

 winmostar チュートリアル

Gaussian

蛍光・りん光スペクトル計算

V10.1.5

2020年8月21日 株式会社クロスアビリティ

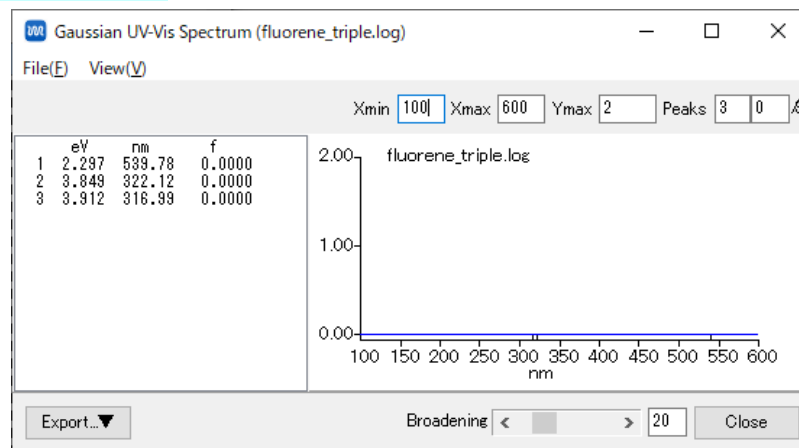
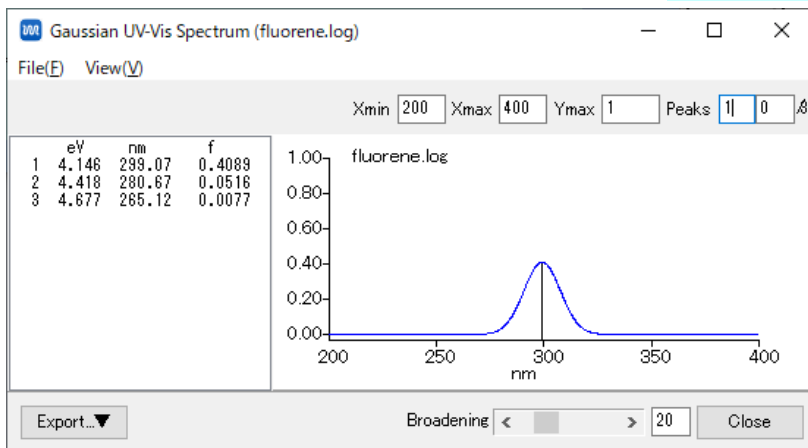
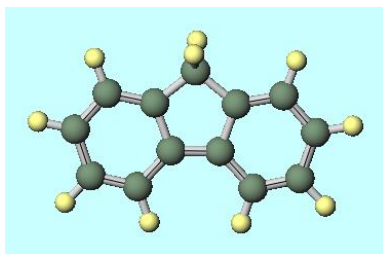
本書について

- 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[ビギナーズガイド](#)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

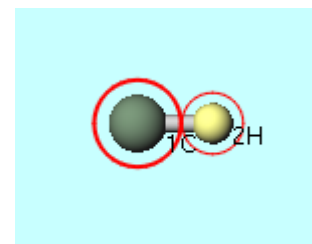
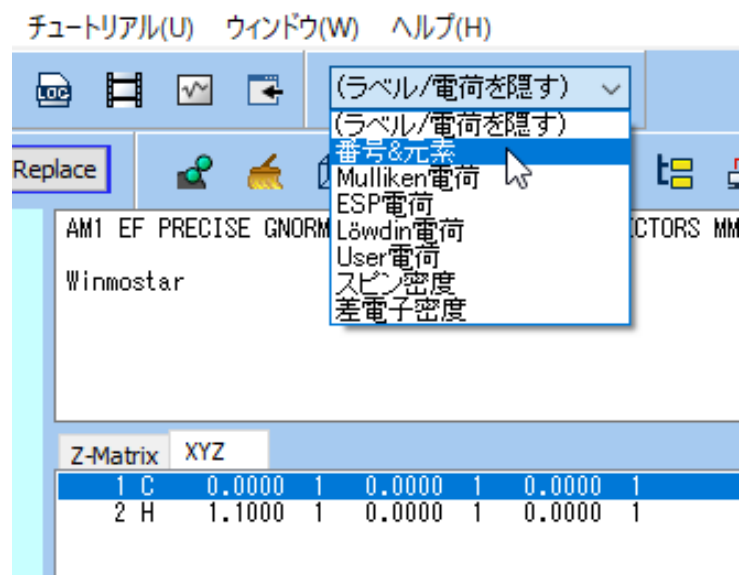
- フルオレン($C_{13}H_{10}$)分子の蛍光及びりん光スペクトル計算をGaussianを用いて実行します。前半は、一重項第1励起状態の構造最適化計算をTDDFT(B3LYP/6-31G*)レベルで実行し、蛍光スペクトルを表示します。後半は、三重項第1励起状態の構造最適化計算をTDDFT(B3LYP/6-31G*)レベルで実行し、りん光スペクトルを表示します。

