

 winmostar チュートリアル

NWChem

蛍光・りん光スペクトル計算

V11.15.3

2026年4月14日 株式会社クロスアビリティ

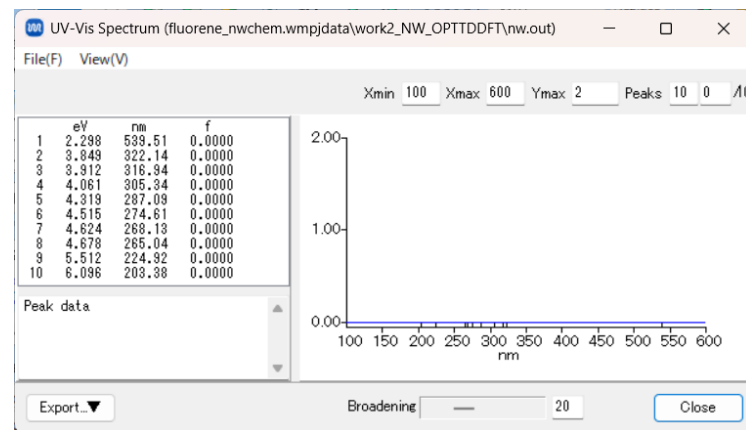
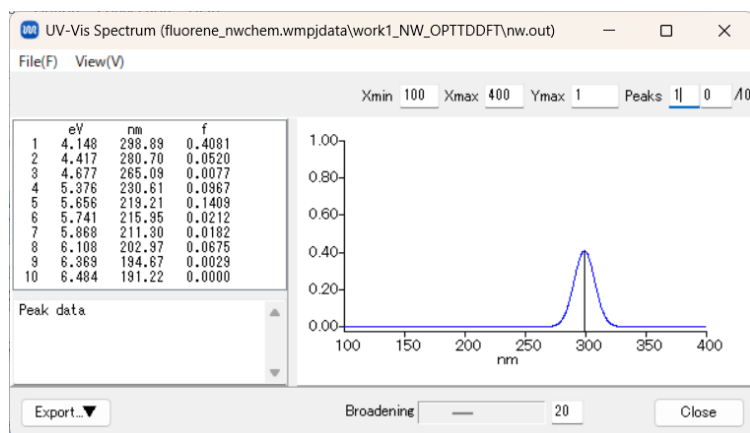
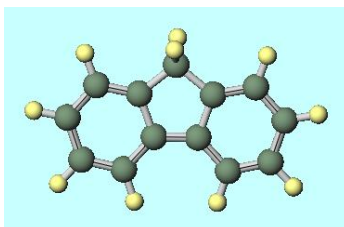
本書について

- 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

- フルオレン(C₁₃H₁₀)分子の蛍光スペクトル計算をGaussianを用いて実行します。前半は、一重項第1励起状態の構造最適化計算をTDDFT(B3LYP/6-31G*)レベルで実行し、蛍光スペクトルを表示します。後半は、三重項第1励起状態の構造最適化計算をTDDFT(B3LYP/6-31G*)レベルで実行し、りん光スペクトルを表示します。最後の補足に、任意の励起状態の構造最適化の手順も記載しています。

注意点：一重項と三重項が混ざらない(スピン軌道相互作用が入っていない)非相対論の範囲での計算のため、りん光計算での強度は理論上必ず0になり、波長のデータのみ得られます。

