M winmostar チュートリアル

Gaussian/NWChem 基礎編

V11.1.0

2022年4月22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。



 プロピレン分子の量子化学計算をGaussianまたはNWChemを用いて実行します。まず構造最 適化を実行し、最適化後の構造に対し、振動スペクトル(IR、ラマン)、NMRスペクトル、 UV-Visスペクトルを計算します。また、分子軌道、静電ポテンシャルの表示も行います。



注意点:

- 本チュートリアルでの計算方法はB3LYP/6-31G*です。計算精度を落として計算時間を短縮する場合、B3LYP/STO-3Gで行ってください。
- ESPの表示には時間が掛かるため、ここでは静電ポテンシャルとして、簡易的に得られる電荷 解析(ラベル/電荷で指定していなければMulliken電荷)の結果を基にしたポテンシャル分布を表 示します。



• NWChemの場合

NWChemのインストールマニュアルページ

<u>https://winmostar.com/jp/nwchem4wm_jp.html</u>の内容に従い、NWChemをインストー ルしてください。

• Gaussianの場合

ベンダーの提供する手順に従ってGaussianをインストールしてください。

I. 系のモデリング

1. Winmostarを起動し、新規ファイルをクリックします(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)。

🐻 Winmostar (PREMIUN	M/MAC) V11.1.0		
ファイル(<u>F</u>) 編集(E) 選打	^{伬(} <u>L</u>) 表示(<u>V</u>) <u>Q</u> M	<u>M</u> D 固体(<u>S</u>) アドオン(<u>A</u>) ツール(<u>T</u>) チュートリアル(<u>U</u>) ウィンドウ(<u>W</u>) ヘルプ(<u>H</u>)	
D 🕞 - D 🤆	l • g P R) 🗄 🔹 🖆 🕲 💕 🖆 🚽 אואלי GAMESS 🧹	
元素 H 1 V +	QQ 🔍 🖉	 +H % % フラグメント - CH3 Replace 全 	🚳 d
≫ 最近使ったプロジェクト			
プロジェクト	状態	プロジェクトモード チュートリアル&マニュアル	l I
		「新規プロジェクト (3次元構造を入力) ビギナーズガイド	
		() 新規プロジェクト(構造式を入力) ユーザマニュアル	
		新規プロジェクト (SMILESを入力)	
♥ プロジェクト			
作業フォルダ	Options 🔻	【◆】 新規フロシェクト (ファイルをインホート)	
名前	状態	ファイルモード	

I. 系のモデリング

初期構造の作成方法の詳細はWinmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法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。

🞯 C:¥winmos1101test1¥UserData¥propylene.wmpjdata¥propylene.wmpj - Winmostar (PREMIUM) V11.1.0

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)





- 1. ソルバー覧からGaussianまたはNWChemのいずれかを選択します。
- 2. 🖸 (キーワード設定) をクリックします。



ソルバー覧でGaussianを選択した場合

1. Gaussian Keyword Setupウィンドウ下部の**Run**をクリックします(デフォルトの設定 は、B3LYP/6-31G*の構造最適化計算)。

M Gauss	ian Keyword Setup	– 🗆 X
Easy S	etup	%nprocshared 1 ~
Link 0	!%chk=temp	\$
Comment	Winmostar	<u>^</u>
#	Charge 0 V Multiplicity 1 V Additiona	al Chg./Multi.
Hamiltonia	n B3LYP V Basis 6-31G* V	Pop full 🗸
Opt/IRC	opt 🗸	OptMaxCyc 🗸
Scrf		SCF 🗸
Freq	✓ NMR ✓	TD 🗸
Empirical Dispersion	~ ~	
	□gfinput ☑gfprint □nosymm □	guess=read 🗌 geom=check
Others		
Subsectio	n	^
		~
Coordinate	e format XYZ ~	4
Save as	Default	
Reset	Import Export OK	Cancel 🔐 Run
M winmostar	Copyright 2008-2023 X-A	bility Co., Ltd.

ソルバー覧でGaussianを選択した場合

1. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は、BasisをSTO-3Gに変更してRunをク リックします。

67 Gauss	ian Keyword Setup — 🗆 🗙	
Easy S	etup Xnprocshared 1 ~	
Link0	!%chk=temp	
Comment	Winmostar	
# 🔍	Charge 0 V Multiplicity 1 V Additional Chg/Multi.	
Hamiltonia	n B3LYP V Basis STO-3G V Pop full V	
Opt/IRC Serf	opt S10=3G ~ 3-21G	
Freq	MR 6-31G* TD ✓ 6-31+G 6-31+G* TD ✓	
Dispersion	6-31++G** 6-311G □gfinput ☑gfprint 6-311G* □guess=read □geom=check	
Others	6-311+G* 6-311+G* 6-311+G**	
Subsection	D95 D95V LANL2MB LANL2DZ	
Q		
Coordinate Save as	Default	
Reset	Import Export OK Cancel 🔐 Run	
M winmostar	Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.	

