

 winmostar チュートリアル

NWChem

Nudged Elastic Band (NEB)

V11.6.4

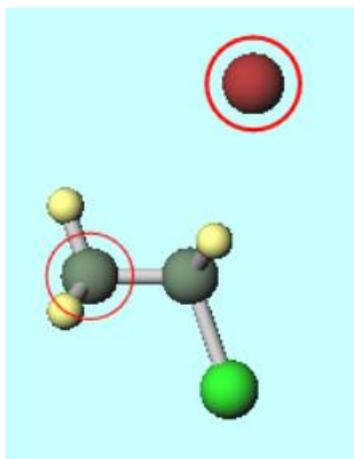
2024年1月15日 株式会社クロスアビリティ

本書について

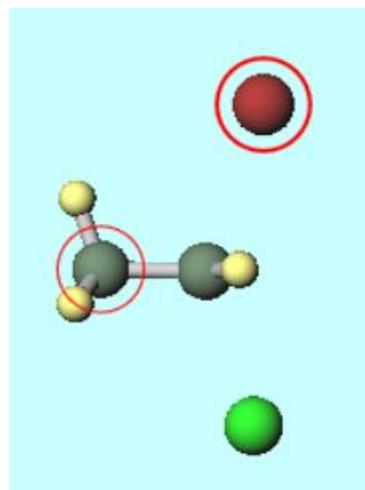
- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - [個別講習会](#)：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

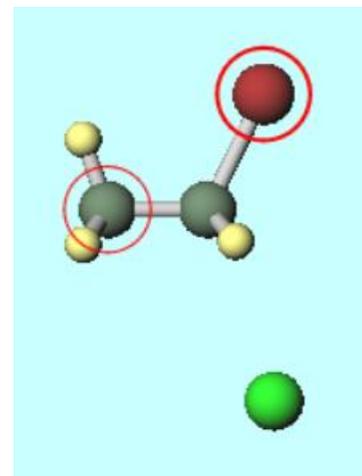
- Nudged Elastic Band(NEB)法により、次の反応の大まかな遷移状態構造を計算します。
 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl} + \text{Br}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br} + \text{Cl}^-$ ($\text{S}_{\text{N}}2$ 反応の一種)
- 本チュートリアルでは、始状態と終状態の構造を作成して、それらの構造で入力ファイルを作成し、NEB計算を行います。その後、計算結果を可視化します。



