

 winmostar チュートリアル

GAMESS/Gaussian/NWChem 2量体計算(分散力補正)

V10.1.3

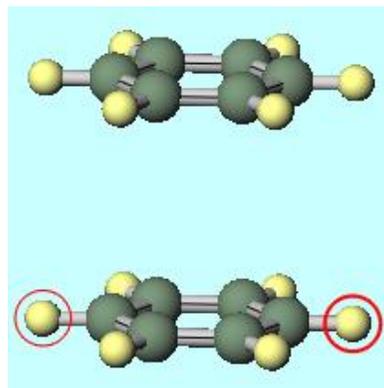
2020年5月20日 株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10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。

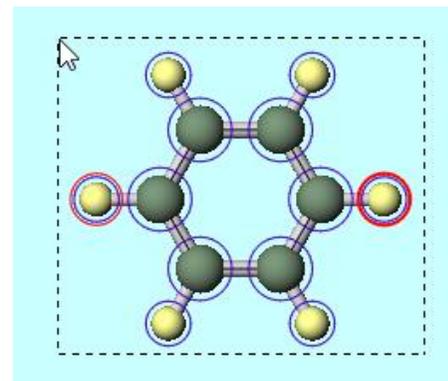
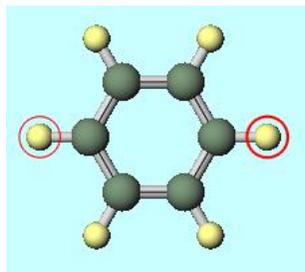
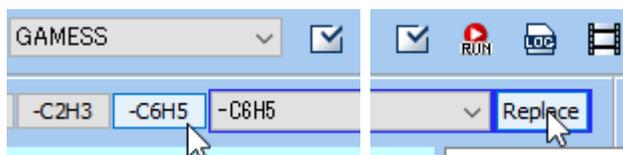
概要

- HF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。



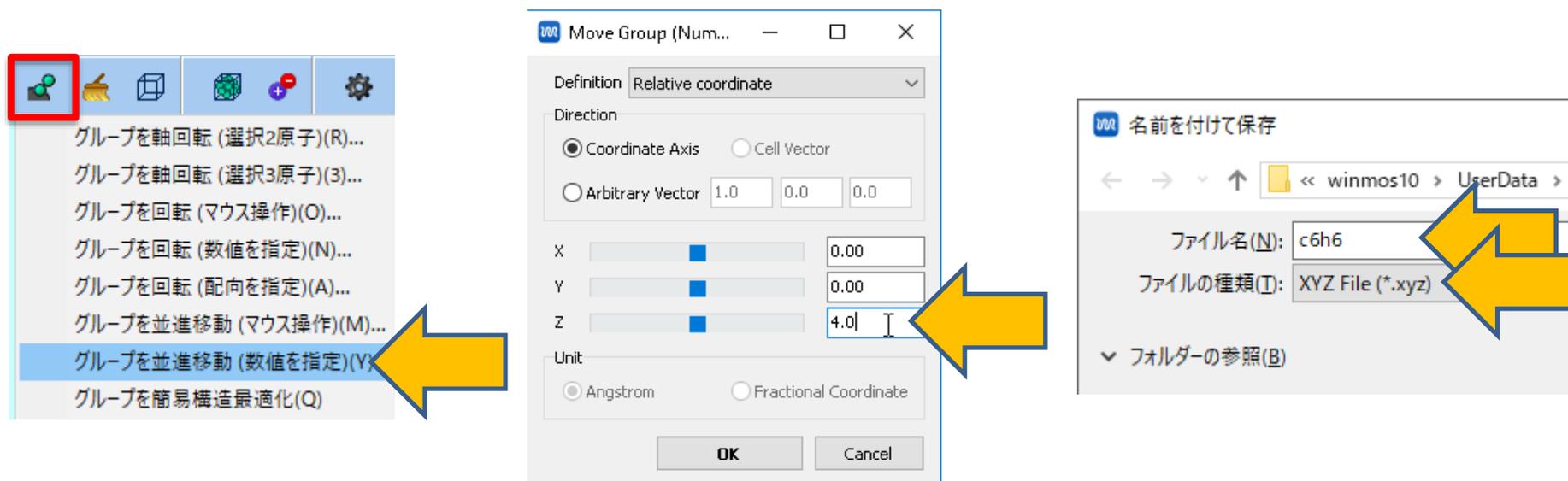
I. ベンゼン2量体モデリング

1. メインウィンドウ上部の**-C6H5**ボタンをクリックし、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、ベンゼンを作成する。
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する。