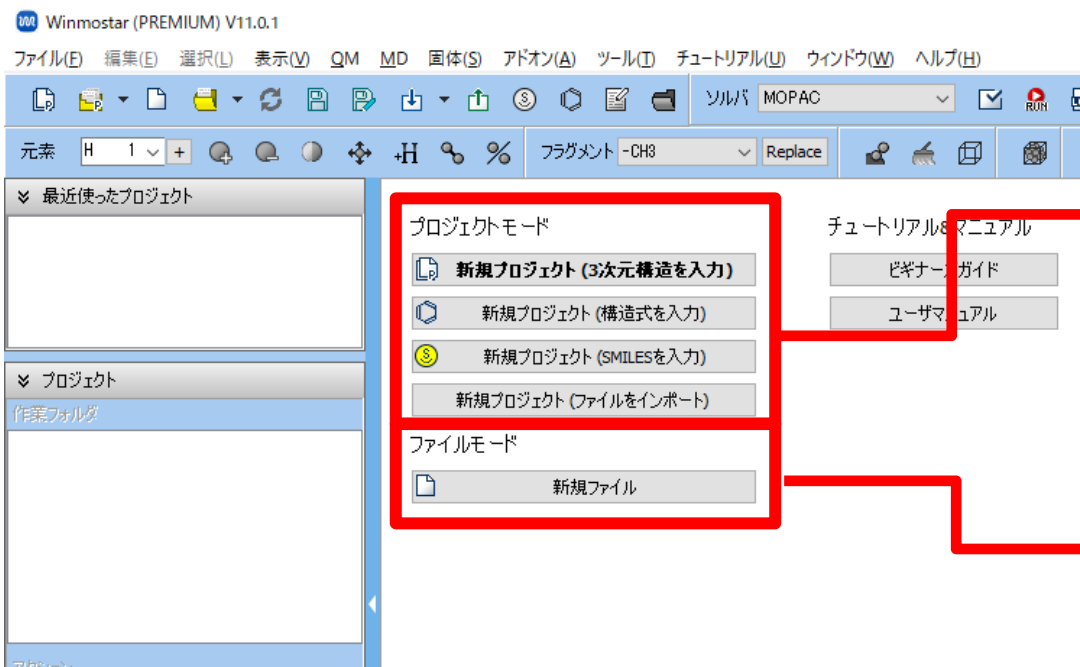


Winmostar V11の動作モード

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。

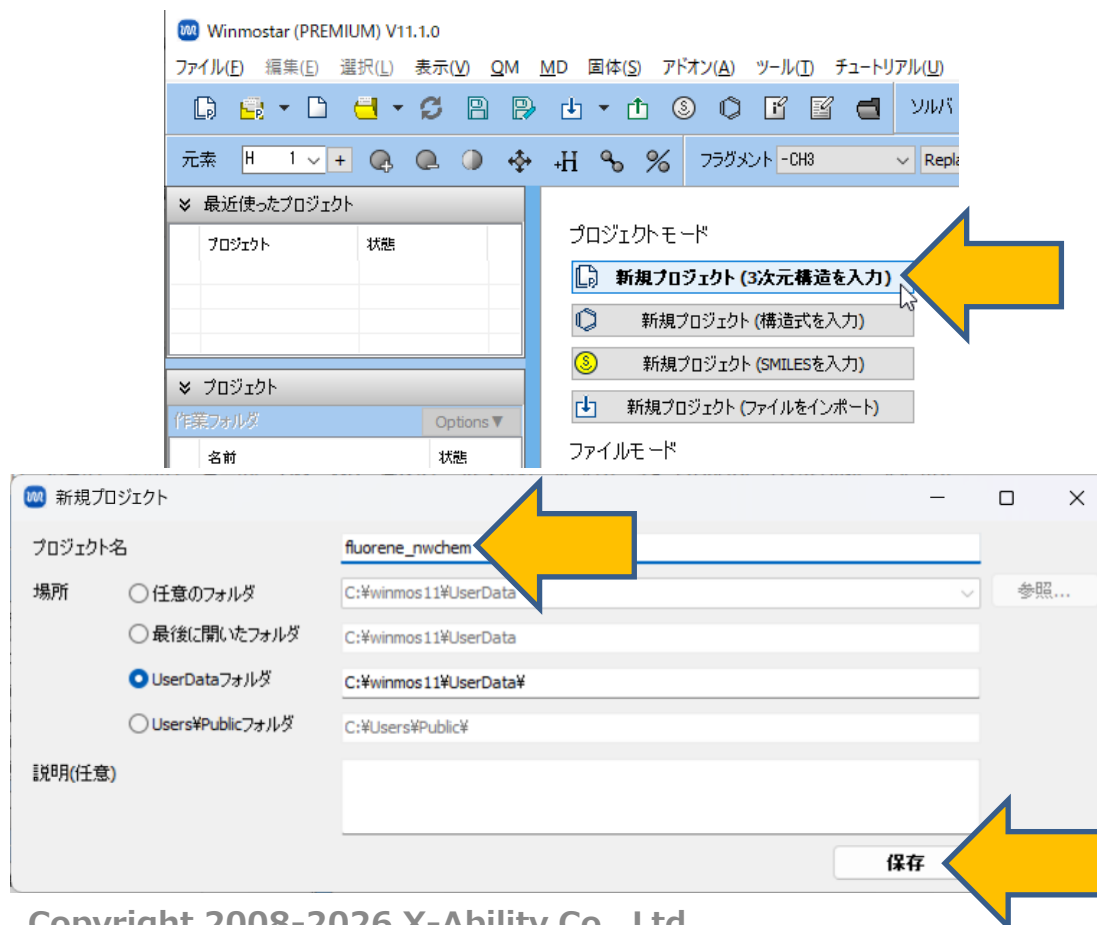
ファイルモード

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。

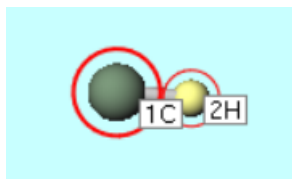
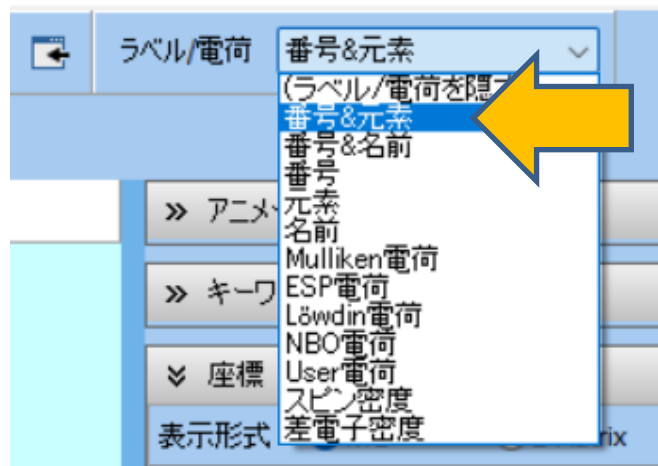
I. 系のモデリング

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「fluorene_nwchem」と入力し**保存**をクリックします。