始状態



近似遷移状態



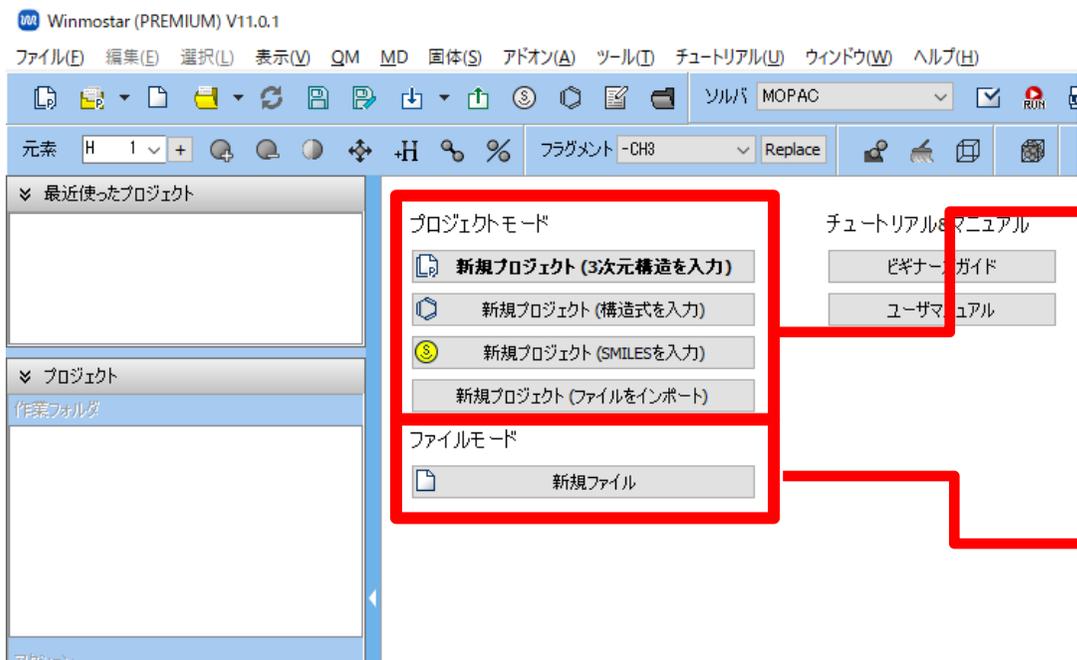
終状態

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。

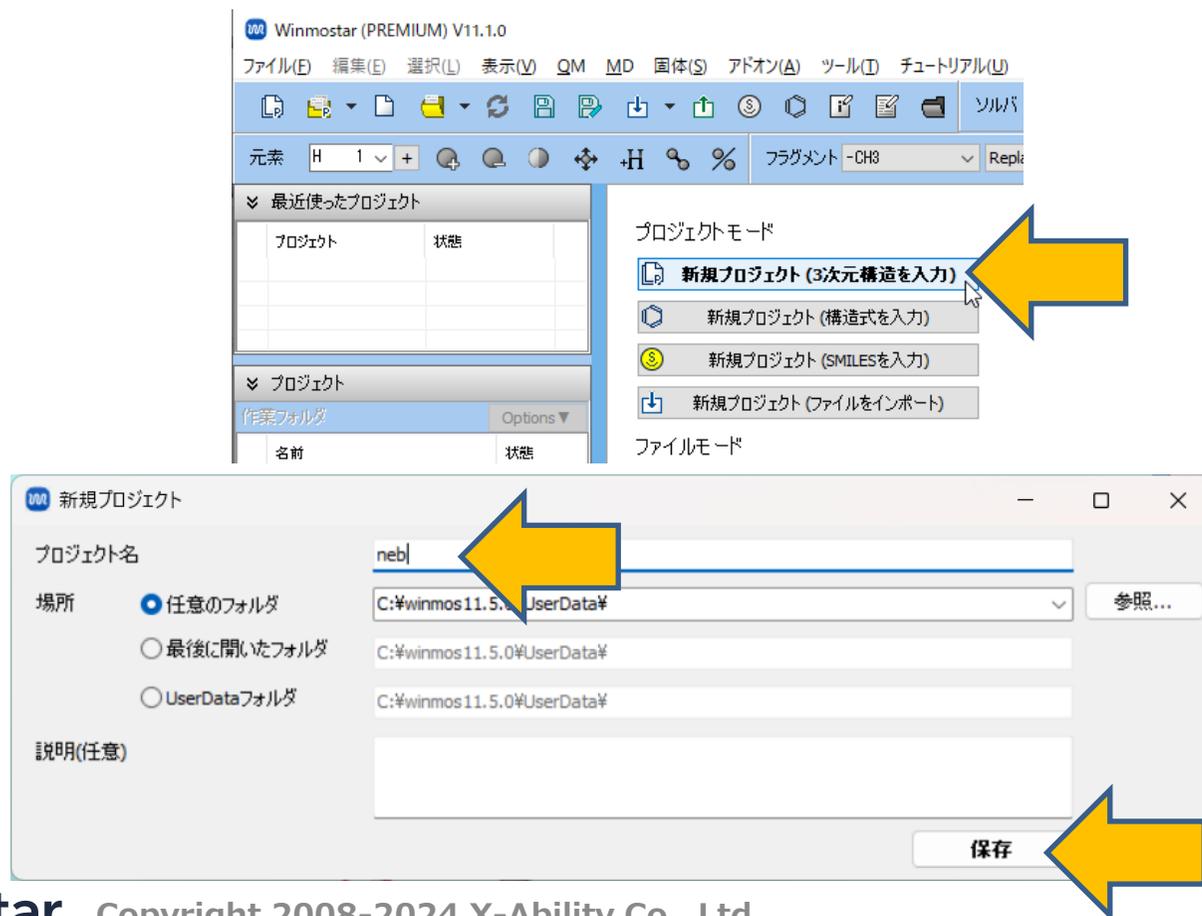
継続ジョブを作成するときに、ファイルモードまたはV10以前では都度継続元ジョブの最終構造を表示する必要がありますが、プロジェクトモードでは自動で最終構造が引き継がれます。

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。

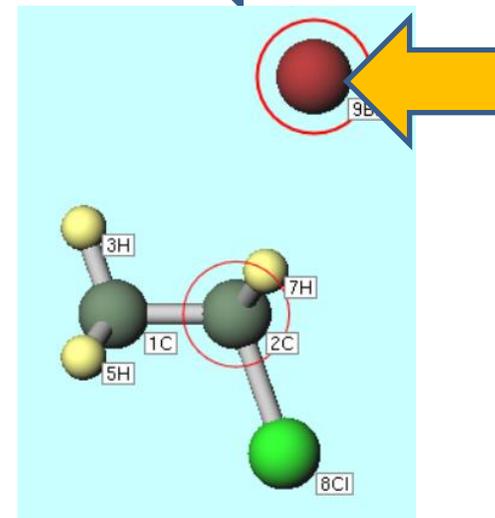
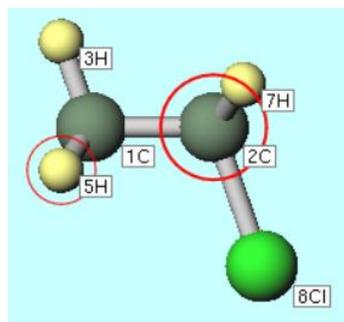
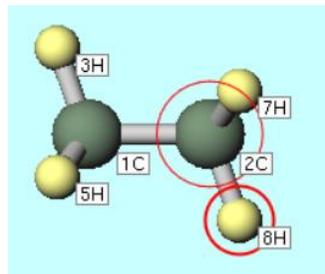
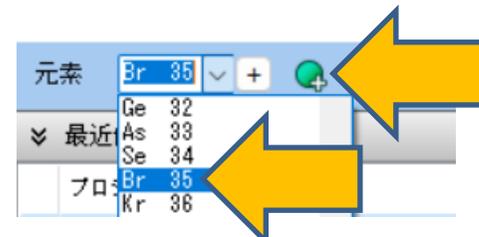
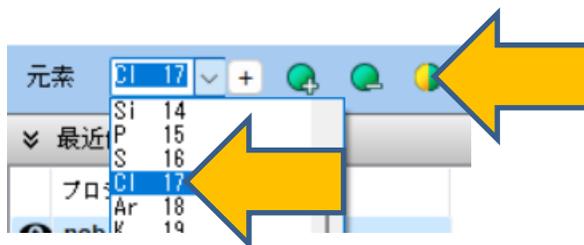
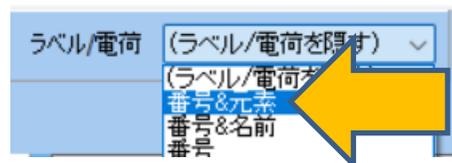
I. 系のモデリング