ソルバー覧でNWChemを選択した場合

1. NWChem Keyword Setupウィンドウ下部のRunをクリックします(デフォルトの設定 は、B3LYP/6-31G*の構造最適化計算)。

🔯 NWChem Key	word Setup		_	
Easy Setup		Use MPI	1 ~	
Basic NEB/Strin	g Advanced			
	● Start ○ Restart	DFT		
Title	C=CC_2	Multiplicity	~	
Basis	cartesian \lor	Exchange	B3LYP	~
	6-31G* ~	Correlation		~
	Exception	Disp		~
Task	dft ~	SCF		
	optimize \checkmark	Multiplicity	singlet	~
Charge	0 ~	Wave Function	rhf	~
		Property		
		Mulliken	Shielding	
		🗹 Dipole		
Coordinate format	XYZ ~			
Reset Impo	ort Export	ОК	Cancel	Run
winmostar Copyr	ight 2008-2023	3 X-Abilit	y Co., L	td.

ソルバー覧でNWChemを選択した場合

1. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は、BasisをSTO-3Gに変更してRunをク リックします。

NWChem Keyv	word Setup		-	
Easy Setup		Use MPI	1 ~	
Basic NEB/String	g Advanced			
	● Start ○ Restart	DFT		
Title	C=CC_2	Multiplicity	~	
Basis	cartesian \lor	Exchange	B3LYP	~
	STO-3G	Correlation		~
	STO-3G STO-6G			~
Task	3-21G 3-21G*	SCF		
	6-31G 6-31G*	Multiplicity		~
Charge	6-31+G 6-31+G*	Wave Function		~
	6-31++G** TZ_(Dunning)	Property		
	cc-pVDZ cc-pVTZ	Mulliken	Shielding	
	tzp sarc-zora	🗹 Dipole		
	sarc-dkh			
Coordinate format	lanl2dz_ecp v ugbs]		
Reset Impo	rt Export	ОК	Cancel	Run

- ファイル保存ダイアログが開くので、ファイル名を入力します(例えば「c3h6_opt」)。
- 保存をクリックすると、Winmostar Job Managerとコマンドプロンプトの黒いウィンドウ が起動して計算が開始されます。
- 計算が終わると、黒いウィンドウが自動的に閉じます。

Winmostar/JM c3h6_opt.bat 2022/04/21 9:54:18	_		×
Memory utilization after 1st SCF pass: Heap Space remaining (MW): 22.45 22451509 Stack Space remaining (MW): 26.21 26213960			^
convergence iter energy DeltaE RMS-Dens Diis-err	tim	e	
d= 0, ls=0.0, diis 1 -117.9075535725 -1.88D+02 6.94D-05 1.51D-05 d= 0, ls=0.0, diis 2 -117.9075554481 -1.88D-06 3.87D-05 4.91D-06 d= 0, ls=0.0, diis 3 -117.9075558482 -4.00D-07 1.75D-05 1.86D-06 d= 0, ls=0.0, diis 4 -117.9075560611 -2.13D-07 5.44D-06 2.33D-07	27 28 29 30	.6 .6 .5 .4	
Total DFT energy = -117.907556061070 One electron energy = -296.636214135486 Coulomb energy = 126.620556325395 Exchange-Corr. energy = -18.477372529471 Nuclear repulsion energy = 70.585474278492			
Numeric. integr. density = 23.999997599350			
Total iterative time = 4.2s			
DFT Final Molecular Orbital Analysis			
MO Center= 1.8D-01, -1.2D+00, -3.9D-04			~

ソルバー覧でGaussianを選択した場合

- 1. 計算終了後、メインウィンドウにて、 🔤 (ログを表示)をクリックします。
- 2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開きます。
- 3. ログファイルが開くので、最後の行に計算が正常終了したことを示すメッセージ「Normal termination of Gaussian 16...」を確認します。

