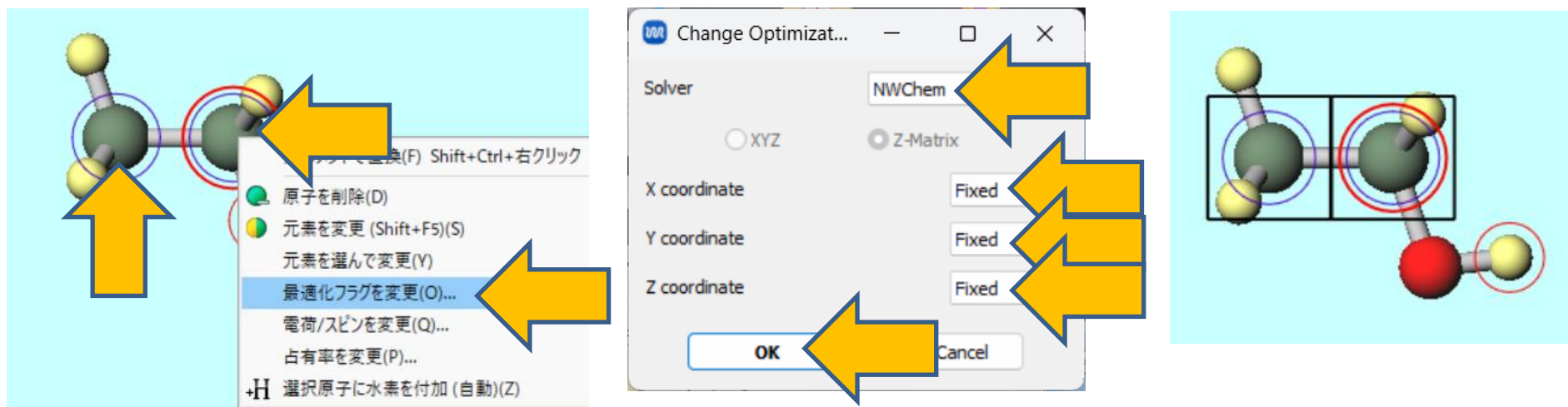
# I. 系のモデリング

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



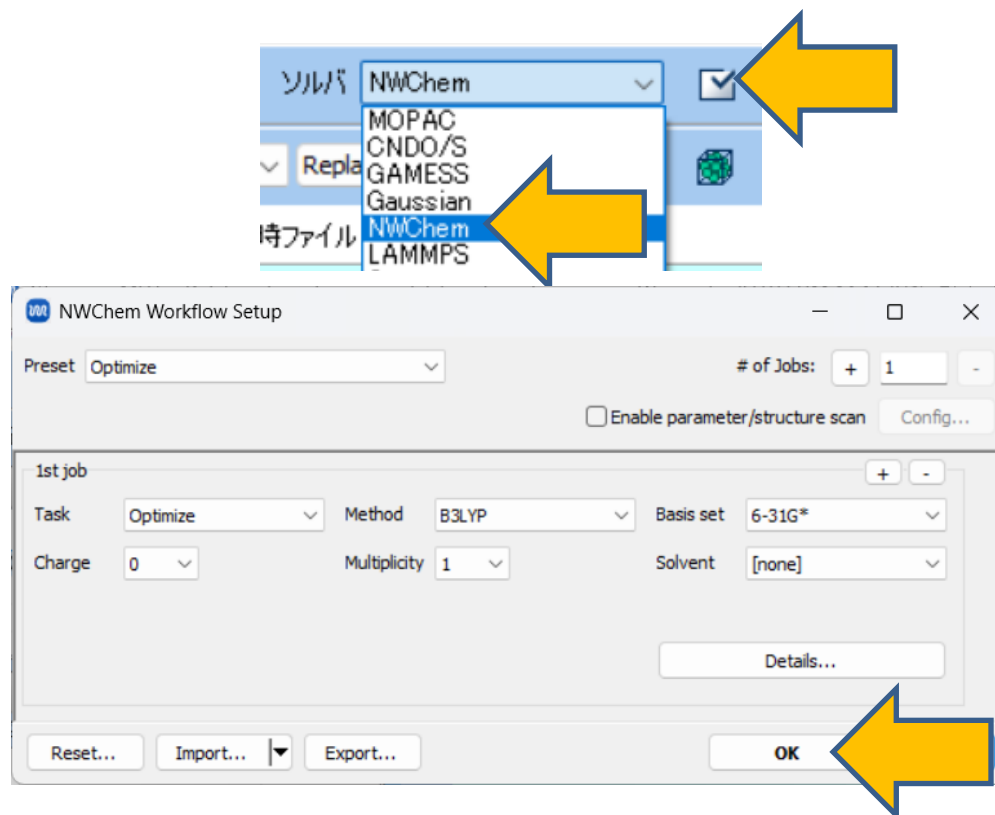
# I. 系のモデリング

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**NWChem**、**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。
- NWChem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。



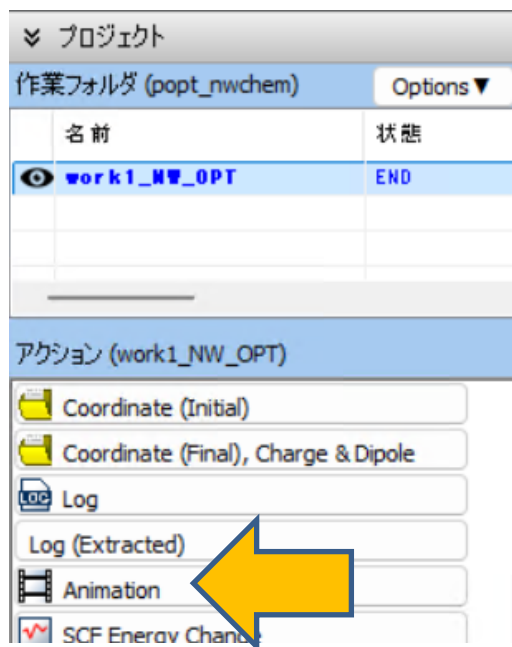
## II. 計算の実行

1. ソルバを選択メニューでNWChem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. NWChem 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\_NW\_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。



