

 winmostar チュートリアル

# GAMESS/Gaussian/NWChem 結合エネルギー計算

V11.7.4

2024年4月22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。

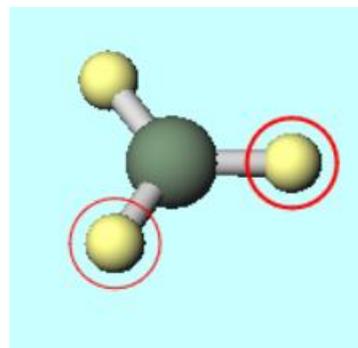
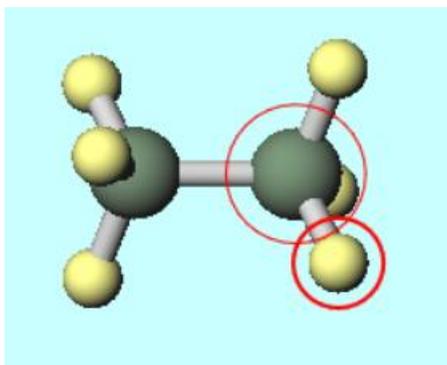
# 概要

エタンのC-C結合エネルギーをB3LYP/6-31G\*レベルで計算します。エタンとC-C結合解離後のメチルラジカルの構造最適化計算をそれぞれ行い、最終構造での

$$(\text{メチルラジカルのエネルギー}) \times 2 - (\text{エタンのエネルギー})$$

により結合エネルギーを算出します。

スピン多重度については、エタンは1重項、解離後のフラグメントにC-C結合の2電子を1つずつ割り振りメチルラジカルは2重項で計算します。他の結合エネルギーについては例えば酸素分子のO=O結合エネルギーでは、酸素分子、酸素原子どちらも片方の電子スピンの2つ多い3重項、窒素分子のN≡N結合エネルギーでは、窒素分子は1重項、窒素原子は片方の電子スピンの3つ多い4重項での計算となり、適切なスピン多重度の設定が重要になります。