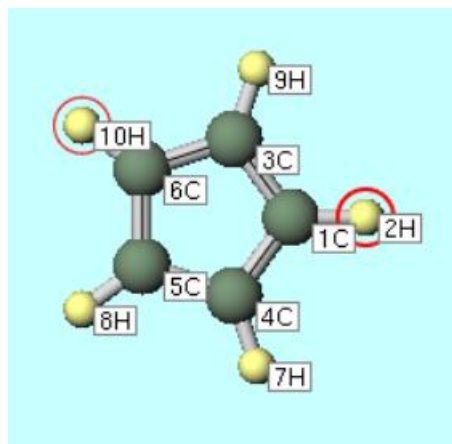
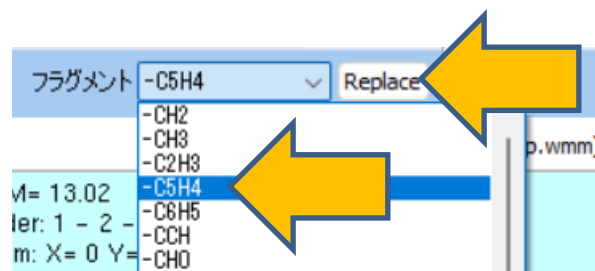
I. 系のモデリング

1. メインウィンドウ右上のラベル/電荷メニューから番号&元素を選択し、分子表示エリアで各原子の名前を表示します。



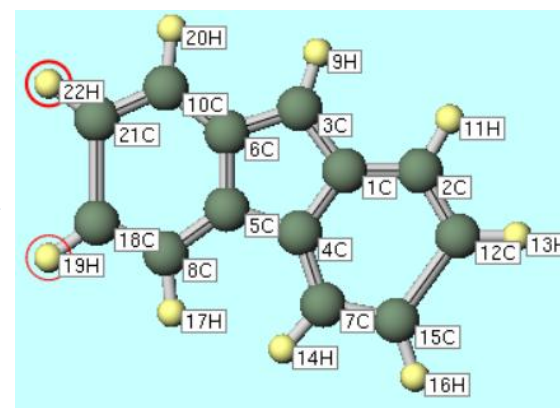
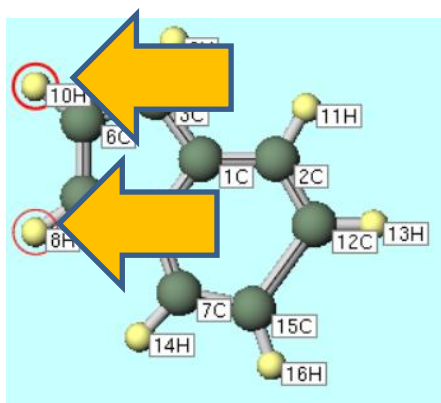
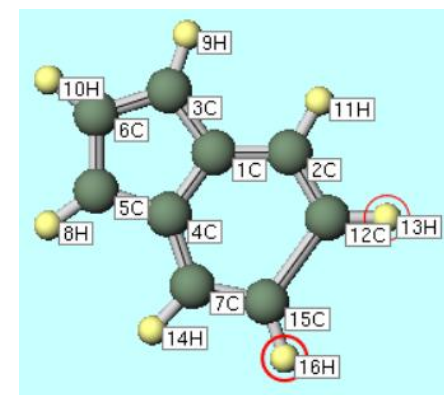
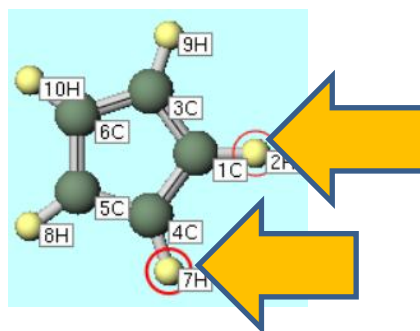
I. 系のモデリング

