

 winmostar チュートリアル

NWChem

2量体計算(分散力補正)

V11.5.0

2023年4月14日 株式会社クロスアビリティ

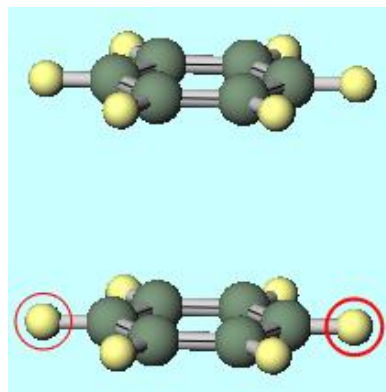
注：本書はV11.5.0で作成されています。
V11.4.x以前をお使いの方は[ファイルモード](#)を利用してください。

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

- Hartree-Fock法や従来のDFT法(B3LYP、PBEなど)では、van der Waals力や π - π 相互作用などの分散力(いわゆる弱い相互作用)を取り扱うことはできません。この相互作用を計算するためには、原子間の距離から分散力補正をする方法(B3LYP-D3など)、改良されたDFT汎関数(cam-B3LYP、M06系など)、高精度な2次の摂動(MP2)法などが必要となります。本チュートリアルでは、B3LYP-D3法によるベンゼン2量体の計算について説明します。