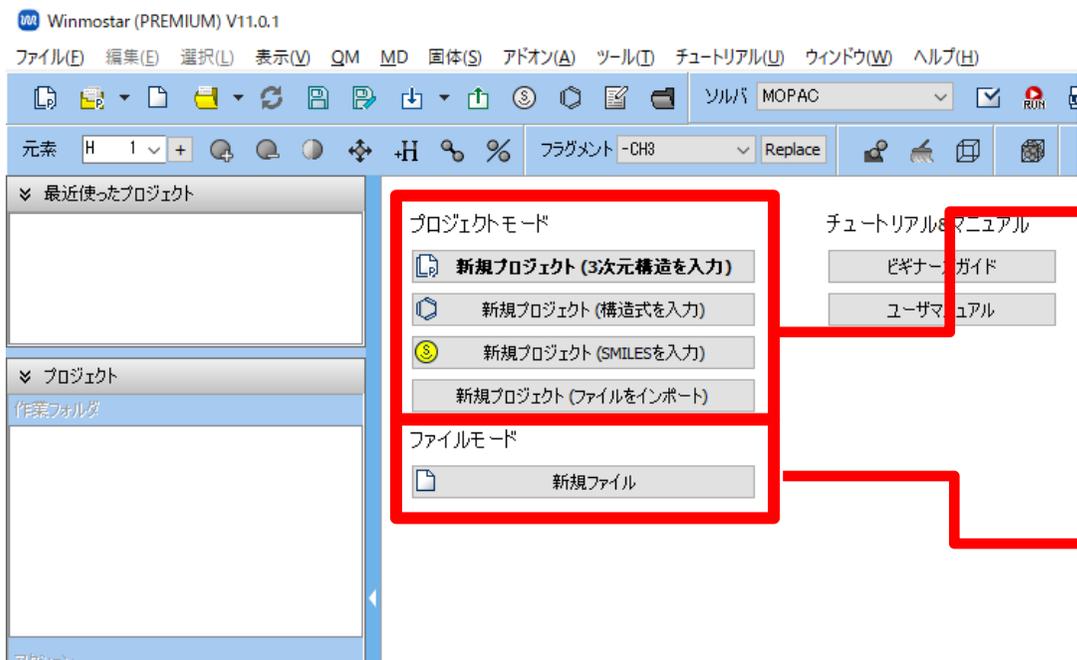


# Winmostar V11の動作モード

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。

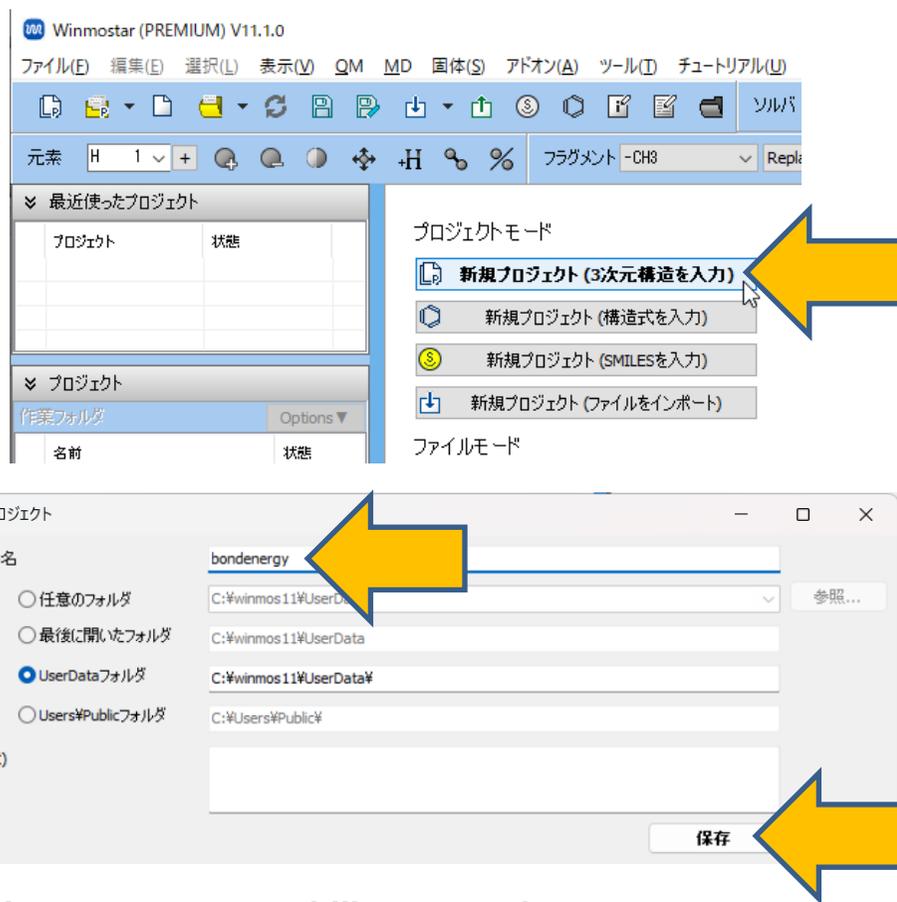
## ファイルモード

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。

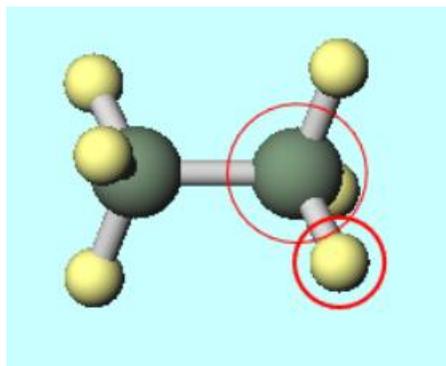
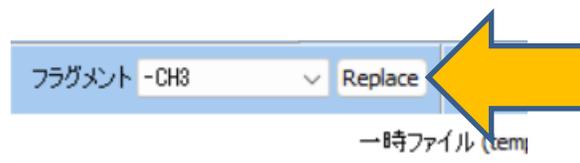
# I. 系のモデリング

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「bondenergy」と入力し**保存**をクリックします。