1. フラグメントを選択から-C5H4を選択し、その右にあるReplaceボタンを1回クリックします。



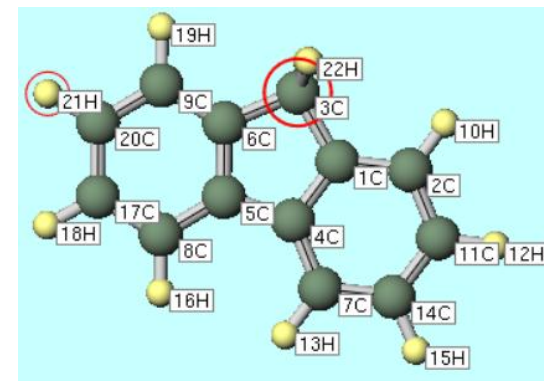
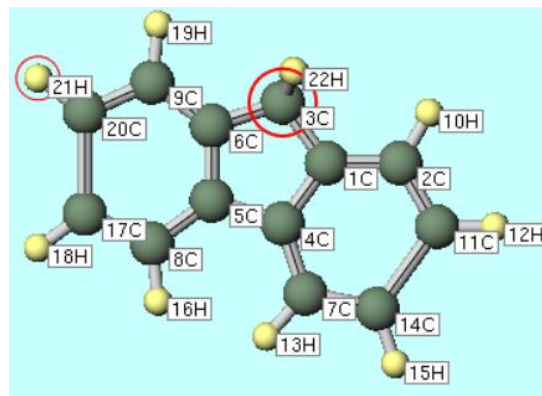
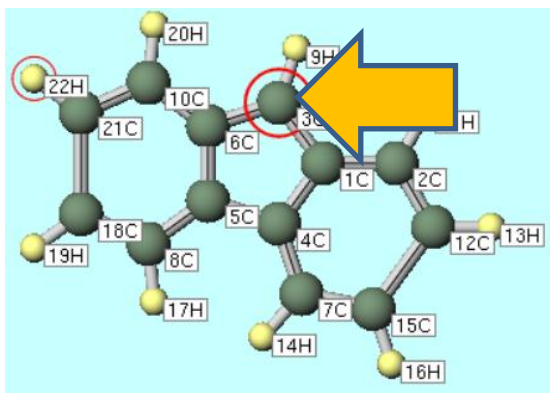
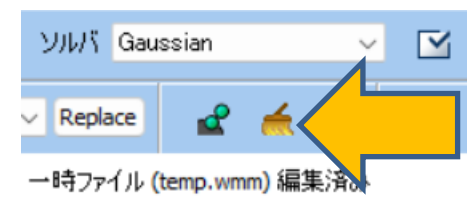
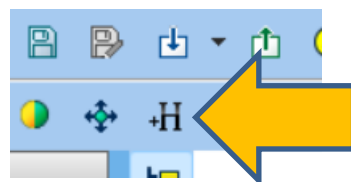
I. 系のモデリング

1. 2Hと7H原子をクリックして2つの原子が赤丸で選択された状態で、**編集 | 環構築**を選択します。
2. 8Hと10H原子をクリックして2つの原子が赤丸で選択された状態で、**編集 | 環構築**を再度選択します。