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「neb」と入力し**保存**をクリックします。



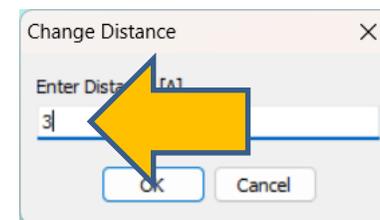
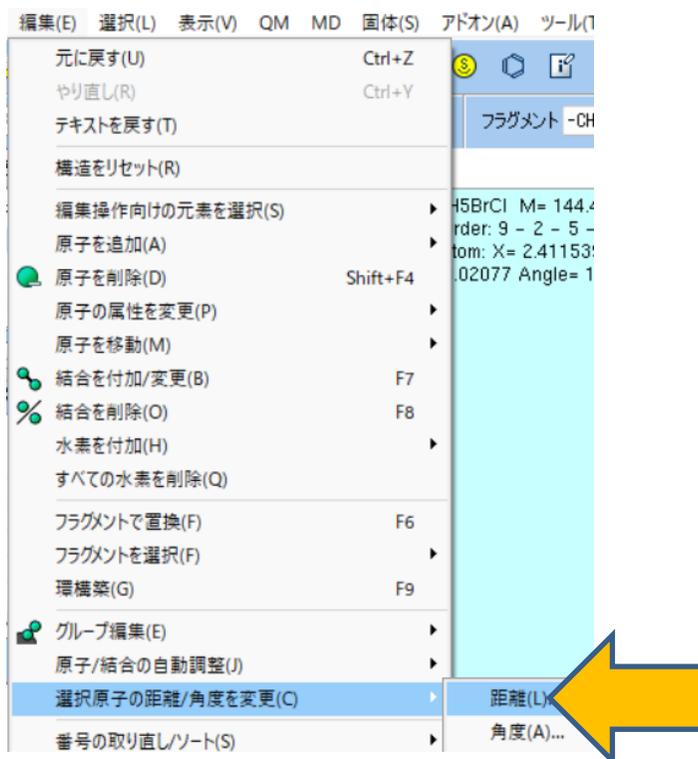
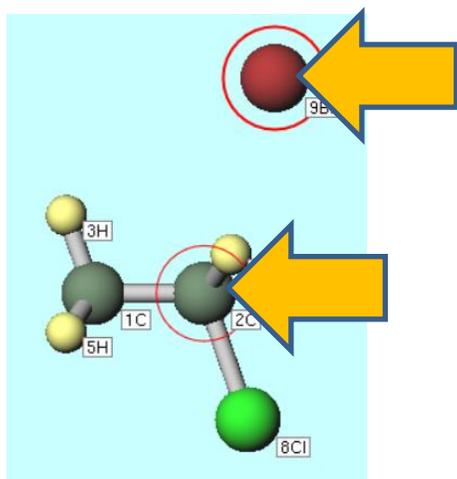
I. 系のモデリング (始状態の作成)

1. ラベル/電荷を番号&元素に変更します。
2. フラグメントが-CH3の状態ですべてのReplaceボタンをクリックしてエタンを作成します。
3. 編集操作向けの元素を選択においてClを選択し、元素を変更ボタンをクリックして、クロロエタンを作成します。
4. 編集操作向けの元素を選択においてBrを選択し、原子を追加ボタンをクリックします。分子表示エリアの右下の図の矢印周辺（右側の炭素から約3 Å離れた位置）をクリックして臭素原子を追加します。