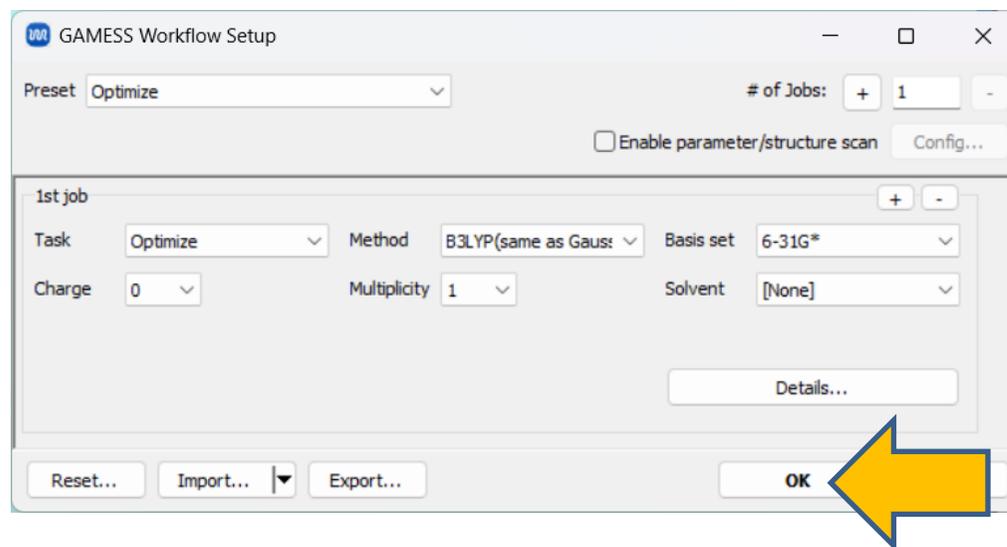
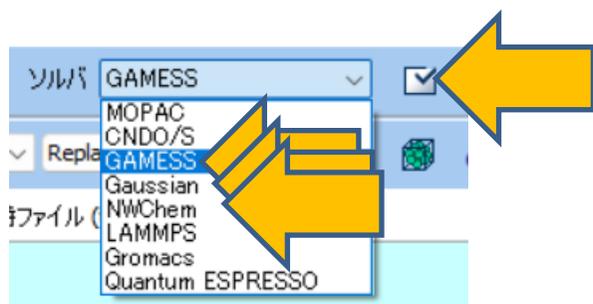
# I. 系のモデリング (エタン)

1. フラグメントを選択が-CH<sub>3</sub>の状態で、その右にある**Replace**ボタンを2回クリックし、エタンを作成します。



## II. 計算の実行（エタン）

1. ソルバを選択メニューで**GAMESS**、**Gaussian**、**NWChem**のいずれかを選択して、**ワークフロー設定**ボタンをクリックします。
2. **GAMESS/Gaussian/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 (エタン)

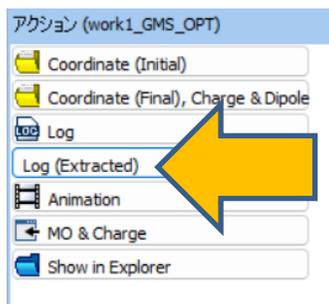
1. 作業フォルダが**END**になり計算終了後、アクション欄の**Log(Extracted)**ボタン (エコノミー版では**Log**ボタン) をクリックします。

2. 構造最適化計算の最後のエネルギー (単位はHartree) を取得します。

GAMESS: 最後のFINAL R-B3LYPV1R ENERGY ISの後の値

Gaussian: 最後のSCF Done: E(RB3LYP) =の後の値

NWChem: # 最後の数値の後の値



## GAMESS

```
Extracted Log (C:\winmos11\UserData\bondenergy.wmpjdata\work1_GMS_OPT\gms.out)
-----
NSERCH: 2 E= -79.8304372512 GRAD. MAX= 0.0008002 R.M.S.= 0.0002393
FINAL R-B3LYPV1R ENERGY IS -79.8304384586 AFTER 7 ITERATIONS
NSERCH: 3 E= -79.8304384586 GRAD. MAX= 0.0001672 R.M.S.= 0.0000491
FINAL R-B3LYPV1R ENERGY IS -79.8304385056 AFTER 7 ITERATIONS
NSERCH: 4 E= -79.8304385056 GRAD. MAX= 0.0000214 R.M.S.= 0.0000071
-----
***** EQUILIBRIUM GEOMETRY LOCATED *****
-----
```