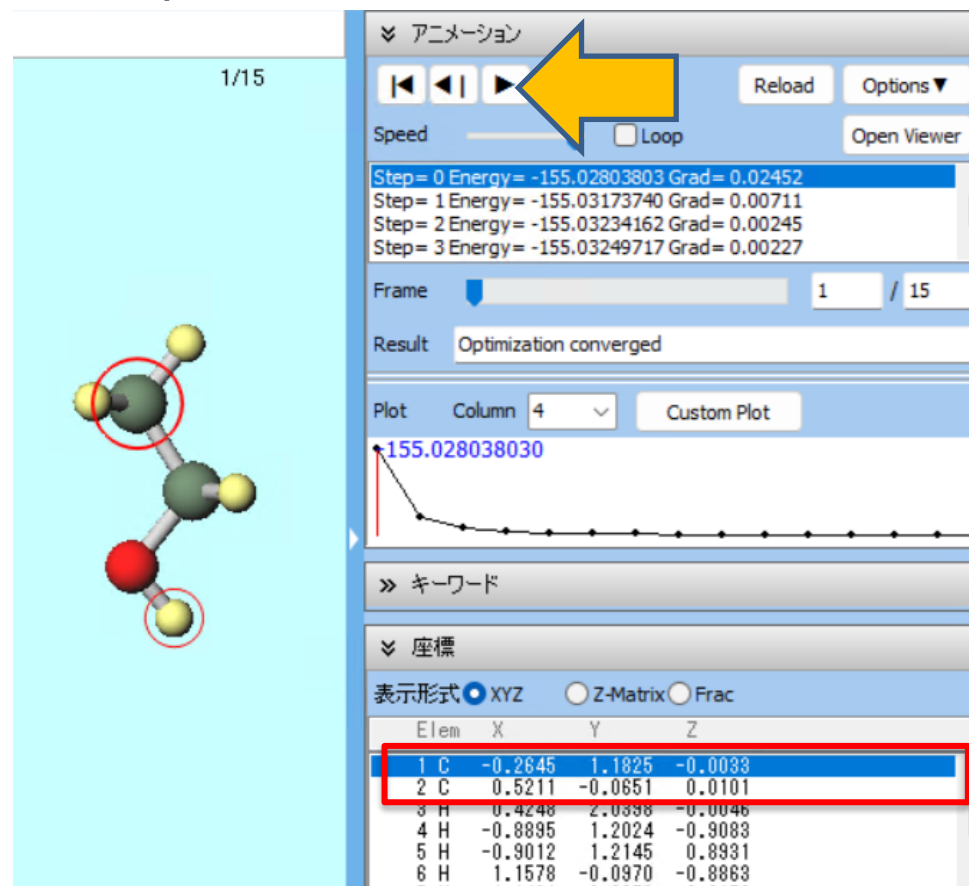
プロジェクト

作業フォルダ (popt\_nwchem) Options ▾

名前	状態
work1_NW_OPT	END

アクション (work1\_NW\_OPT)

- Coordinate (Initial)
- Coordinate (Final), Charge & Dipole
- Log
- Log (Extracted)
- Animation
- SCF Energy Change



1/15

アニメーション

Speed  Loop Open Viewer

Step= 0 Energy= -155.02803803 Grad= 0.02452  