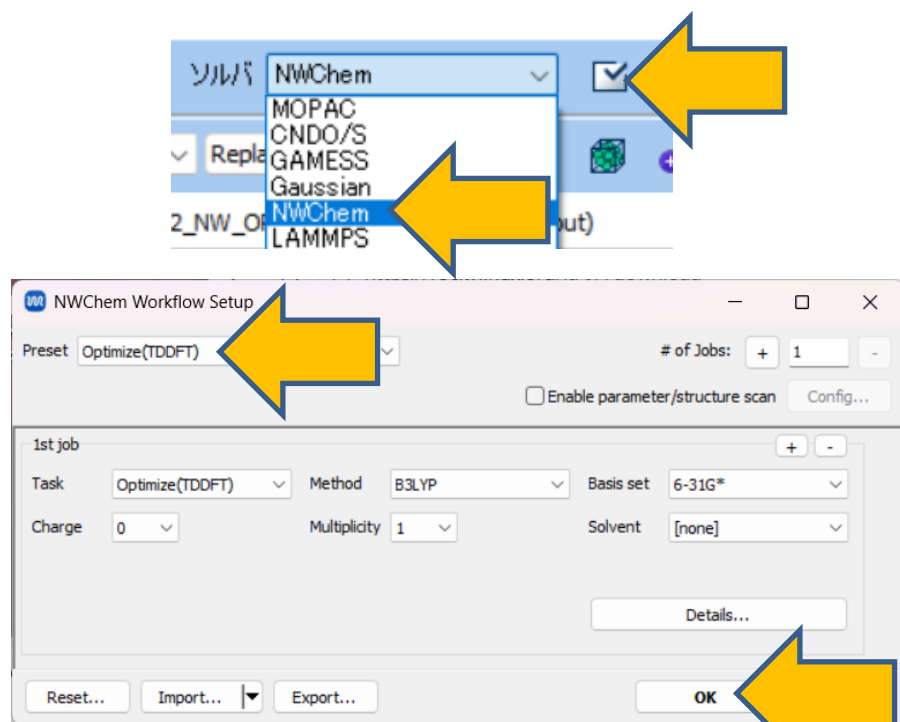
I. 系のモデリング

1. 3C原子をクリックして、**選択原子に水素を付加**を1回クリックします。
2. **簡易構造最適化**ボタンをクリックします。これで9H-フルオレン分子の初期構造が完成します。



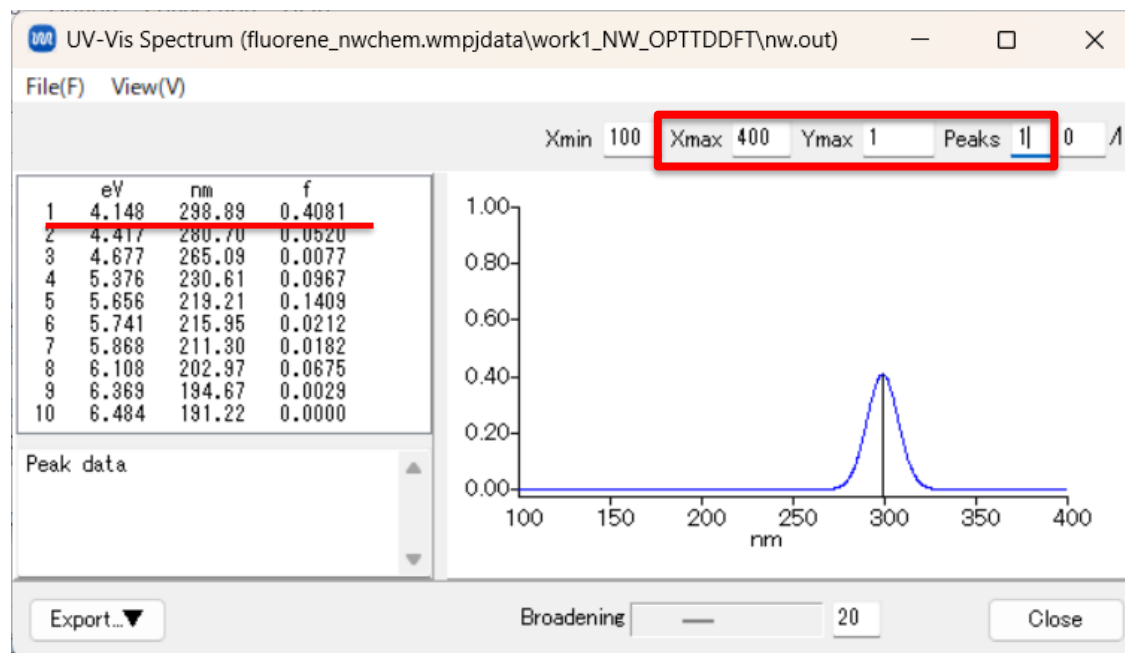
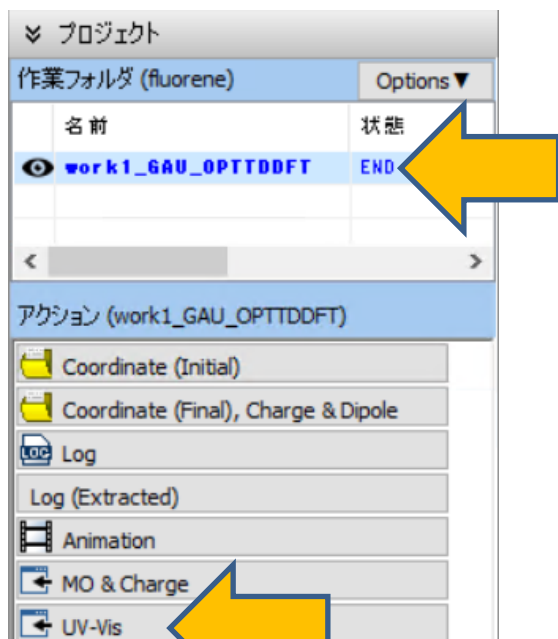
II. 計算の実行 (蛍光(一重項励起状態構造最適化)計算)