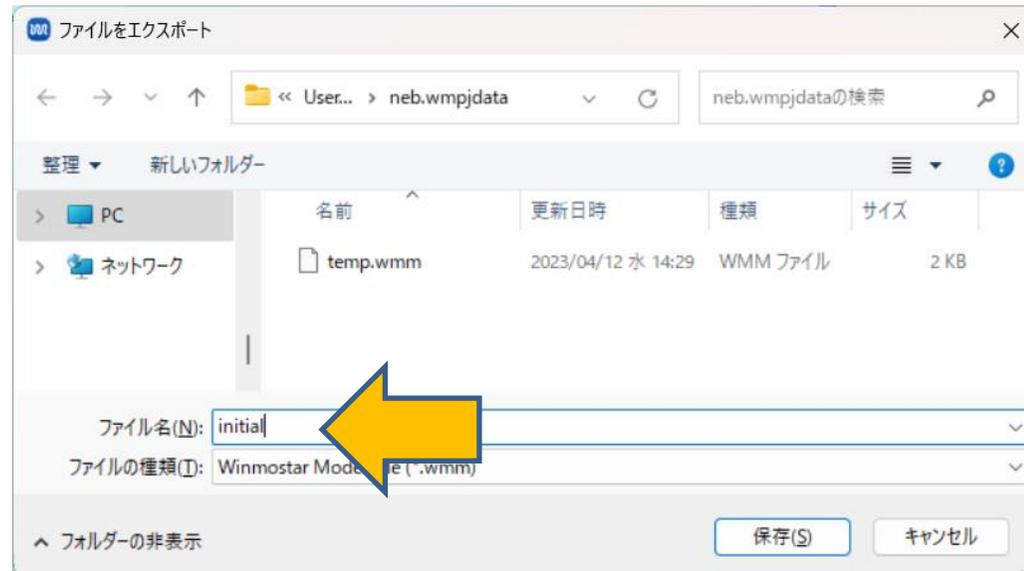
I. 系のモデリング (始状態の作成)

1. 9Brと2Cをクリックして、編集 | 選択原子の距離/角度を変更 | 距離をクリックします。
2. Enter Distance [A]の欄に3を入力してOKをクリックします。9Brと2Cの距離が3 Åになります。



I. 系のモデリング（始状態の作成）

1. **ファイル | ファイルをエクスポート**をクリックします。
2. ファイル名の欄にinitialを入力をして保存をクリックします。ファイルinitial.wmmが保存されます。



II. 系のモデリング (終状態の作成)

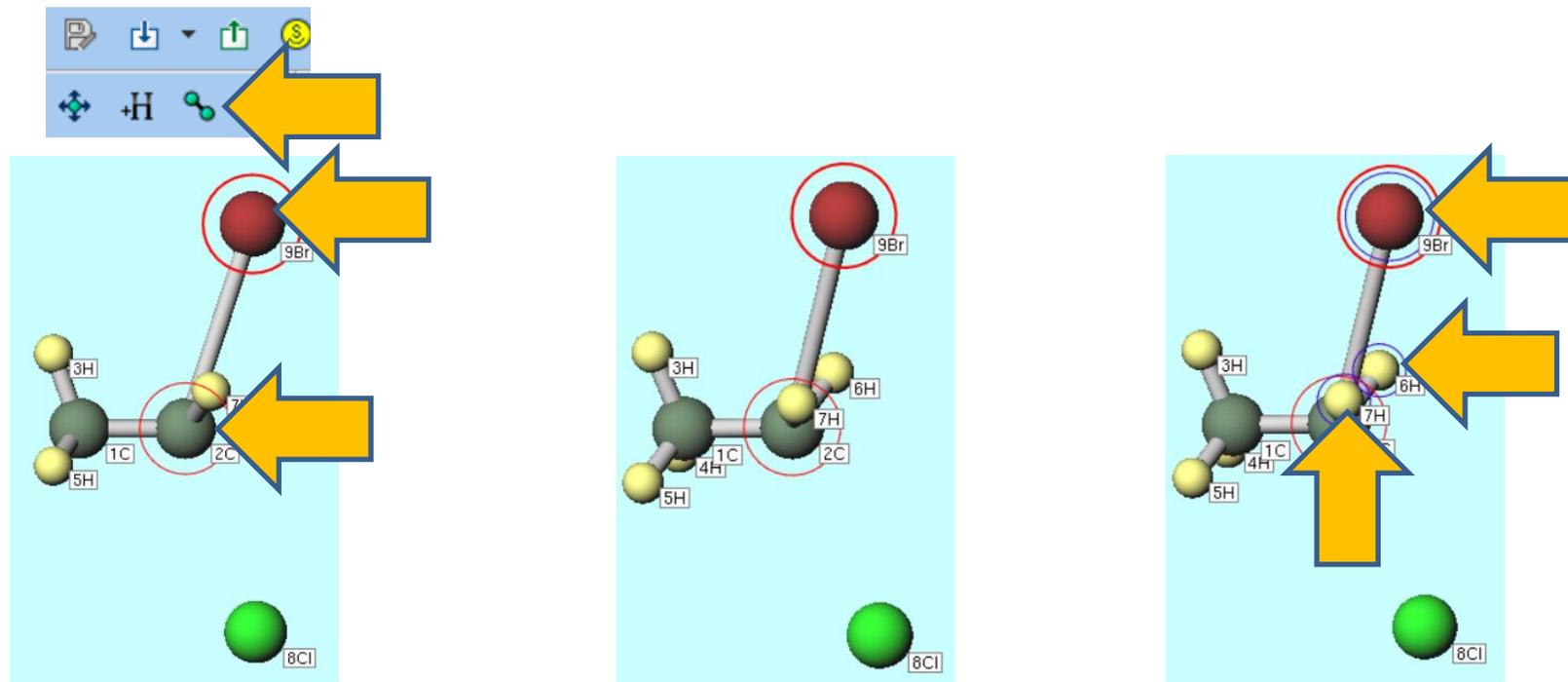
1. 8Clと2Cをクリックして、編集 | 選択原子の距離/角度を変更 | 距離をクリックします。
2. Enter Distance [A]の欄に3を入力してOKをクリックします。8Clと2Cの距離が3 Å になります。
3. 結合を削除ボタンをクリックして、8Clと2Cの結合を削除します。