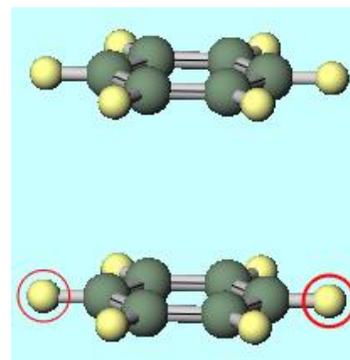
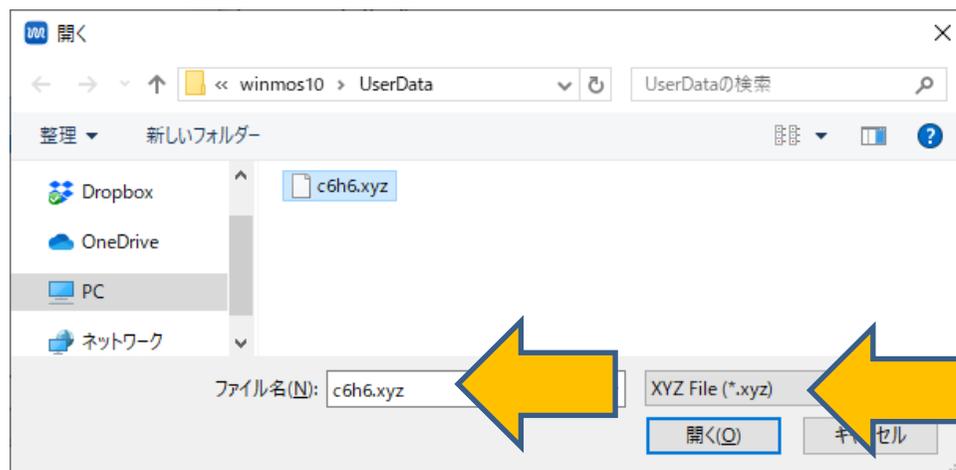
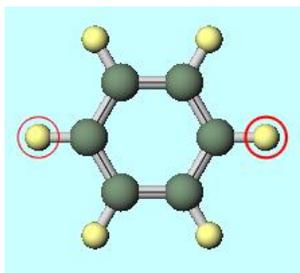
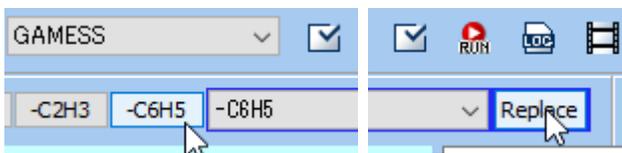
I. ベンゼン2量体モデリング

1.  **グループ編集**をクリックし、**グループを並進移動(数値を指定)**を選択する。
2. **Move Group**ウィンドウで、**Z**の欄に**4.0**を入力して、**OK**をクリックする。
3. **ファイル|名前を付けて保存**を選択する。ファイル名を入力(例えば「**c6h6**」)、ファイルの種類は**XYZ File (*.xyz)**を選択して、**保存**をクリックする。