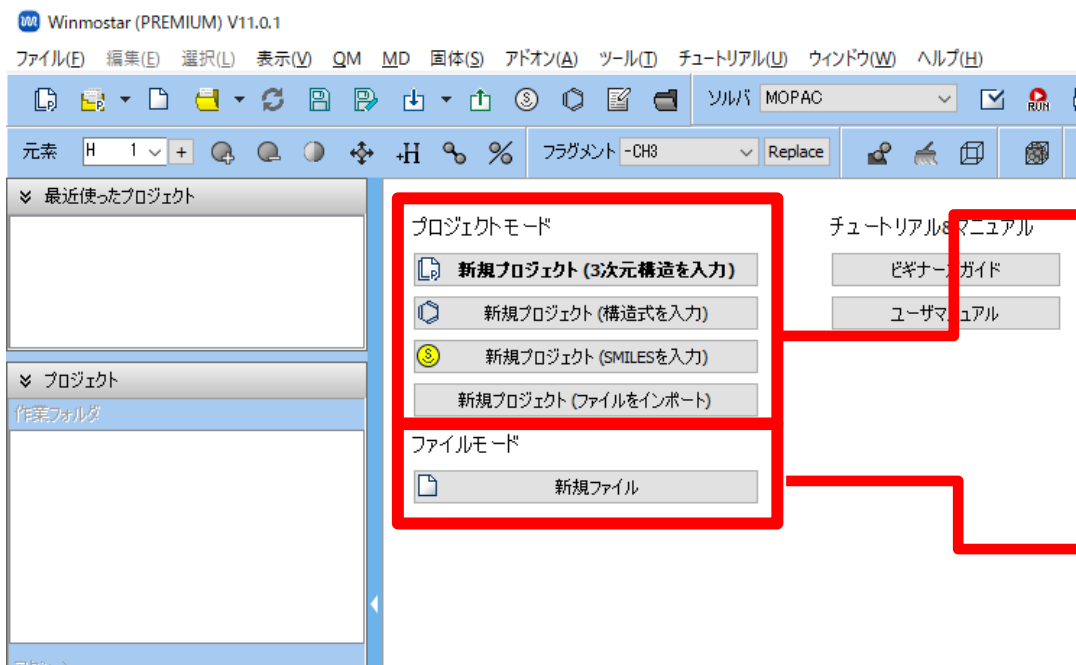


Winmostar V11の動作モード

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。

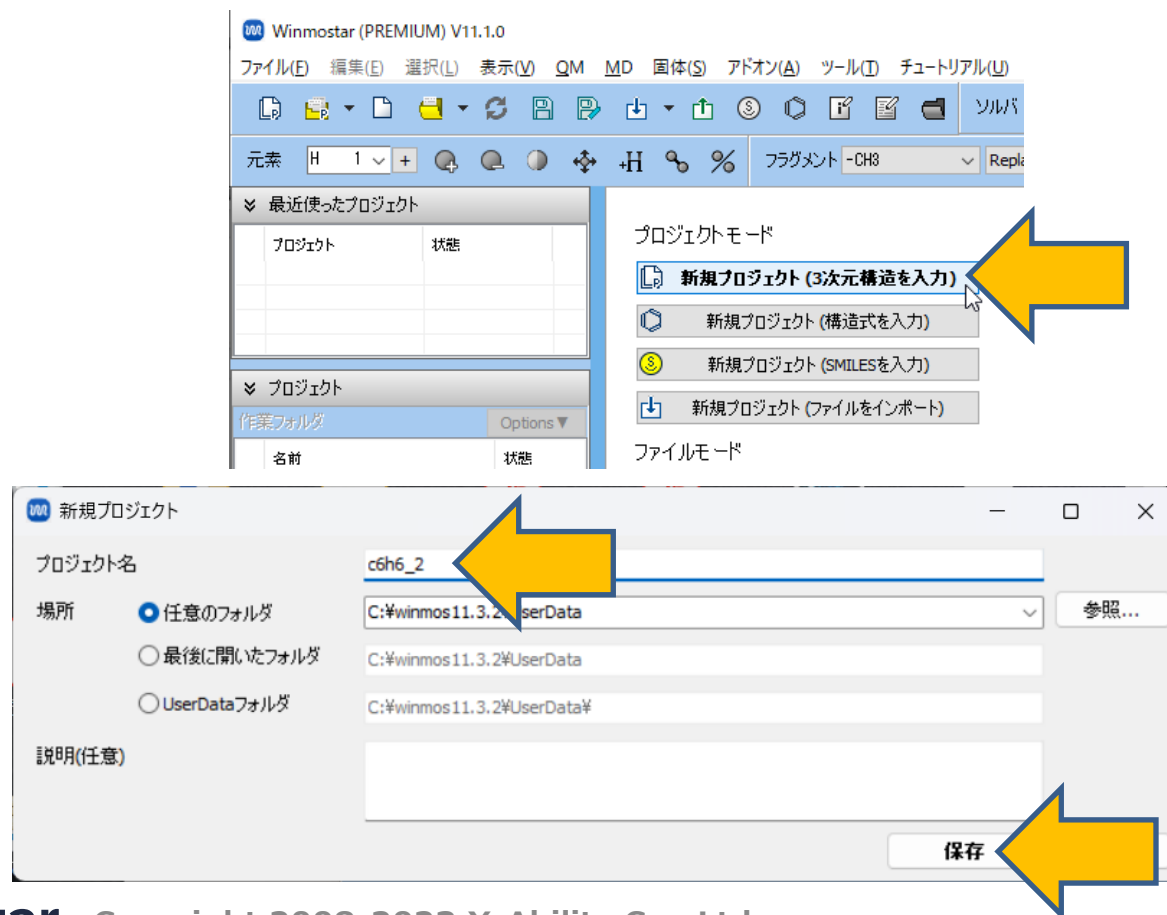
継続ジョブを作成するときに、ファイルモードまたはv10以前では都度継続元ジョブの最終構造を表示する必要がありますが、プロジェクトモードでは自動で最終構造が引き継がれます。

環境設定

[Windows版NWChemインストールマニュアル](#)に従ってNWChemをセットアップしてください。

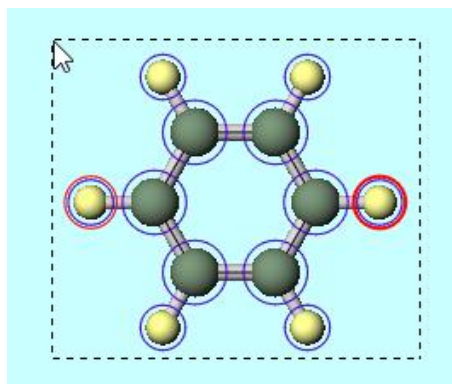
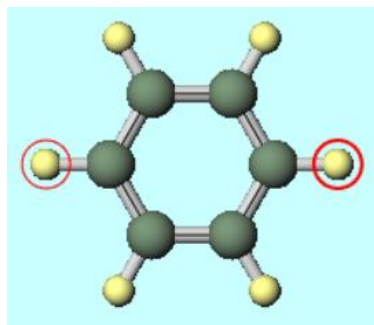
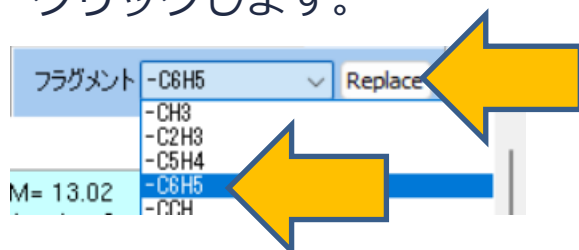
I. 系のモデリング