The image shows a sequence of three screenshots illustrating the steps to create the final state of a molecular model:

- Left Screenshot:** A ball-and-stick model of a molecule with atoms labeled 3H, 5H, 1C, 2C, 7H, 8Cl, and 9Br. Red circles highlight atoms 2C and 8Cl. Yellow arrows point to these atoms, indicating they are selected for editing.
- Middle Screenshot:** A software menu is open. The path "編集(E) | 選択原子の距離/角度を変更(C) | 距離(L)" is highlighted. A yellow arrow points to the "距離(L)" option. A "Change Distance" dialog box is shown with "Enter Distance [Å]" set to "3". A yellow arrow points to the input field.
- Right Screenshot:** The same ball-and-stick model as the first screenshot, but the bond between atoms 2C and 8Cl has been removed. A yellow arrow points to the "結合を削除(O)" button in the top toolbar.

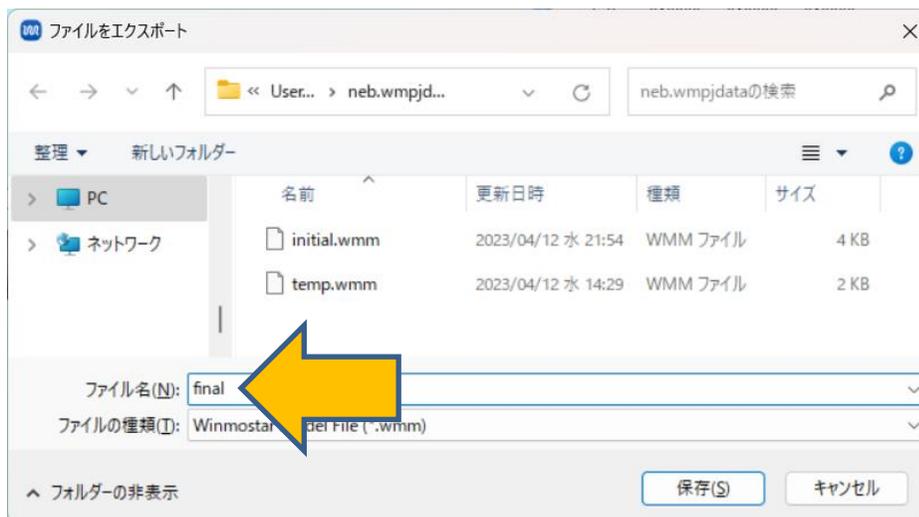
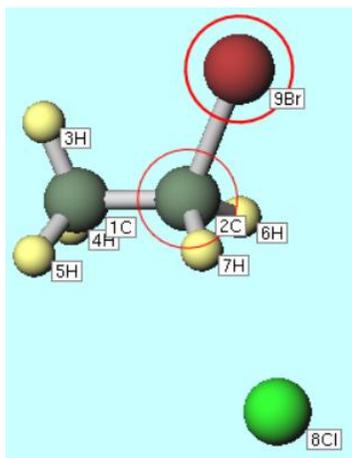
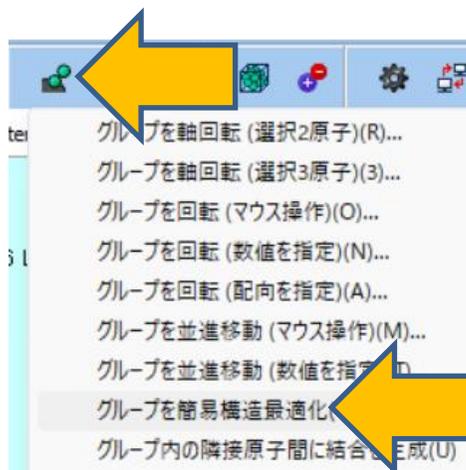
II. 系のモデリング (終状態の作成)

1. **9Br**と**2C**をクリックして、**結合を付加/変更ボタン**をクリックして、**9Br**と**2C**の結合を付加します。
2. 分子の近くの水色の領域をクリックしたままマウスを動かし、カメラ視点を下中央図のように動かします。
3. **Ctrl**ボタンを押しながら**6H**、**7H**、**9Br**をクリックしてグループ選択 (青丸が追加) をします。