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. Presetを「Optimize(TDDFT)」に変更し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、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。B3LYP/6-31G*レベルでは1CPUコアで40時間程度かかります。
- デフォルトの設定では一重項第1励起状態の構造最適化が行われます。



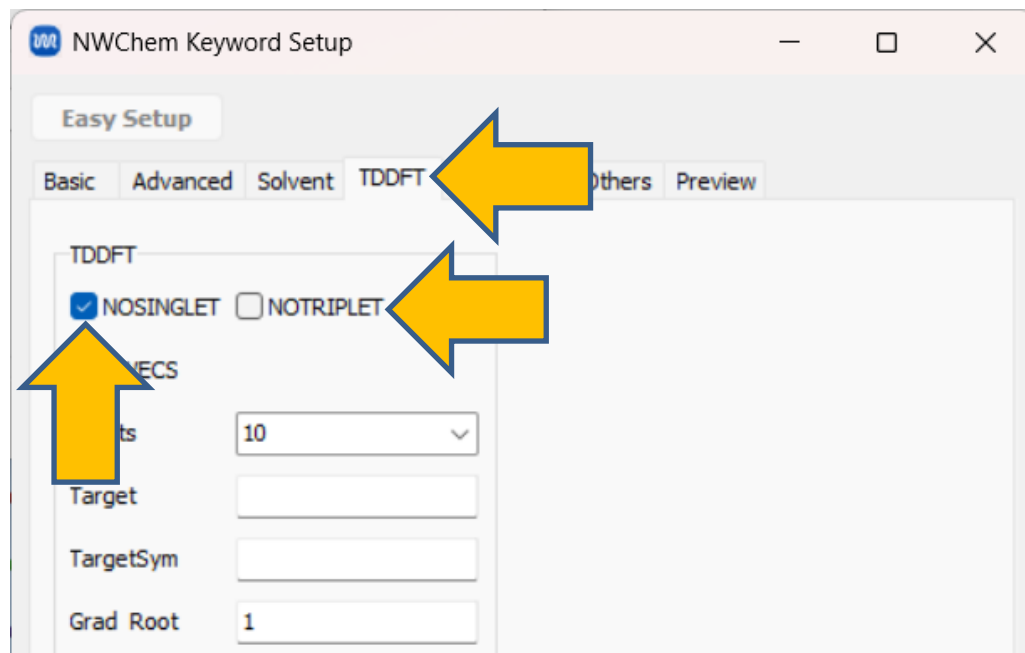
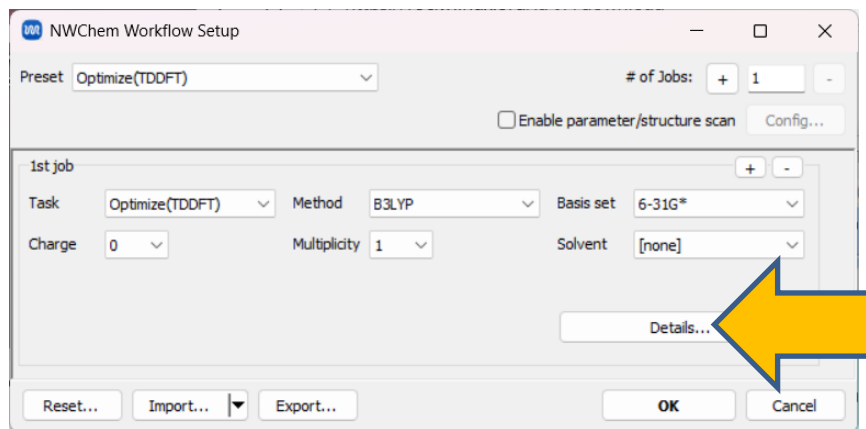
III. 結果解析 (蛍光(一重項励起状態構造最適化)計算)