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「c6h6_2」と入力し**保存**をクリックします。



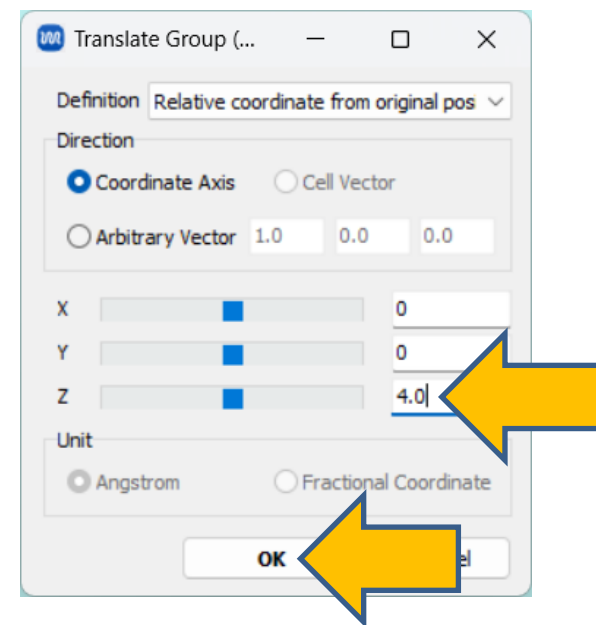
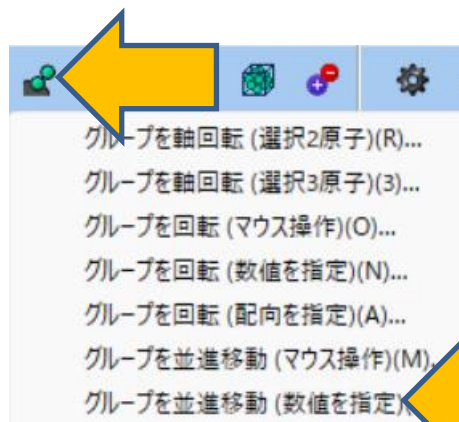
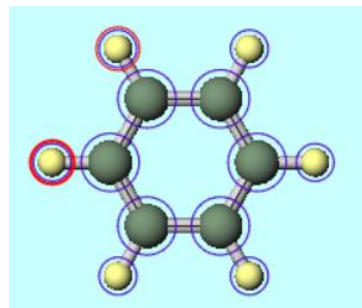
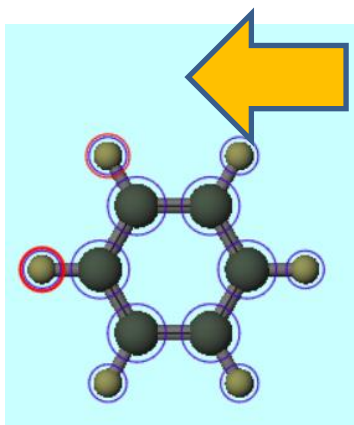
I. 系のモデリング

1. フラグメントを選択から-C6H5を選択し、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、ベンゼンを作成します。
2. **Ctrl**を押しながらベンゼン全体をドラッグし、全原子をグループ選択します(グループ選択選択された原子は青丸が付きます)。
3. **グループ編集 | グループをコピー**をクリックし、続いて**グループ編集 | グループを貼り付け**をクリックします。