				_	×
ファイル(E) 編集(E) 書式(<u>O</u>) 表示(<u>V</u>) ヘルプ(<u>H</u>)					
00816¥¥Version=ES64L-G16RevB.01¥S 09¥RMSF=7.992e-06¥Dipole=-0.110714 4864987,-0.0104689,-0.4760298,-0.0 [X(C3H6)]¥¥@	tate=1-A¥HF=-117. 49,0.0720951,-0.0 0932344,-0.101129	907558 453448 6,-0.9	6¥RMSD=3.663e- ¥Quadrupole=0. 491419¥PG=C01		^
What some people mistake for the H of living is really the cost of I Da Job cpu time: 0 days 0 hou Elapsed time: 0 days 0 hou File lengths (MBytes): RWF= Normal termination of Gaussian 16	high cost iving high. oug Larson rs 1 minutes 3. rs 1 minutes 3. 6 Int= 0 D2 at Wed Jan 8 15	8 seco 1 seco E= :17:48	nds. nds. 0 Chk= 1 2020.	Scr=	1
	1行、1列	100%	Unix (LF)	UTF-8	

ソルバー覧でNWChemを選択した場合

- 1. 計算終了後、メインウィンドウにて、 🔤 (ログを表示)をクリックします。
- 2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開きます。
- 3. ログファイルが開くので、「**Optimization converged**」などの、計算が正常終了したことを示すメッセージがあることや、計算の異常終了を示すメッセージがないことを確認します。

<pre>c3h6_opt.out -)</pre>	×モ帳							- 0	×
ファイル(<u>F</u>) 編集(<u>E</u>)	書式(<u>O</u>) 表示(⊻)	ヘルプ(<u>H</u>)							
27 Torsion 28 Torsion 29 Torsion 30 Torsion <u>Optimiz</u> a	ation converge	5 5 7 7	1 1 2 2	2 2 6 6	6 7 8 9	-1 1	0.17372 79.84316 79.99825 0.00228	$\begin{array}{c} 0.00000\\ 0.00000\\ 0.00000\\ 0.00000\\ 0.00000\end{array}$	^
		-							
Step E	inergy De	elta E G	ma×	Grms	X	(rms	Xma×	Walltime	
@ 4 -117	7.90755769 -5.	3D-07 0.	00004	0.000	02 0.	00044	0.00113	37.5	~
		3511行	ī、78 列		100%	Window	vs (CRLF)	ANSI	

- 1. 計算終了後、メインウィンドウ上部の **日** (アニメーション) の構造最適化をクリックしま す。
- 2. ダイアログが開くので、デフォルトで選択されるファイルを開きます。



- **1. Animation**エリアの
 (再生)をクリックすると、構造最適化のアニメーションが再生されます(デフォルトでは一瞬で再生が終わります)。
- 2. そのまま最終フレームの構造が選択・表示された状態で、次のページに進みます。分子表示エリアに表示された構造が、この後の計算で使われます。
- Animationエリアの下部には、同エリア中部の各フレームの数値データの内、Columnで選ん だ列のデータのグラフが表示されます。



- 1. 再び CM (キーワード設定)をクリックして、EasySetupをクリックします。
- 2. EnergyとIRを選択し、OKをクリックした後、Runをクリックします。
- 3. 「c3h6_ir」など、構造最適化計算と異なるファイル名で保存し、計算を開始します。

Caussia	an Keyword Setup
Link0	%chk=tem
Comment	Winmostar
# ~	Charge 0 🗸 Multiplicity 1 🗸

Easy Setup	×
%nprocshared 1	~
B3LYP	√ / 6-31G* ∨
Charge 0 🗸	Multiplicity 1 ~
Solvent	
Optimize	Energy
Optimize(TS)	Optimize(TDDP
$\bigcirc IRC$ Forward $ \smallsetminus $	
Method	
○ None	
◯ IR&Raman	
	O RESP/ESP
Scan Bond V	9-0-0-0
Nstep 10 🗸	Step -0.05 🗸
Enter Scannin	ng Condition
Reset before apply	ing changes
0	K Cancel

Gaussianの場合

<u>NWChemの場合</u>

Easy Setup	×
B3LYP	√ / <mark>6-31G* √</mark>
Optimize	Energy
Method	
○ None	
O IR/Raman	
Reset before ap	plying changes
	OK Cancel

1. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は、EasySetupウィンドウの基底関数欄で **STO-3G**を選択します。





- 1. 計算終了後、 C (結果解析)のIR/ラマンスペクトルをクリックします。
- 2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを選択すると、IR Spectrumウィンドウが 出現します。
- ・ 必要に応じて計算手法・基底関数ごとのスケーリング係数はFreq Scalingで選択します。



- **1. IR Spectrum**ウィンドウ上で、1740 cm⁻¹付近をクリックすると、赤線でピークが選択され ます。
- 2. その後Animationボタンをクリックすると、Winmostar Viewerが起動し、1740 cm⁻¹の ピークの振動方向に原子を動かしたアニメーションが出現します。
- 3. 確認後、IR Spectrumウィンドウを閉じます。