1. 計算が終了してwork1_NW_OPTTDDFT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_NW_OPTTDDFTをクリックし、**アクション**の**UV-Vis**をクリックすると、一重項第1励起状態最適化構造でのUV-Visスペクトルが表示されます。
2. スペクトルを見やすくするため、**Xmax**を**400**、**Ymax**を**1**にします。
3. 今回の計算で意味があるのは基底状態と第1励起状態のエネルギー差であること、蛍光のほとんどは第1励起状態から起こる(カシャの法則)ことから、余分なピークを削除するため**Peaks**の右横の数値を**1**にします。蛍光波長は左欄リスト1番目の298.89 nmです。



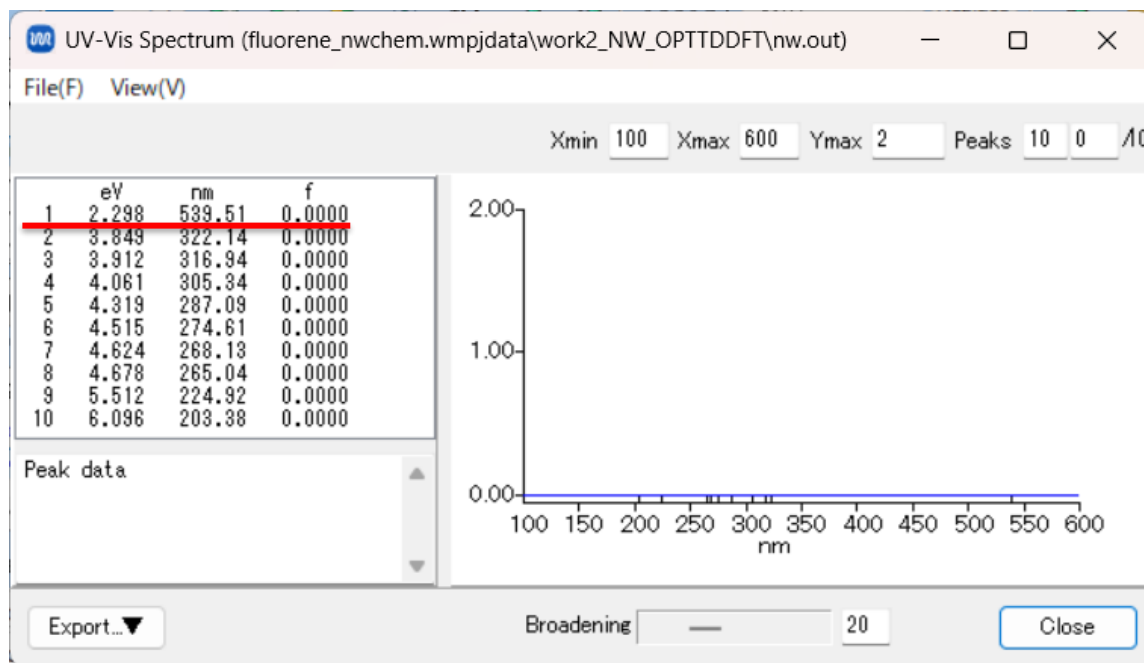
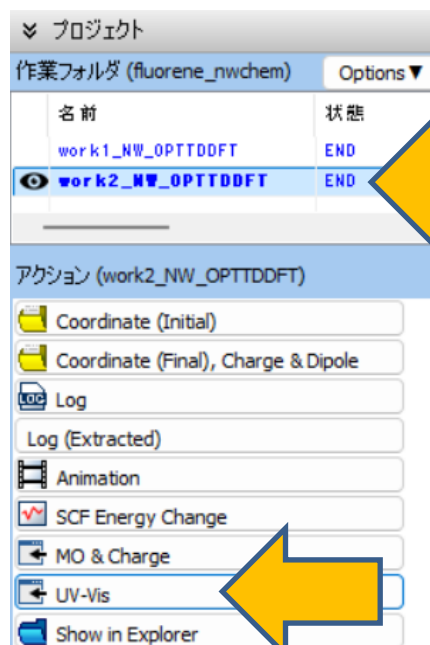
IV. 計算の実行 (りん光(三重項励起状態構造最適化)計算)

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?...」と表示されたら、**いいえ**をクリックします。
2. **Preset**が「**Optimize(TDDFT)**」の状態で、**Details**ボタンをクリックします。
3. **Keyword Setup**ウィンドウの**TDDFT**タブの**NOSINGLET**にチェックを入れて、**NOTRIPLET**のチェックを外して、**OK**ボタンをクリックします。
4. **Workflow Setup**ウィンドウで**OK**ボタンをクリックして、**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。