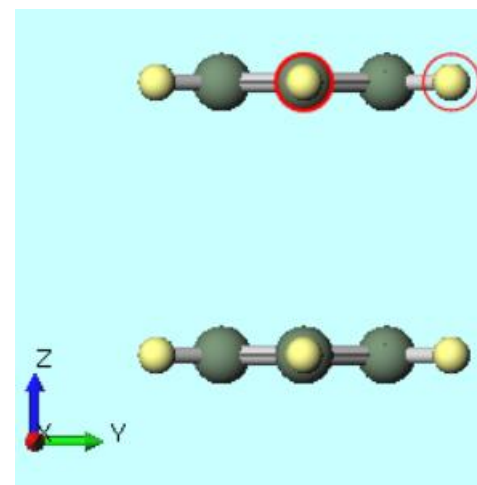
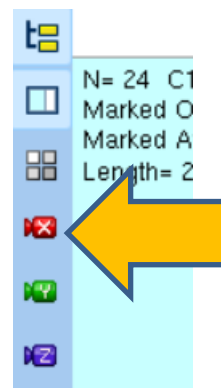
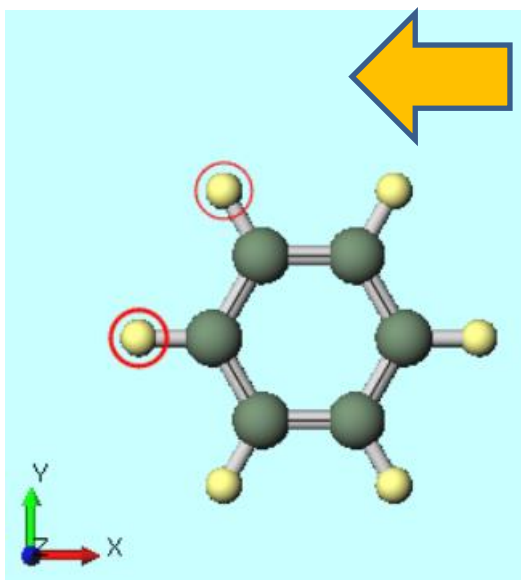
I. 系のモデリング

1. ベンゼンが表示されている分子表示エリア（水色のエリア）をクリックすると、コピー元の分子と同じ場所に、コピーされた分子だけがグループ選択された状態で貼り付けられます。
2. **グループ編集 | グループを並進移動（数値を指定）**をクリックします。
3. zの枠に「**4.0**」を入力して、**OK**ボタンをクリックします。グループ選択された原子全てがz方向に4.0 Å移動します。



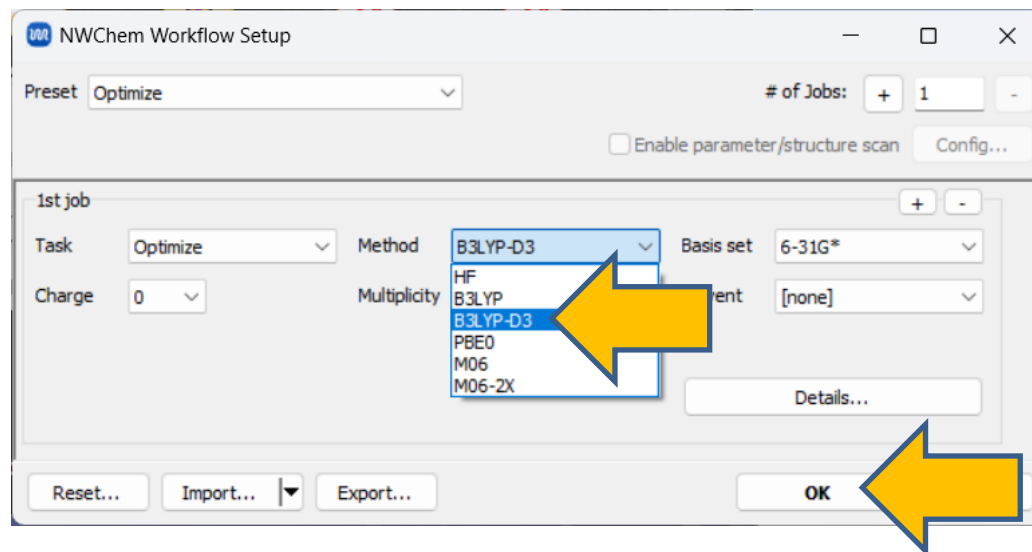
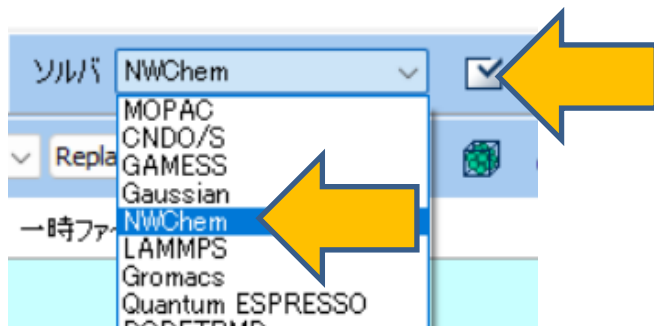
I. 系のモデリング