## Gaussian

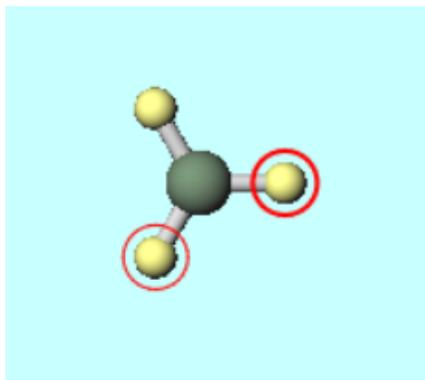
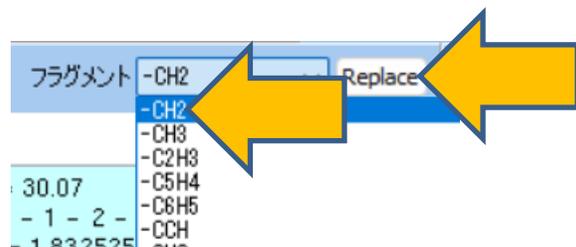
```
Extracted Log (C:\winmos11\UserData\bondenergy.wmpjdata\work1_...)
-----
SCF Done: E(RB3LYP) = -79.8303134086 A.U. after 9 cycles
Maximum Force 0.006079 0.000450 NO
RMS Force 0.001426 0.000300 NO
Maximum Displacement 0.022117 0.001800 NO
RMS Displacement 0.010771 0.001200 NO
SCF Done: E(RB3LYP) = -79.8304203754 A.U. after 8 cycles
Maximum Force 0.000197 0.000450 YES
RMS Force 0.000060 0.000300 YES
Maximum Displacement 0.000415 0.001800 YES
RMS Displacement 0.000224 0.001200 YES
Optimization completed.
-- Stationary point found.
-----
```

## NWChem

```
Extracted Log (C:\winmos11\UserData\bondenergy.wmpjdata\work3_NW_OPT\nw.out)
-----
@ 2 -79.83042193 -4.8D-06 0.00006 0.00002 0.00221 0.00419 6.9
Total DFT energy = -79.830422021171
Total DFT energy = -79.830422021171
Step Energy Delta E Gmax Grms Xrms Xmax Walltime
-----
@ 3 -79.83042202 -9.4D-08 0.00004 0.00001 0.00029 0.00055 8.4
Optimization converged
Step Energy Delta E Gmax Grms Xrms Xmax Walltime
-----
@ 3 -79.83042202 -9.4D-08 0.00004 0.00001 0.00029 0.00055 8.4
Total DFT energy = -79.830421256851
Center of charge (in au) is the expansion point
-----
```

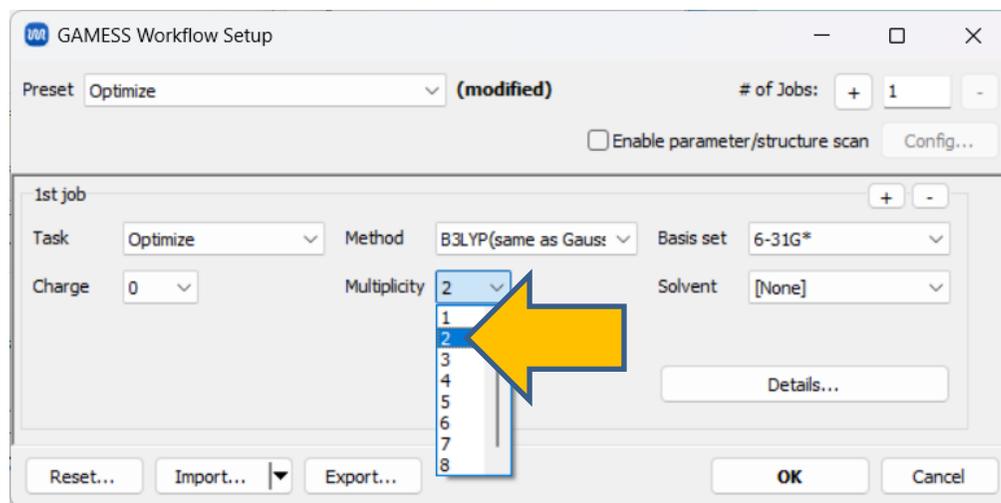
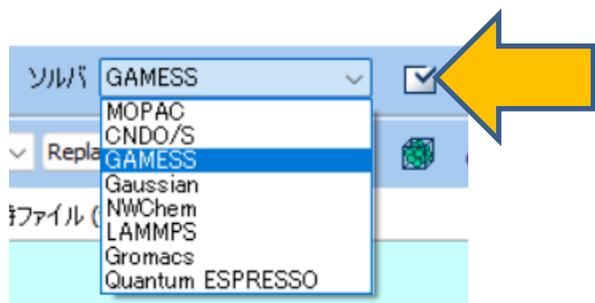
## IV.系のモデリング（メチルラジカル）