I. ベンゼン2量体モデリング

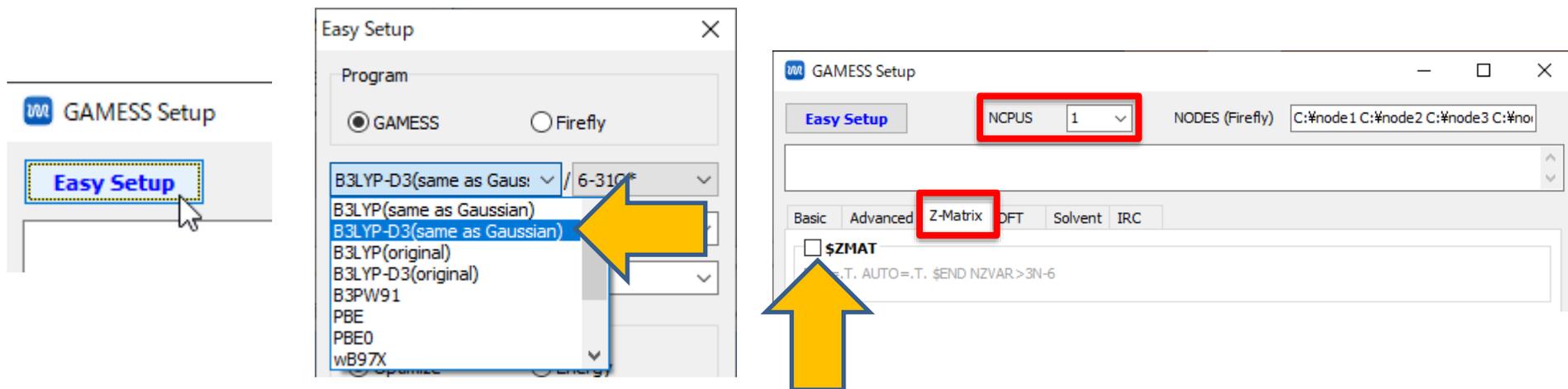
1. **新規**ボタンをクリックして初期化する。
2. メインウィンドウ上部の**-C6H5**ボタンをクリックし、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックし、ベンゼンを再度作成する。
3. **ファイル|追加読み込み**を選択する。ファイルの種類は**XYZ File (*.xyz)**を選択、ファイル名は「**c6h6.xyz**」を指定して、**開く**をクリックする。分子表示エリアにベンゼン2量体が表示される。



II. B3LYP-D3構造最適化計算

ソルバー一覧で**GAMESS**を選択した場合

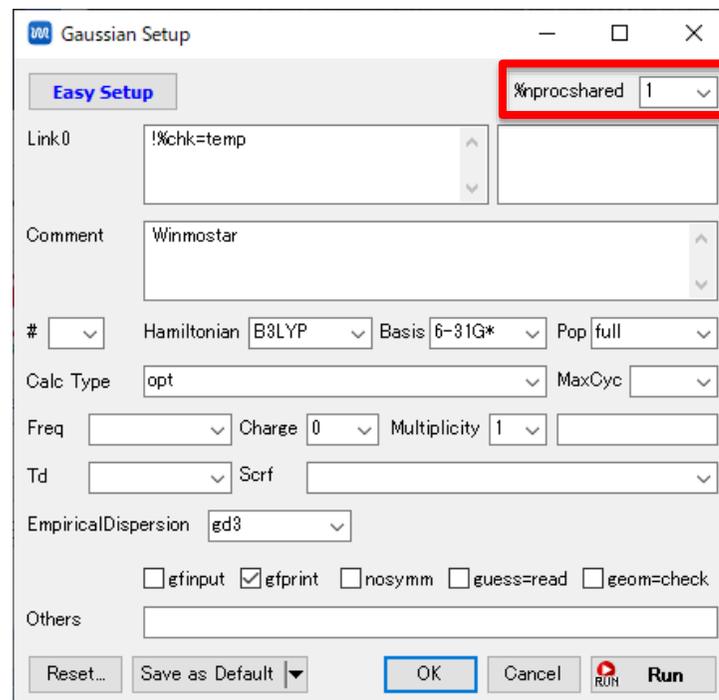
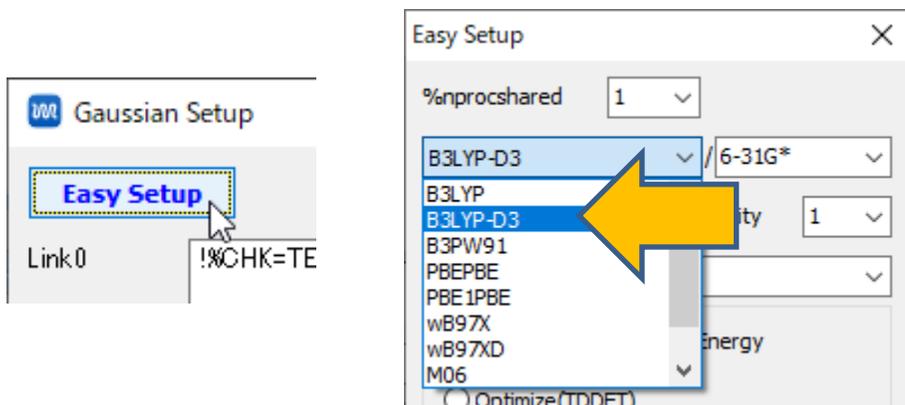
1. **GAMESS Setup**ウインドウ上部の**Easy Setup**ボタンをクリックする。
2. **Easy Setup**ウインドウで、**Hamiltonian**では**B3LYP(same as Gaussian)-D3**を選択し、**OK**ボタンで閉じる。
3. **GAMESS Setup**ウインドウの**Z-Matrix**タブの**\$ZMAT**のチェックを外す(全ての原子が結合でつながっていないため)。この計算は1CPUコアで1時間程度かかるため、使用する計算機のCPUコア数に合わせて**NCPUS**を指定する。**Run**ボタンをクリックすると、ファイル保存ダイアログが開くので、ファイル名を入力(例えば「**c6h6_2**」)して、保存をクリックする。