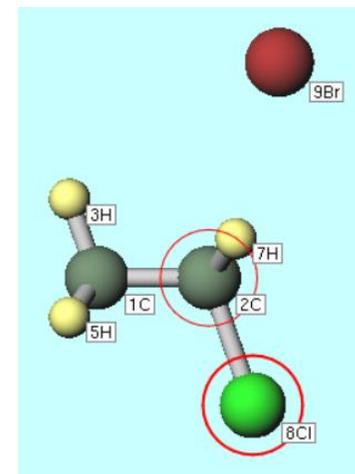
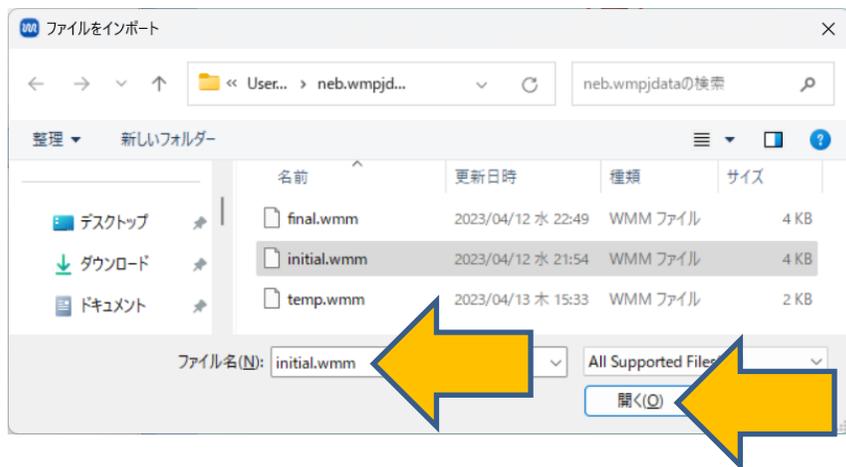
II. 系のモデリング (終状態の作成)

1. **グループ編集** | **グループを簡易構造最適化**をクリックして、「Do you want to optimize group?」と出たら**はい**をクリックします。グループ選択した**6H**、**7H**、**9Br**の座標が最適化されます。
2. **ファイル** | **ファイルをエクスポート**をクリックして、ファイル名の欄に**final**を入力をして保存をクリックします。ファイル**final.wmm**が保存されます。



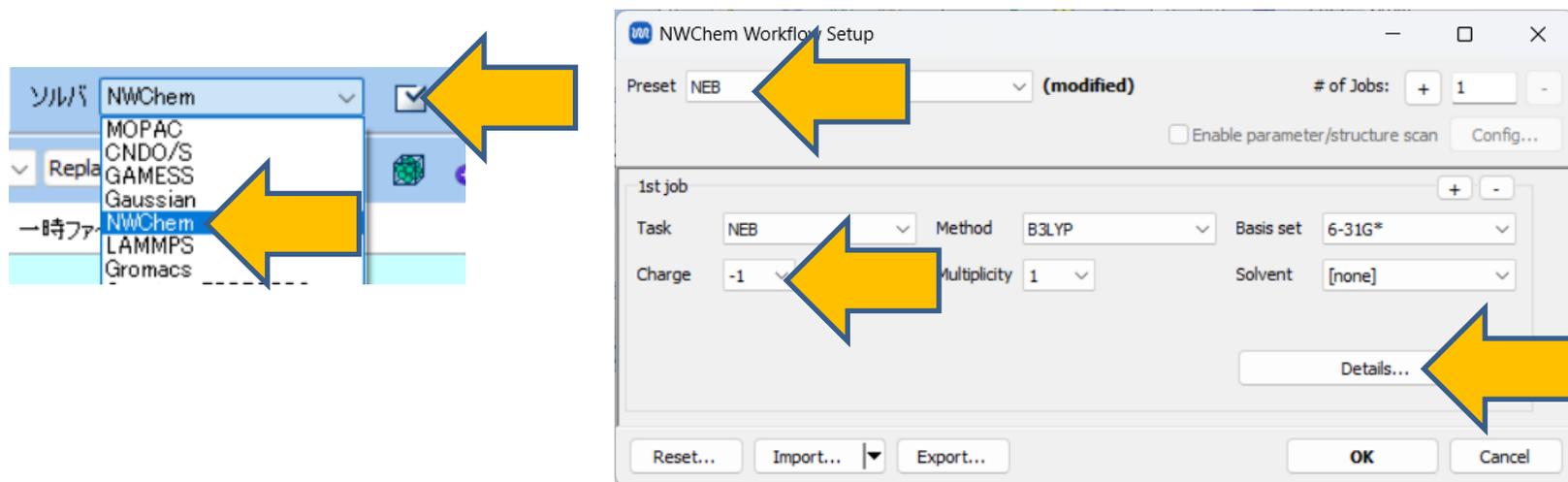
III. 計算実行

1. **ファイル** | **ファイルをインポート**をクリックします。**ファイルをインポート**ウィンドウの**ファイル名**に**initial.wmm**を入力して**開く**ボタンをクリックします。「現在の内容を破棄して…」の質問では**破棄して読み込み**をクリックします。