1. **編集 | 構造をリセット**をクリックして、CHの初期状態に戻します。
2. **フラグメントを選択**を**-CH2**に変更して、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、メチルラジカルを作成します。



## V. 計算の実行（メチルラジカル）

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の質問では、「いいえ」を選択します。
2. **GAMESS/Gaussian/NWChem Workflow Setup**ウィンドウで、**Multiplicity**を2に変更して、**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。



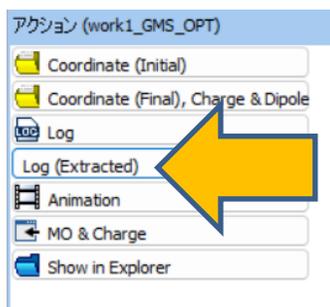
# VI. 結果解析 (メチルラジカル)

1. 作業フォルダが**END**になり計算終了後、アクション欄の**Log(Extracted)**ボタン (エコノミー版では**Log**ボタン) をクリックします。
2. 構造最適化計算の最後のエネルギー (単位はHartree) を取得します。

GAMESS: 最後のFINAL U-B3LYPV1R ENERGY ISの後の値

Gaussian: 最後のSCF Done: E(UB3LYP) =の後の値

NWChem: # 最後の数値の後の値



## GAMESS

```
Extracted Log (C:\winmos11\UserData\bondenergy.wmpjdata\work2_GMS_OPT\gms.out)
NSERCH: 2 E= -39.8382916162 GRAD. MAX= 0.0003344 R.M.S.= 0.0001287
FINAL U-B3LYPV1R ENERGY IS -39.8382901914 AFTER 7 ITERATIONS
NSERCH: 3 E= -39.8382901914 GRAD. MAX= 0.0007067 R.M.S.= 0.0002593
FINAL U-B3LYPV1R ENERGY IS -39.8382920524 AFTER 7 ITERATIONS
NSERCH: 4 E= -39.8382920524 GRAD. MAX= 0.0000084 R.M.S.= 0.0000040

***** EQUILIBRIUM GEOMETRY LOCATED *****
```

## Gaussian

```
Extracted Log (C:\winmos11\UserData\bondenergy.wmpjdata\work2_...
SCF Done: E(UB3LYP) = -39.8382896465 A.U. after 9 cycles
<Sx>= 0.0000 <Sy>= 0.0000 <Sz>= 0.5000 <S**2>= 0.7538 S= 0.5019
Maximum Force 0.000756 0.000450 NO
RMS Force 0.000495 0.000300 NO
Maximum Displacement 0.002000 0.001800 NO
RMS Displacement 0.001309 0.001200 NO
SCF Done: E(UB3LYP) = -39.8382919105 A.U. after 7 cycles
<Sx>= 0.0000 <Sy>= 0.0000 <Sz>= 0.5000 <S**2>= 0.7538 S= 0.5019
Maximum Force 0.000000 0.000450 YES
RMS Force 0.000000 0.000300 YES
Maximum Displacement 0.000001 0.001800 YES
RMS Displacement 0.000000 0.001200 YES
Optimization completed.
```

## NWChem

```
Extracted Log (C:\winmos11\UserData\bondenergy.wmpjdata\work4_NW_OPT\nw.out)
@ 2 -39.83829177 -1.9D-06 0.00003 0.00002 0.00097 0.00187 4.3
Total DFT energy = -39.838291779527
Total DFT energy = -39.838291779527
Step Energy Delta E Gmax Grms Xrms Xmax Waltime
@ 3 -39.83829178 -8.1D-09 0.00000 0.00000 0.00005 0.00009 5.2
Optimization converged
Step Energy Delta E Gmax Grms Xrms Xmax Waltime
@ 3 -39.83829178 -8.1D-09 0.00000 0.00000 0.00005 0.00009 5.2
Total DFT energy = -39.838291855458
Center of charge (in au) is the expansion point
```

## VII.結果解析（結合エネルギー計算）

1. (メチルラジカルのエネルギー) × 2 - (エタンのエネルギー)で、結合エネルギーを算出します。 $-39.8383 \times 2 - (-79.8304) = 0.1539 \text{ Hartree} = 96.5 \text{ kcal/mol} = 403.9 \text{ kJ/mol}$ となります。

メチルラジカル	-39.8383 Hartree
エタン	-79.8304 Hartree
結合エネルギー	0.1539 Hartree 96.5 kcal/mol 403.9 kJ/mol

# 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