II. B3LYP-D3構造最適化計算

ソルバー一覧で**Gaussian**を選択した場合

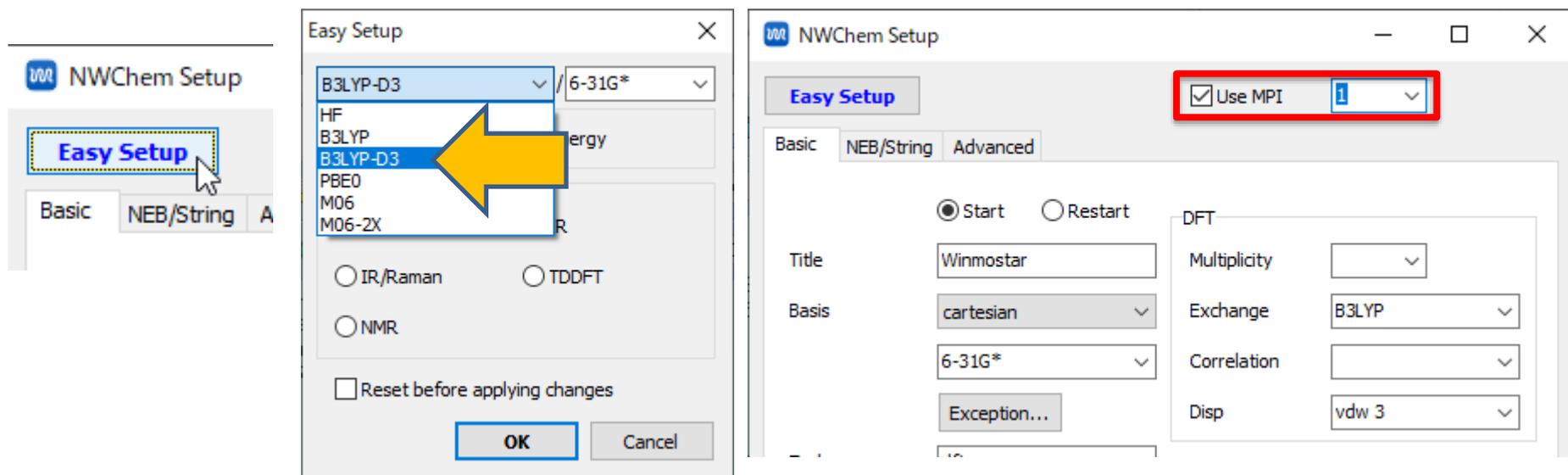
1. **Gaussian Setup**ウィンドウ上部の**Easy Setup**ボタンをクリックする。
2. **Easy Setup**ウィンドウで、**Hamiltonian**では**B3LYP-D3**を選択し、**OK**ボタンで閉じる。
3. **Gaussian Setup**ウィンドウで、この計算は1CPUコアで1CPUコアで1時間程度かかるため、使用する計算機のCPUコア数に合わせて**%nprocshared**を指定する。**Run**ボタンをクリックすると、ファイル保存ダイアログが開くので、ファイル名を入力（例えば「**c6h6_2**」）して、保存をクリックする。