Step= 1 Energy= -155.03173740 Grad= 0.00711  
Step= 2 Energy= -155.03234162 Grad= 0.00245  
Step= 3 Energy= -155.03249717 Grad= 0.00227

Frame 1 / 15

Result Optimization converged

Plot Column 4 Custom Plot

155.028038030

キーワード

座標

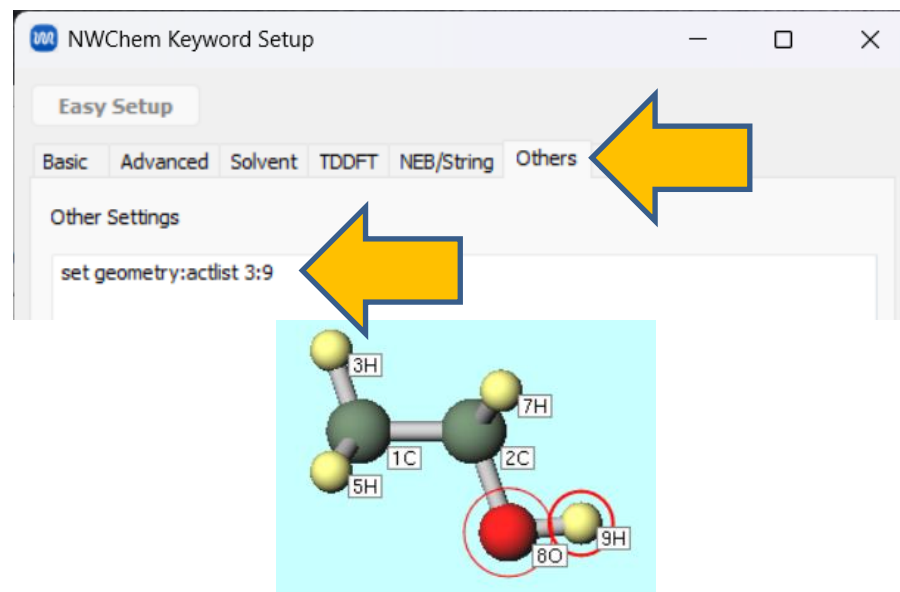
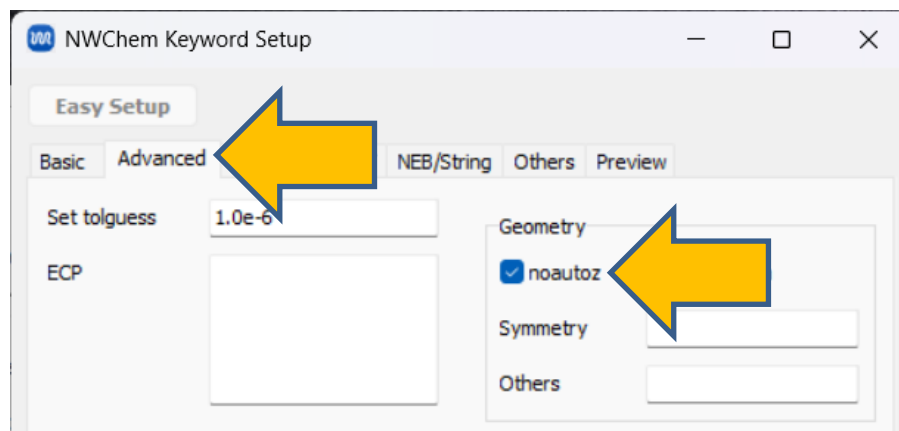
表示形式  XYZ  Z-Matrix  Frac