ラマンスペクトルも計算する場合

- 1. キーワード設定ウィンドウのEasySetupでGaussianではIR&Raman、NWChemでは IR/Ramanを選択し、OKの後Runをクリックします。
- 2. ファイル名は「c3h6_raman」などIRを選択した時と違うものとして保存します。
- 3. 計算終了後、 🔁 (結果解析)からIR/ラマンスペクトルをクリックします。
- 4. 再びデフォルトで選択されるファイルを開くと、**IR及びラマンスペクトル**両方が描画された ウィンドウが出現します。
- NWChem6.6では、DFT法によるラマン計算は対応しておらず、HF法であれば実行可能です。



IV.NMRスペクトルの計算

- 1. 再び CM (キーワード設定)をクリックして、EasySetupをクリックします。
- 2. EnergyとNMRを選択し、OKをクリックした後、Runをクリックします。「c3h6_nmr」 などとしてファイル名を入力し保存すると計算が開始されます。
- ・ 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は、基底関数欄でSTO-3Gを選択します。







IV.NMRスペクトルの計算

- 1. 計算終了後、 C (結果解析)からNMRスペクトルを選択します。
- 2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開くと、Magnetic Shieldingウィンドウ が開きます。この時点では全原子の核磁気遮蔽定数が表示されます。



IV.NMRスペクトルの計算

- 1. NMR化学シフトを表示する場合は、Elementで注目したい元素を選択します。
- Referenceで参照データを選択するか、Shieldingに参照となる遮蔽定数を入力すると、横軸 が変化し選択した元素の化学シフトが表示されます。B3LYP/6-31G*で計算を行っている場 合、ReferenceのTMS B3LYP/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)を選択します。
- 3. 確認後、同ウィンドウを閉じます。
- 参照データを追加する方法は、本チュートリアルの補足に示します。



V. UV-Visスペクトルの計算

- 1. 再び 2 (キーワード設定)をクリックして、EasySetupをクリックします。
- **2. Energy**と**TDDFT**を選択し、**OK**をクリックした後、**Run**をクリックします。 「**c3h6_uvvis**」などとしてファイル名を入力し保存すると、計算が開始されます。
- ・ 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は、基底関数欄でSTO-3Gを選択します。

Gaussiano)场口
Easy Setup X
%nprocshared 1 ~
B3LYP ~ / 6-31G* ~
Charge 0 V Multiplicity 1 V
Solvent
Optimize Energy
Optimize(TS) Optimize(TDD
OIRC Forward V
Method
O None O IR
◯ IR&Raman
O NMR O RESP/ESP
Scan Bond 9-0-0-0
Nstep 10 V Step -0.05 V
Enter Scanning Condition
Reset before applying changes
OK Cancel

Coursianの担合

Easy Setup		×		
B3LYP	~ / 6-3	81G* ~		
Optimize	Energed	uv 🖉 👘		
Method				
○ None				
O IR/Raman		т		
Reset before applying changes				
	ОК	Cancel		

<u>NWChemの場合</u>

V. UV-Visスペクトルの計算

- 1. 計算終了後、 🔁 (結果解析) からUV-Visスペクトルを選択します。
- ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開きます。UV-Vis Spectrumウィンドウ が開き、UV-Visスペクトルが描画されます。左上欄には、それぞれのピークの吸収エネル ギー(eV)、吸収波長(nm)、強度が表示されます。



V. UV-Visスペクトルの計算

1. 右欄のスペクトルのピーク、もしくは左上欄のピークのリストをクリックすると、そのピーク の励起配置(励起元と励起先の軌道番号とその係数)が左下欄に表示されます。係数の絶対値が 大きいほど重要な励起配置となります。12、13番目の軌道はHOMOとLUMOであることから (分子軌道の表示は29-30ページ参照)、第1ピークはHOMOからLUMOへの励起であることが わかります。



VI.分子軌道の表示

- 1. C (結果解析)から分子軌道, 電荷を選択します。
- 2. 構造最適化計算のログファイル(「**c3h6_opt.out**」または「**c3h6_opt.log**」)を開きま す。
- 3. Energy Level DiagramウィンドウとSurface Setupウィンドウが開きます。