II. B3LYP-D3構造最適化計算

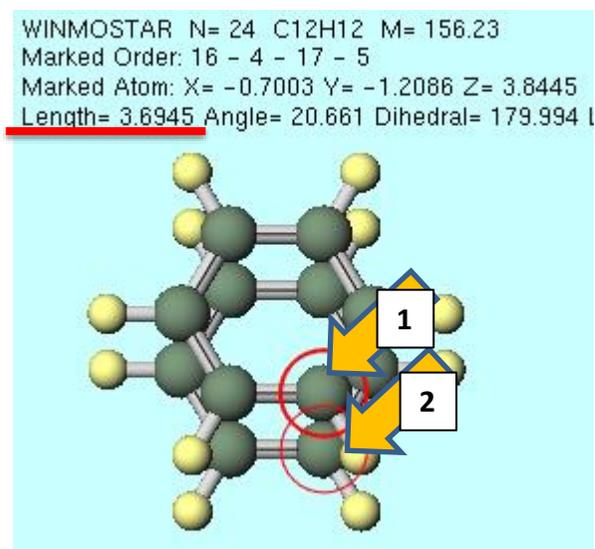
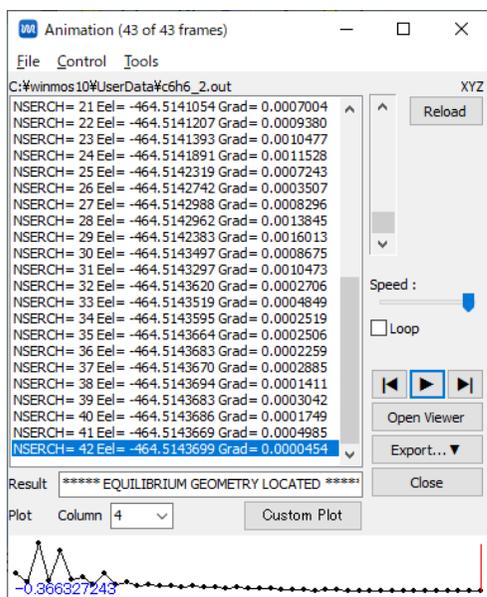
ソルバー一覧でNWChemを選択した場合

1. NWChem Setupウィンドウ上部の**Easy Setup**ボタンをクリックする。
2. Easy Setupウィンドウで、Hamiltonianでは**B3LYP-D3**を選択し、**OK**ボタンで閉じる。
3. NWChem Setupウィンドウの**Run**ボタンをクリックする。この計算は1CPUコアで1時間程度かかるため、使用する計算機のCPUコア数に合わせて、**Use MPI**にチェックを入れその右の欄に値を入れる。ファイル保存ダイアログが開くので、ファイル名を入力（例えば「c6h6_2」）して、保存をクリックする。



III.B3LYP-D3計算結果

1. 計算終了後、メインウィンドウ上部の  (アニメーション)|構造最適化をクリックする。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く。
2. Animationウィンドウの  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する。
3. ベンゼン環を上から見て重なる位置にある炭素原子2つを続けてクリックして、ベンゼン2量体の平面の距離となるLengthの値を調べる。2層間距離の変化に対するエネルギーの変化が非常に小さく、ソルバごとに異なる収束判定条件が適用されるため、ソルバによって結果は多少異なるが3.7~3.8 Åで安定な構造になることを確認する。