Elem	X	Y	Z
1 C	-0.2645	1.1825	-0.0033
2 C	0.5211	-0.0651	0.0101
3 H	0.4248	2.0338	-0.0046
4 H	-0.8895	1.2024	-0.9083
5 H	-0.9012	1.2145	0.8931
6 H	1.1578	-0.0970	-0.8863

# 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：

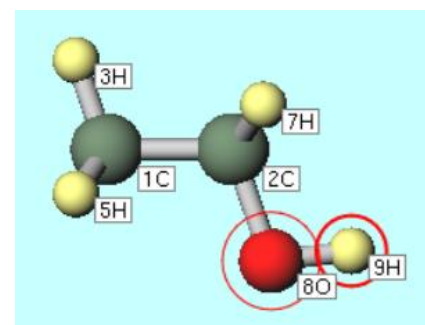
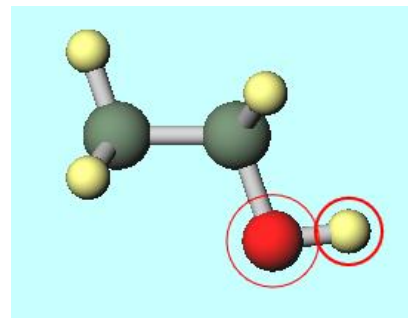
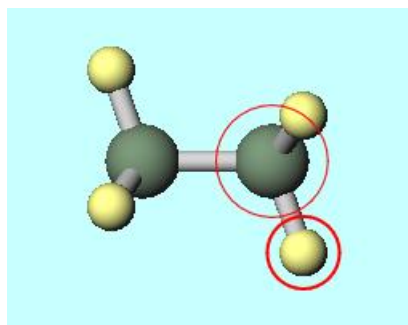
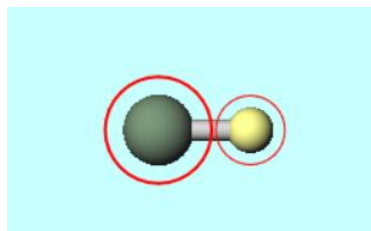
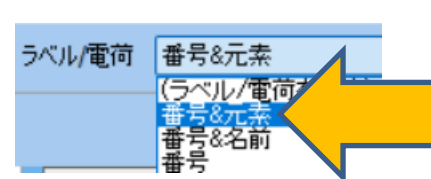
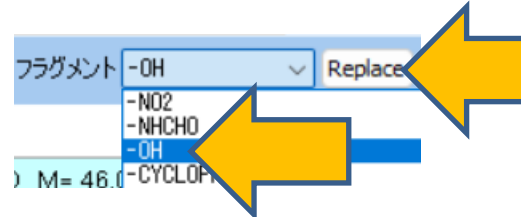
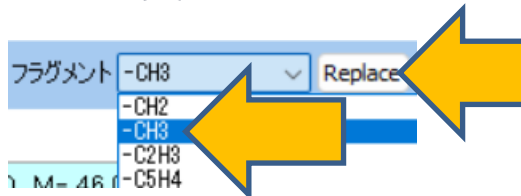
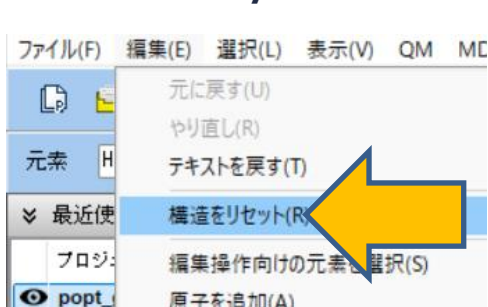
1. NWChem Workflow Setupウィンドウで**Details**ボタンをクリックします。
  2. 2つの炭素原子（**1C**と**2C**の1番目と2番目の原子）を固定する場合、NWChem Keyword Setupウィンドウで**Advanced**タブの**geometry**の**noautoz**にチェックを入れます。OthersタブのOther Settings欄にset geometry:actlist 3:9を記入します。
- set geometry:actlistには、構造最適化で動かす原子全てを空白区切りで記入します。コロン(:)で連続する原子をまとめて書くことも可能です。