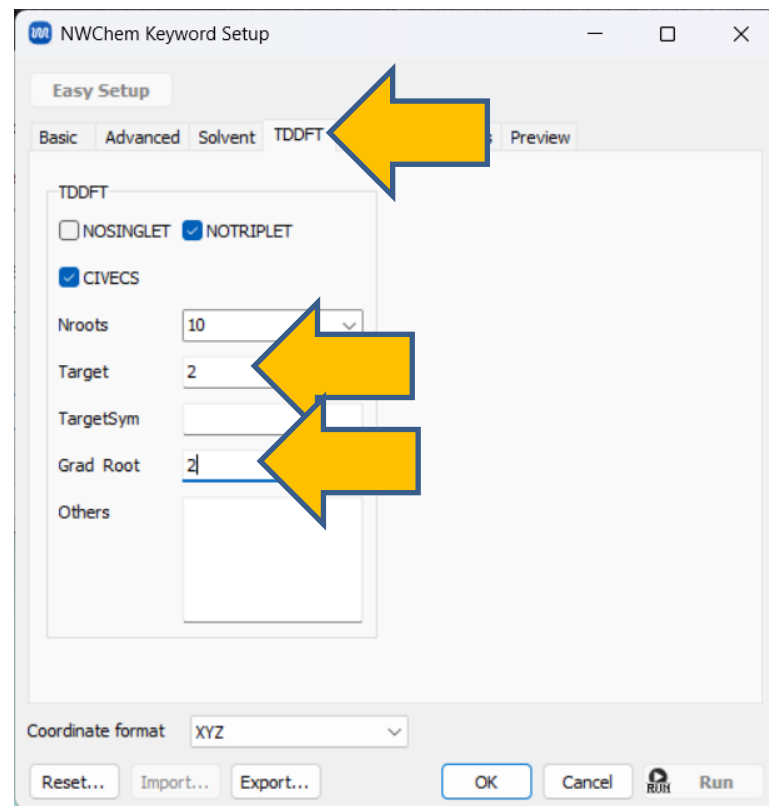
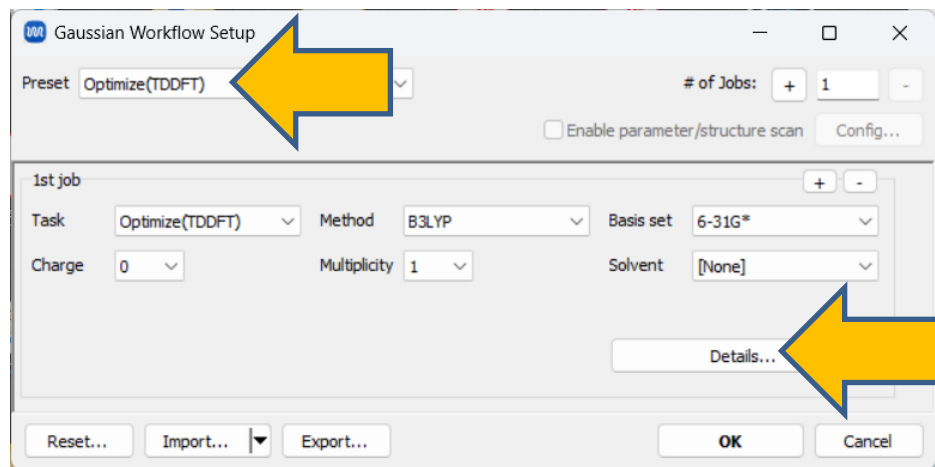
V. 結果解析 (りん光(三重項励起状態構造最適化)計算)

1. 計算が終了してwork2_NW_OPTTDDFT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_NW_OPTTDDFTをクリックし、**アクション**の**UV-Vis**をクリックすると、三重項第1励起状態最適化構造でのUV-Visスペクトルが表示されます。
2. 今回の計算で意味があるのは基底状態と第1励起状態のエネルギー差であること、りん光のほとんどは第1励起状態から起こる(カシャの法則)ことから、りん光波長はUV-Visスペクトルウィンドウの左欄リスト1番目の539.51 nmです。一重項と三重項が混ざらない(スピン軌道相互作用が入っていない)非相対論の計算のため、強度は理論上必ず0になり、この計算では波長のデータのみ得られます。



補足 任意の励起状態の構造最適化

1. NWChem Workflow Setupウィンドウで、Presetを「Optimize(TDDFT)」に変更しDetailsボタンをクリックします。
2. NWChem Keyword SetupウィンドウのTDDFTタブで、TargetとGrad Rootに励起状態の番号を記入して、OKボタンをクリックします。例えば2番目の一重項励起状態の構造最適化の場合はTargetとGrad Rootに2を記入します。2番目の三重項励起状態の場合はさらにNOSINGLETにチェックを入れて、NOTRIPLETのチェックを外します。



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