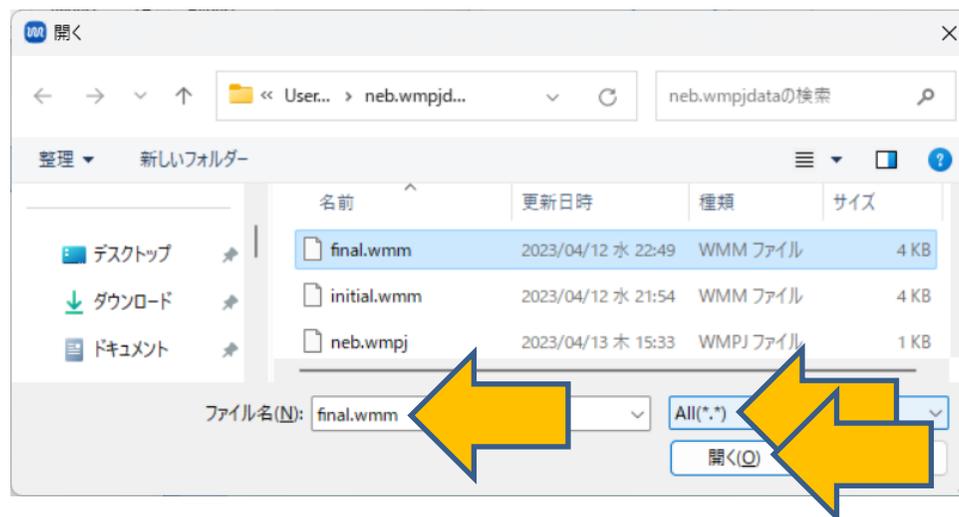
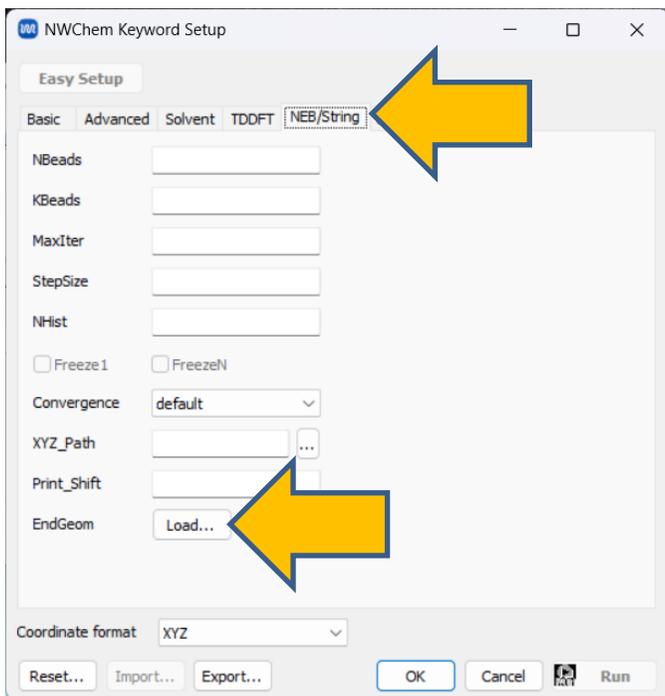
III. 計算実行

1. ソルバー一覧から**NWChem**を選択します。
2. (**ワークフロー設定**) をクリックします。
3. **NWChem Workflow Setup**ウィンドウの**Preset**から「**NEB**」を選択して、**Charge**を**-1**に変更します。
4. **Details**ボタンをクリックします。



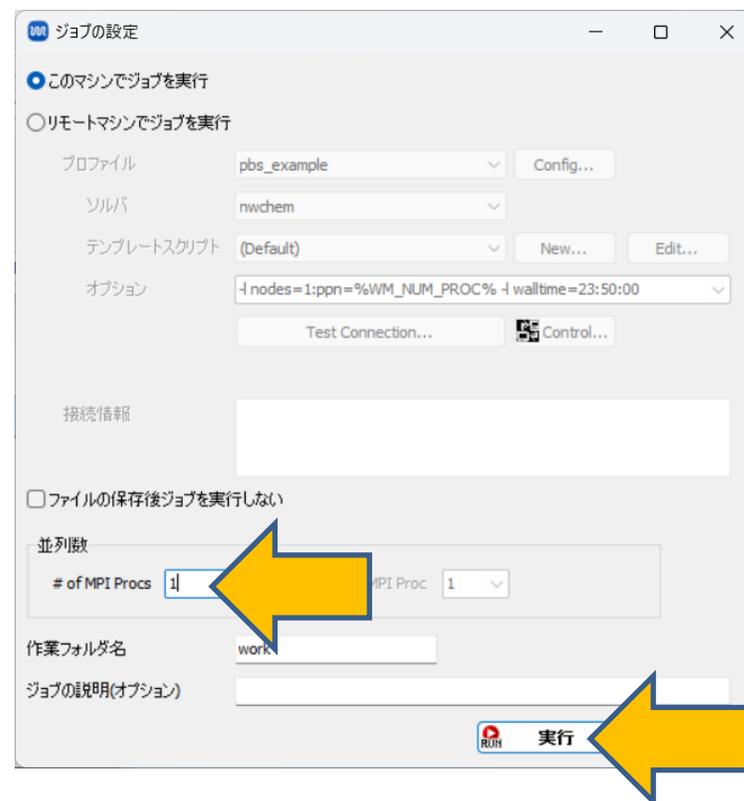
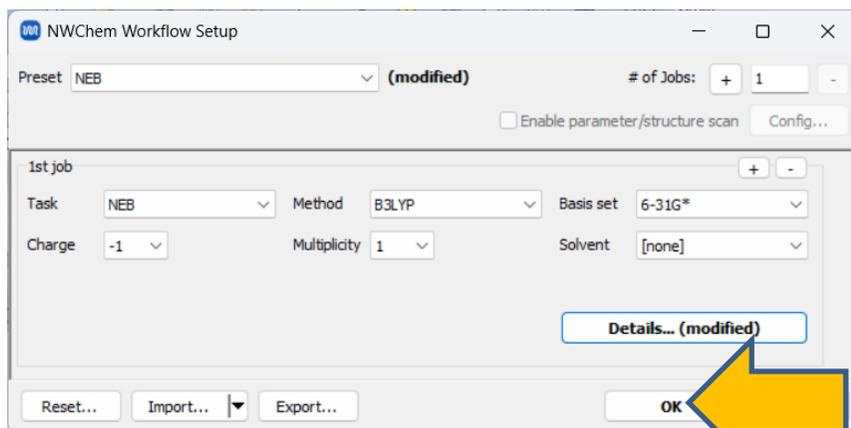
III. 計算実行