1. 分子周辺の水色のエリアをクリックし、グループ選択を解除します（青丸が外れます）。
2. X軸方向から表示をクリックし、z方向に並進移動できたかどうかを確認します。



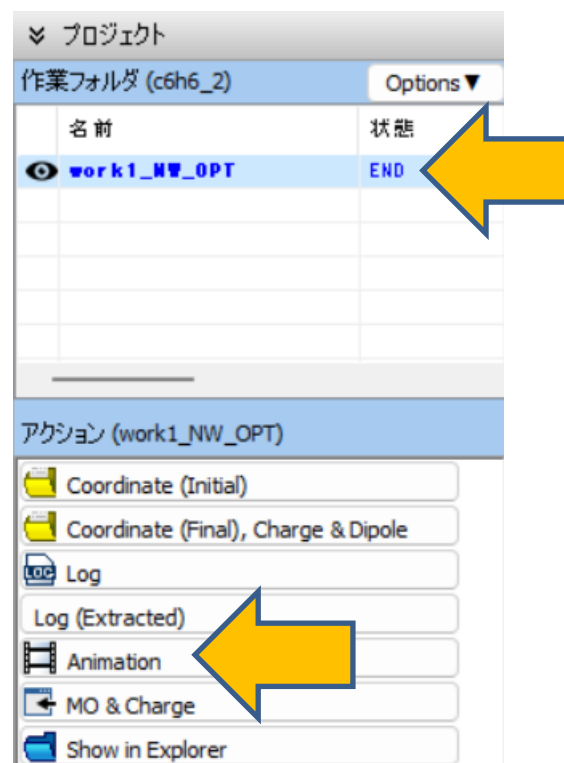
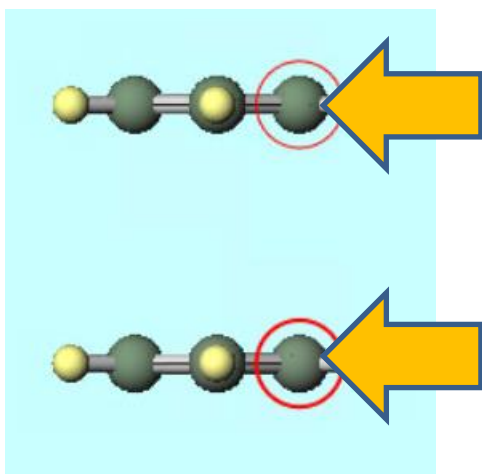
II. 計算の実行

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. Methodを「B3LYP-D3」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実行をクリックします。