## 2. Z-Matrix座標を使った結合長・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。



# IV.系のモデリング

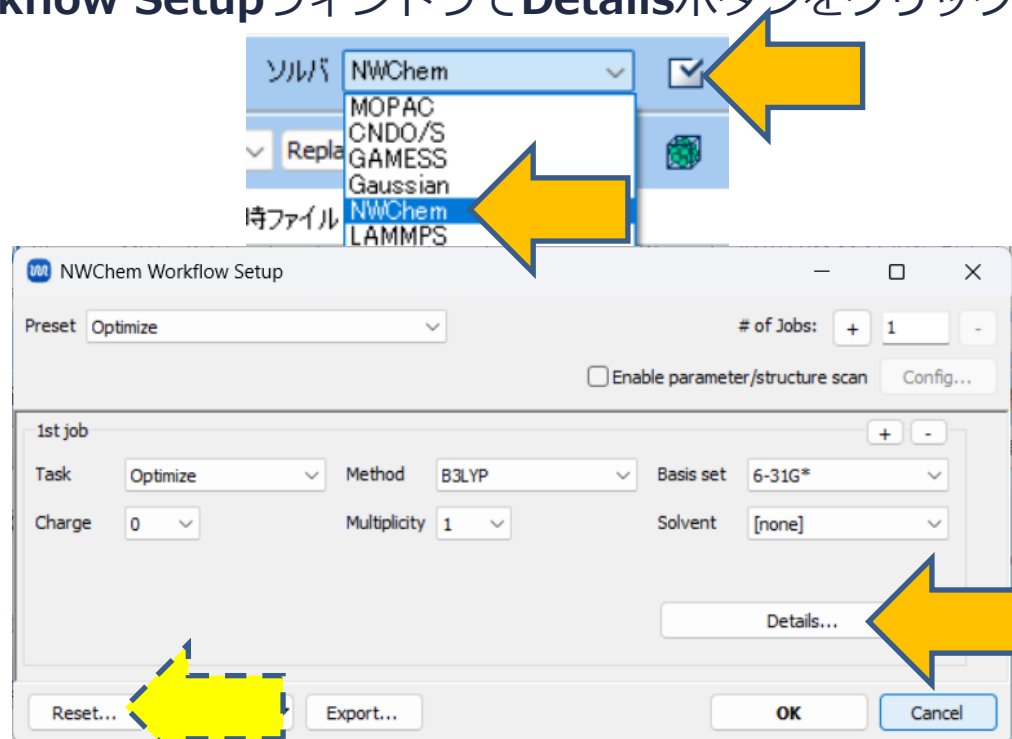
1. 座標表示エリアの表示形式をZ-Matrixに変更します。
  2. 9番目のHの行をクリックして、最適化フラグの数値を全て0に変更します。
- Z-Matrixでは、すでに配置された原子との結合長、結合角、二面角から新たな原子を配置します。下記の場合9番目のHは、Atom1の8番目の原子との結合長0.96 Å、Atom2(2番目の原子)-Atom1(8番目の原子)との結合角101.7°、Atom3(1番目の原子)-Atom2(2番目の原子)-Atom1(8番目の原子)との二面角170°の位置に配置されます。今回は、これらの結合長、結合角、二面角を固定して構造最適化を行います。