	💀 Energy Level — 🗆 🗙	🐼 Surface Setup - 🗆 🗙
□ 1 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 1	HOMO: 12 Unit:⊚au.⊝e	V File(<u>F</u>)
合う軌道,電荷(Z) リマン アニメーション いMRスペクトル(U) ドレーワード IR/ラマンスペクトル(I) RESP電荷(R)	HOMO-LUMO Gap: 0.2781 a.u. LUMO Energy: 0.0283 a.u. HOMO Energy: -0.2498 a.u. 33 0.8941 32 0.8753 31 0.8593 30 0.7789 29 0.7339 28 0.6790 27 0.6582 26 0.6354 25 0.6096 24 0.5354 25 0.6096 24 0.5354 22 0.4992 21 0.3777 20 0.2867 18 0.1803 17 0.1756 16 0.1505 15 0.0283 12 0.0283 13 0.0283 14 0.1137 13 0.0283 15 0.0283 15 0.1354 14 0.1137 13 0.0283 15 0.0283 15 0.0283 15 0.1354 16 0.1354 17 0.1354 17 0.1354 18 0.1803 17 0.1354 19 0.0283 10 0	C:¥winmos11¥UserData¥c3h6_opt.log Quantity MO Selected MO 12 Show Diagram 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 V Close
	Excel	

VI.分子軌道の表示

- Energy Level Diagramウィンドウには、各分子軌道のエネルギーが表示されます。初期状態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。
- ウィンドウ上部にはHOMOの軌道番号、HOMO-LUMO Gap、LUMO及びHOMOエネルギーが 表示され、HOMOエネルギーの符号を反対にした値が近似的なイオン化ポテンシャルとなります。

🚾 Energy Level	– 🗆 X
HOMO: 12 HOMO-LUMO Gap: 0.2781 a.u.	Unit:⊚au.⊝eV
LUMO Energy: 0.0283 a.u. HOMO Energy: -0.2498 a.u.	Offset Scale
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	
Excel	Close

VI.分子軌道の表示

1. Surface Setupウィンドウの**Draw**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動し、**Selected MO**で指定された軌道(図の例では12番目のHOMO)が表示されます。

Surface Setup File(F)	- 0	×	Winmostar Viewer V11.1.0 c3h6_opt.log MO #12 isoval=0.03 — □ Eile View Help
C:¥winmos11¥UserData¥c3h6_opt.log Quantity MO ✓ Selected MO 12 🗘 Show Diagram			
Parameters Draw Style Smooth <]Dump cube file		
Export V	aw		

VII.静電ポテンシャルの表示

1. Surface SetupウィンドウのQuantityでESP(Population Charge)/Surfaceを選択し、 右下のGenerate Cubeボタンをクリックします。

💹 Surface Setup		—		\times
File(<u>F</u>)				
C:¥winmos11¥Use	rData¥c3h6_opt.log			
Quantity	ESP(Population Charge)/Surface			
Selected MO	MO Surface ESP(Population Charge) ESP(Population Charge)/Surface		1	
Parameters	MO/Surface Density			
Draw Style	ESP	Dump cu	ube file	
Transparency	0.2 V Draw contour map			
Isosurface Value	0.03			
Points 50	Scale 1.5			
Export V	Gener	ate Cuhe	\wedge	
export	delicit			

VII.静電ポテンシャルの表示

1. Cube Plotウィンドウが出現し、右下のDrawボタンをクリックすると、Winmostar Viewerが起動し、Mulliken電荷から計算された静電ポテンシャルを分子表面にマッピングした様子が現れます(ここで表示しているのは、ESPそのものではなく近似ESPです)。

Cube Plot File(F)	_		×	Winmostar Viewer V11.1.0 on Charge)/Surface isoval=0.03 − □ × Eile View Help
C:¥winmos11¥UserData¥winmos_surf.cube				
cube Manipulation map V File 1 winmos_surf.cube File 2 winmos_esp2.cube				0.04260
Parameters				
Draw Style Smooth V Draw boundary				
Transparency 0.2 V Draw contour map Isosurface Value 0.03 Use absolute value Min -999 Max	999	_		
				-0.07504
Original File: c3h Export▼ ESP(Population Charge)/Surface Draw	h6_opt.	k Retu	Irn	

補足 NMR参照データ

- 1. 基準にしたい分子(TMSなど)、計算方法で構造最適化、NMR計算を行います。
- **2. Magnetic Shielding**ウィンドウを開きます。
- 3. 参照元にしたいピークをクリックすると、**Selected**に「6H 32.1864 ppm」などとそのピー クの核磁気遮蔽定数が表示されます。
- 4. EditをクリックするとUserPrefフォルダ内のwm_nmr.refが開かれます。
- 5. 「(**元素名**) (**上で取得したShielding定数**) "(**Winmostarで表示されるときの名** 前)"」という行を追加すると、**Reference**でその遮蔽定数を選択できるようになります。





• 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<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、<u>お問合せフォーム</u>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