1. NWChem Keyword SetupウィンドウのNEB/Stringタブをクリックして、EndGeomのLoadボタンをクリックします。
2. 開くウィンドウの拡張子をAll(*.*)に変更して、ファイル名にfinal.wmmを入力して、開くボタンをクリックします。
3. NWChem Keyword SetupウィンドウのOKボタンをクリックします。



III. 計算実行

1. NWChem Workflow SetupウィンドウのOKボタンをクリックします。
2. ジョブの設定ウィンドウの並列数を使用マシンに合わせて変更した後、実行ボタンをクリックして、計算を開始します。



IV. 結果解析

1. 計算が終了してwork1_NW_NEB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**をクリックすると、メインウィンドウ右側に**アニメーション表示エリア**が出現します。▶ (再生)ボタンをクリックすると、NEBのパスを確認することができます。
2. 途中の段階でエネルギー極大値の構造を、遷移状態計算の初期構造として使うことができます。

プロジェクト

作業フォルダ (neb) Options ▼

名前	状態
work1_NW_NEB	END

アクション (work1_NW_NEB)

- Coordinate (Initial)
- Coordinate (Final), Charge & Dipole
- Log
- Log (Extracted)
- Animation
- MO & Charge
- Show in Explorer

アニメーション

3/5

Speed Loop Open Viewer

2 energy = -3113.3914258086697
3 energy = -3113.3711730151094
4 energy = -3113.3742683135542
5 energy = -3113.3630309070313

Frame 3 / 5

Result

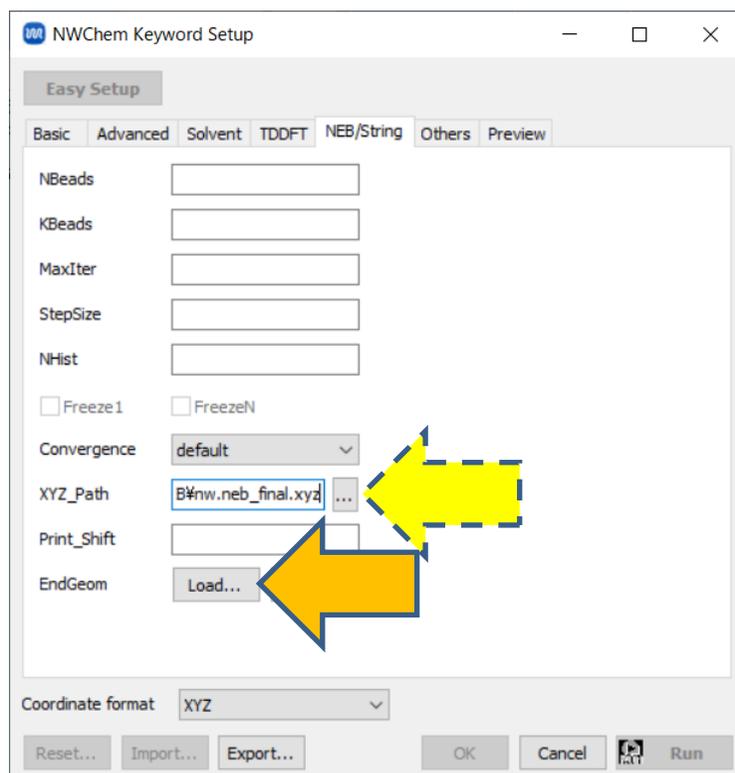
Plot Column 3 Custom Plot

-3113.371173015

3H, 1C, 2C, 7H, 5H, 9Br, 8Cl

補足 計算の再実行

1. 再度NEB計算を行う場合は、終状態の構造が同じであっても必ず**NWChem Keyword Setup**ウィンドウの**NEB/String**タブの**EndGeom**の**Load**(読み込み)操作を行ってください。
2. NEB計算を継続する場合は、XYZ_Pathに継続元のフォルダにあるファイルnw.neb_final.xyzも指定してください。何度も継続する場合は、毎回最新のファイルを指定してください。



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