The screenshot shows a software window titled "座標" (Coordinates). It has two radio buttons for "表示形式" (Display Format): "XYZ" and "Z-Matrix". The "Z-Matrix" option is selected. Below this is a table with columns: "Elem", "Bond", "Opt", "Angle", "Opt", "Dihedral", "Opt", "Atom1". The 9th row is highlighted in blue and contains: "9 H 0.96000 0 101.7031 0 170.0000 0". Below the table, there are fields for "表示項目" (Display Item), "属性" (Property), and "座標" (Coordinates). At the bottom, there are three dropdown menus for "最適化フラグ" (Optimization Flag) with values 0, 0, and 0. Below these are labels "Atom1 8", "Atom2 2", and "Atom3 1". Three yellow arrows point to the "Z-Matrix" radio button, the 9th row of the table, and the first optimization flag dropdown. A red box highlights the optimization flag section.

Elem	Bond	Opt	Angle	Opt	Dihedral	Opt	Atom1	
1	C	0.00000	1	0.0000	1	0.0000	1	0
2	C	1.47440	1	0.0000	1	0.0000	1	1
3	H	1.10000	1	109.0000	1	0.0000	1	1
4	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	1
5	H	1.10000	1	109.0000	1	-120.0000	1	1
6	H	1.10000	1	109.0000	1	-60.0000	1	2
7	H	1.10000	1	109.0000	1	60.0000	1	2
8	O	1.37740	1	109.0000	1	180.0000	1	1
9	H	0.96000	0	101.7031	0	170.0000	0	1

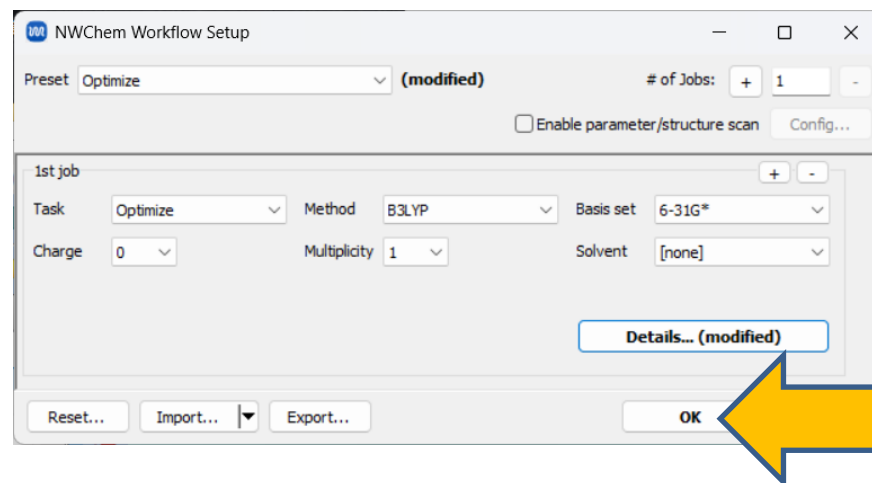
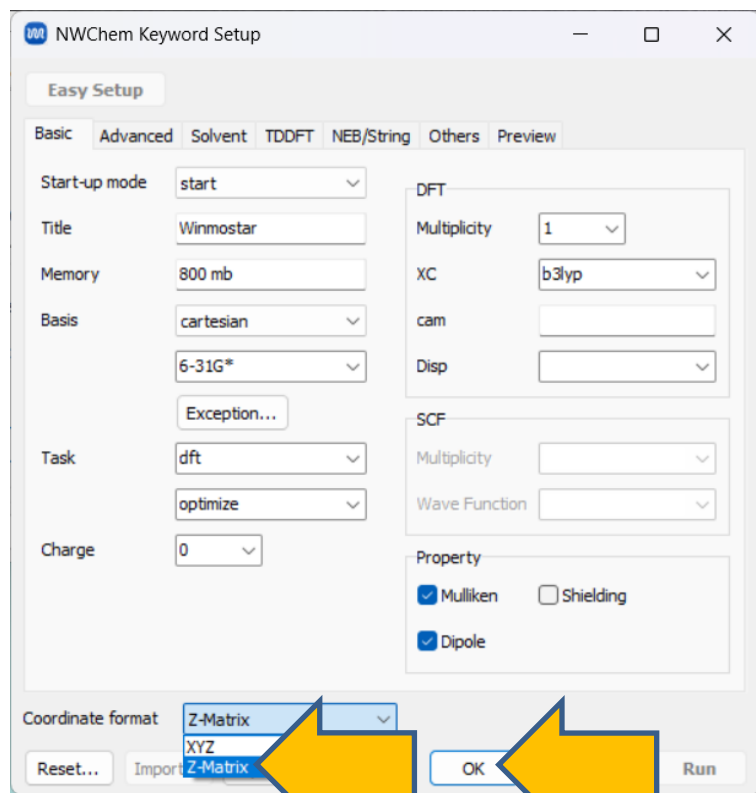
## V. 計算の実行