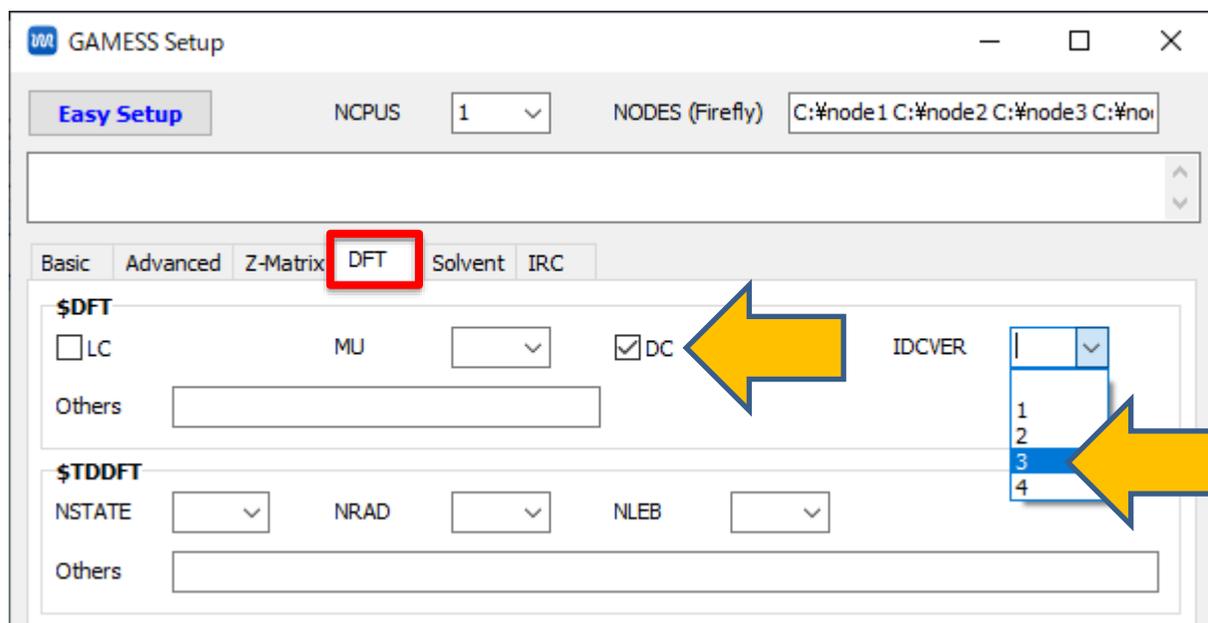
IV. B3LYPとB3LYP-D3の比較

- ✓ **Hamiltonian**を**B3LYP**に変更して同様の計算を行う。**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する。ただし、BSSE(Basis Set Superposition Error、例えば2量体の計算で基底関数が不十分な場合、それぞれの単量体が相手の単量体の基底関数も使ってエネルギーを下げてしまう)の影響により、ある程度の距離で構造は収束する。
- ✓ **Hamiltonian**を**B3LYP**、**基底関数**を**6-31G***から**6-311G***に変更して同様の計算を行う。6-31G*に比べて計算時間が大幅にかかるので、途中で打ち切ってもよい。**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する。基底関数を良くしたため、BSSEの影響が小さくなり、6-31G*の場合よりもさらに離れる。
- ✓ **Hamiltonian**を**B3LYP-D3**、**基底関数**を**6-31G***から**6-311G***に変更して同様の計算を行う。分散力補正が入った**B3LYP-D3**では基底関数を良くしても、2層間の距離は3.7~3.8Åでほとんど変わらないことを確認する。