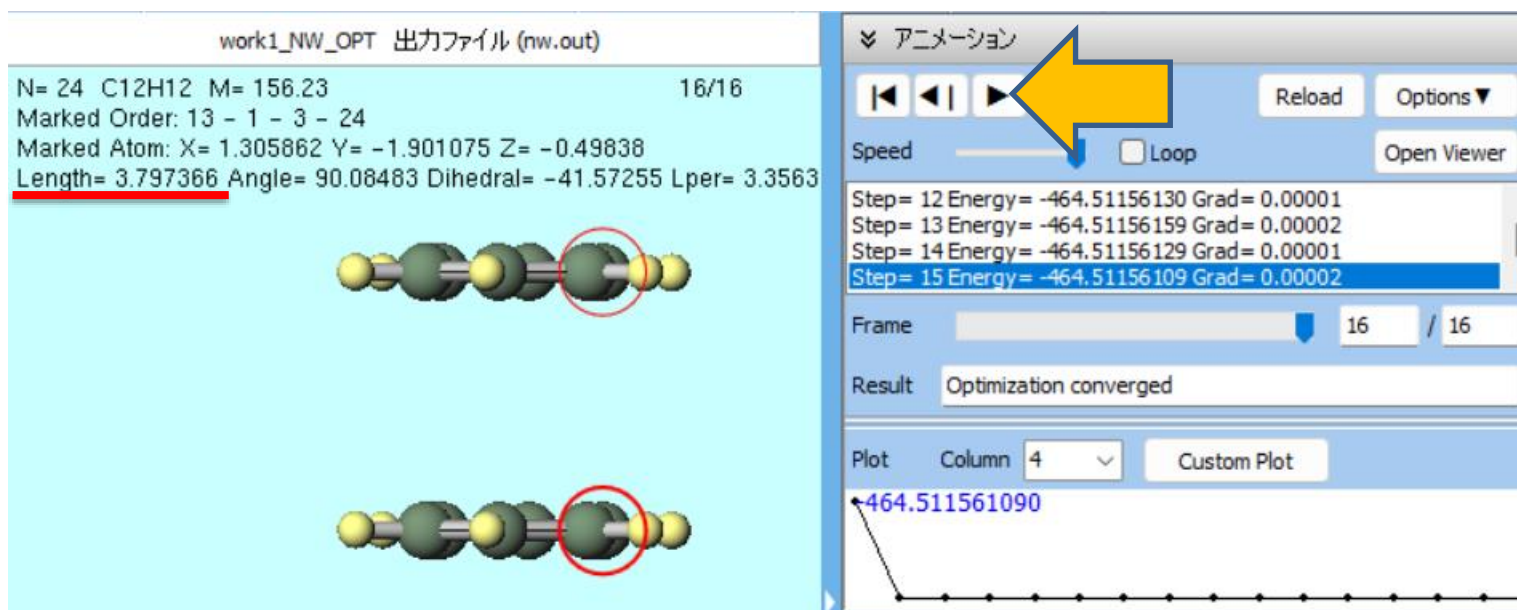
III.結果解析

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、ベンゼン間距離の変化を調べるため、上下のベンゼンの同位置の炭素をそれぞれクリックします。
2. 作業フォルダの**work1_NW_OPT**をクリックし、**アクション**の**Animation**をクリックします。



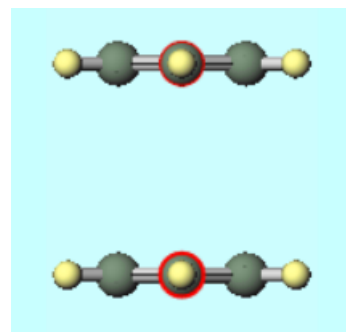
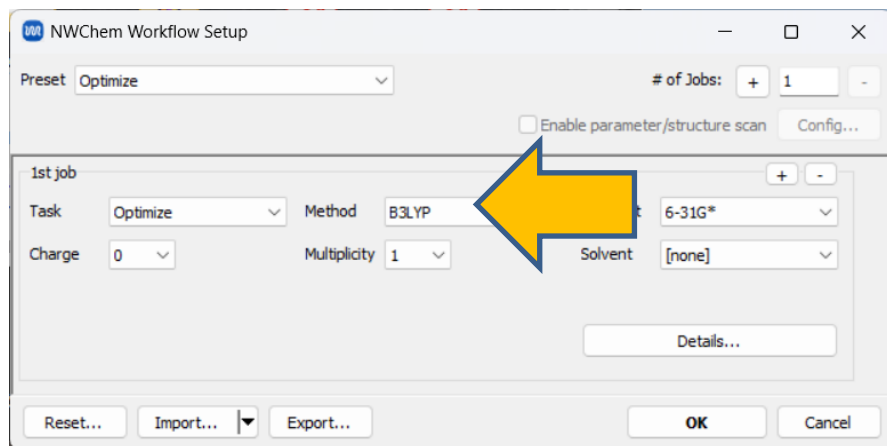
III.結果解析