1. ソルバを選択メニューで**NWChem**を選択して、**ワークフロー設定**ボタンをクリックします。  
前半のCartesian座標一部固定構造最適化を行った場合、「継続ジョブを実行しますか?」と表示されるので、「いいえ」をクリックします。
  - 前半のCartesian座標一部固定構造最適化で、Keyword Setupウィンドウを手動で変更した場合は、**Reset**ボタンをクリックします。
2. **NWChem Workflow Setup**ウィンドウで**Details**ボタンをクリックします。



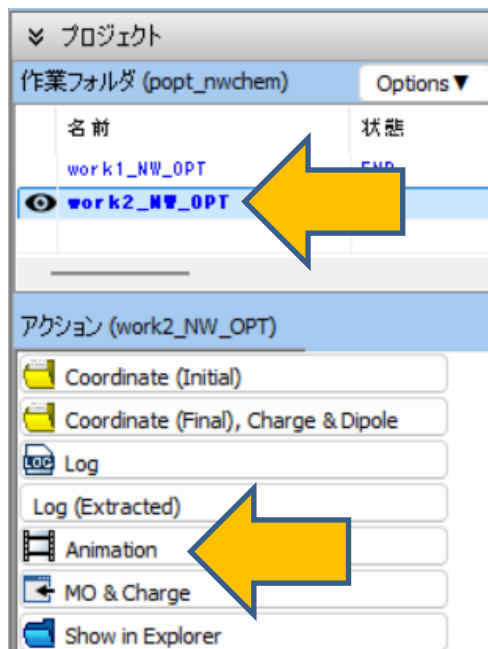
# V. 計算の実行

1. NWChem Keyword SetupウィンドウでCoordinate formatをZ-matrixに変更して、OKをクリックします。
2. NWChem 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\_NW\_OPT** の作業フォルダの状態が **END** に変化した後、**work2\_NW\_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。



The top part of the image shows the 'アニメーション' (Animation) control panel. It includes playback buttons (stop, play, next), a 'Speed' slider, a 'Loop' checkbox, and buttons for 'Reload', 'Options', and 'Open Viewer'. A yellow arrow points to the play button.

Below the control panel is a 3D molecular model of a molecule. The atoms are labeled: 5H, 1C, 2C, 8O, and 9H. Four yellow arrows labeled 1, 2, 3, and 4 point to atoms 1C, 2C, 8O, and 9H respectively. The model is set against a light blue background.

Text data for the model:

```
N= 9 C2H6O M= 46.07  
Marked Order: 9 - 8 - 2 - 1  
Marked Atom: X= 0.258469 Y= -1.871423 Z= -0.142797 H  
Length= 0.96 Angle= 101.7031 Dihedral= 170 Lper= 0.24208
```

# 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