V. その他の汎関数での-D3指定方法

ソルバー一覧で**GAMESS**を選択した場合

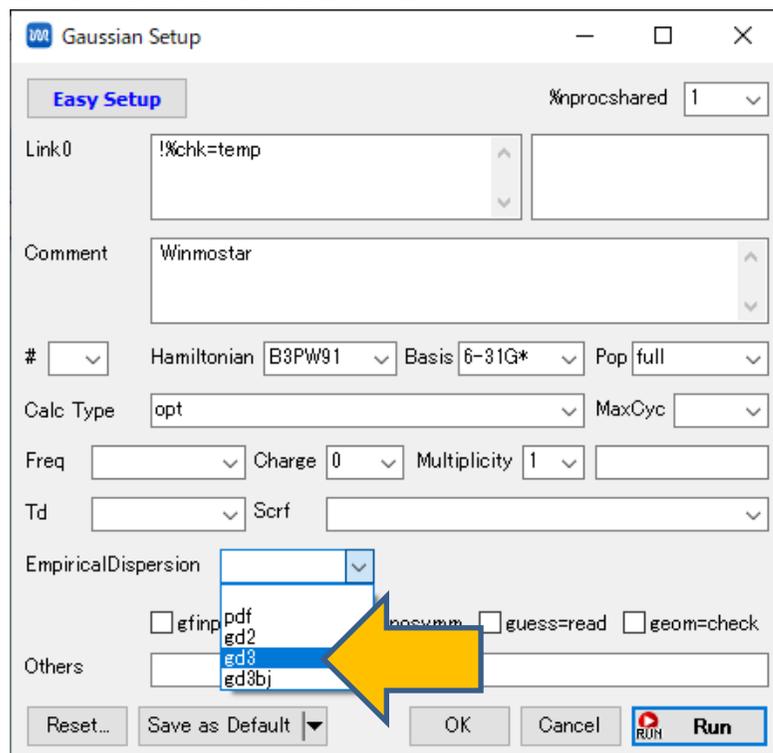
1. **GAMESS Setup**ウィンドウもしくは**Easy Setup**ウィンドウで、使用したい汎関数を選択する。
2. **GAMESS Setup**ウィンドウで**DFT**タブをクリックし、**\$DFT**欄の**DC**にチェックを入れて、**IDCVER**では**3**を選択する。
3. **Run**ボタンをクリックして、計算を実行する。



V. その他の汎関数での-D3指定方法

ソルバー一覧で**Gaussian**を選択した場合

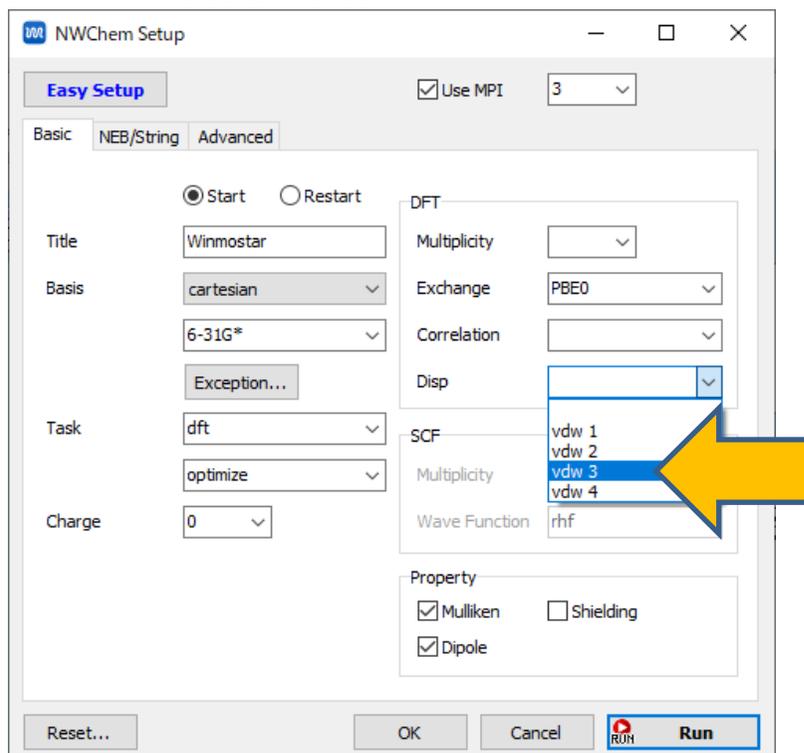
1. **Gaussian Setup**ウィンドウもしくは**Easy Setup**ウィンドウで、使用したい汎関数を選択する。
2. **Gaussian Setup**ウィンドウで、**EmpiricalDispersion**では**gd3**を選択する。
3. **Run**ボタンをクリックして、計算を実行する。



V. その他の汎関数での-D3指定方法

ソルバー一覧でNWChemを選択した場合

1. NWChem SetupウィンドウもしくはEasy Setupウィンドウで、使用したい汎関数を選択する。
2. NWChem Setupウィンドウで、DFT欄のDISPではvdw 3を選択する。
3. Runボタンをクリックして、計算を実行する。



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