1. **Animation**エリアの  (**再生ボタン**) をクリックしてアニメーションを再生し、最後の最適化構造を表示します。
2. ベンゼン2量体の平面の距離となるLengthの値から、約3.8 Å で安定な構造になることを確認する。



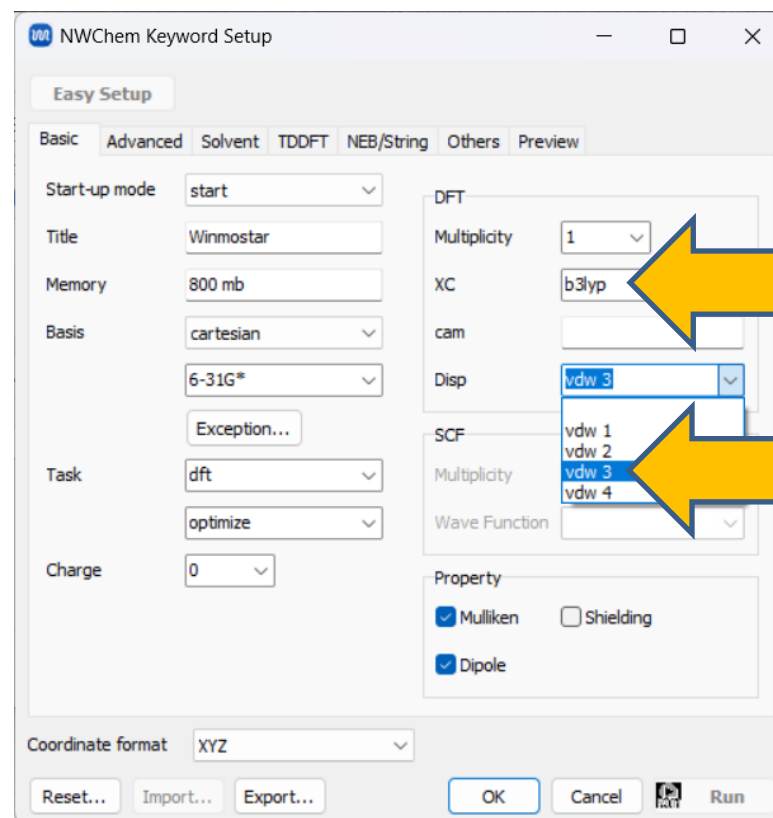
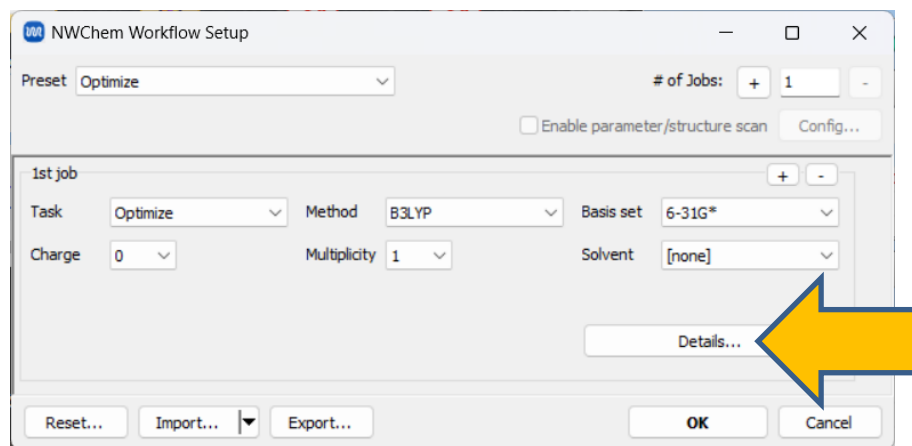
IV. B3LYPとB3LYP-D3の比較

- ✓ 比較のために**Method**を**B3LYP**に変更して、同様の計算を行います。**アニメーション**で再生をして、2つのベンゼン分子が離れる様子を確認します。



補足 B3LYP以外の汎関数での-D3指定方法

1. NWChem Workflow Setupウィンドウで、**Details**ボタンをクリックします。
2. NWChem Keyword Setupウィンドウで、**XC**を使いたい汎関数に変更し、**Disp**で「vdw 3」を選択し、**OK**ボタンをクリックします。



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