注意点：一重項と三重項が混ざらない(スピン軌道相互作用が入っていない)非相対論の範囲での計算のため、りん光計算での強度は理論上必ず0になり、波長のデータのみ得られます。



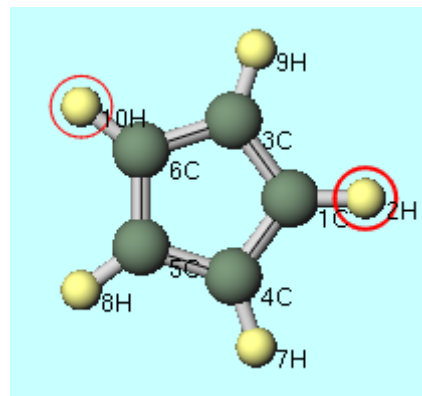
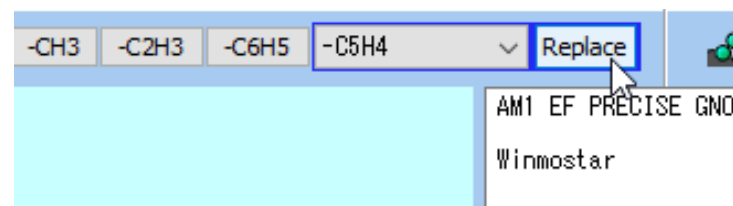
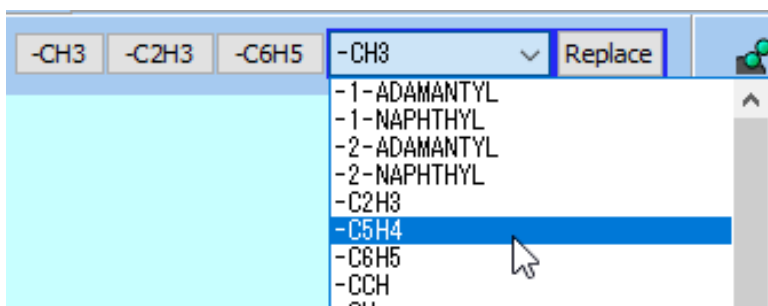
I. モデルの作成

Winmostarを起動し、メインウィンドウ右上のラベル/電荷メニューから番号&元素を選択し、分子表示エリアで各原子の名前を表示する。



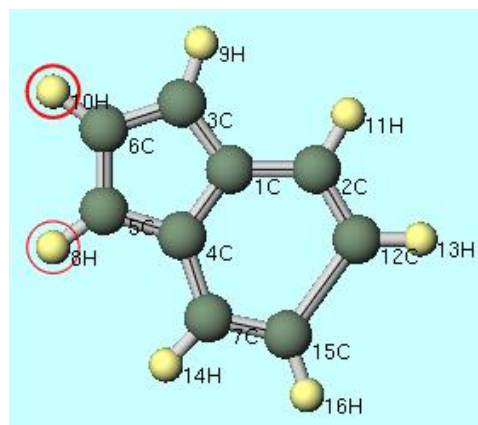
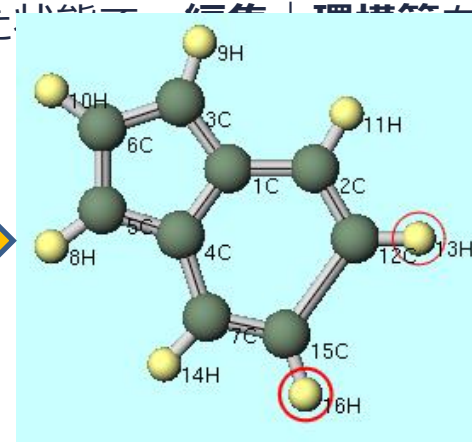
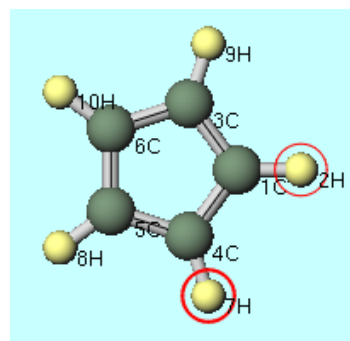
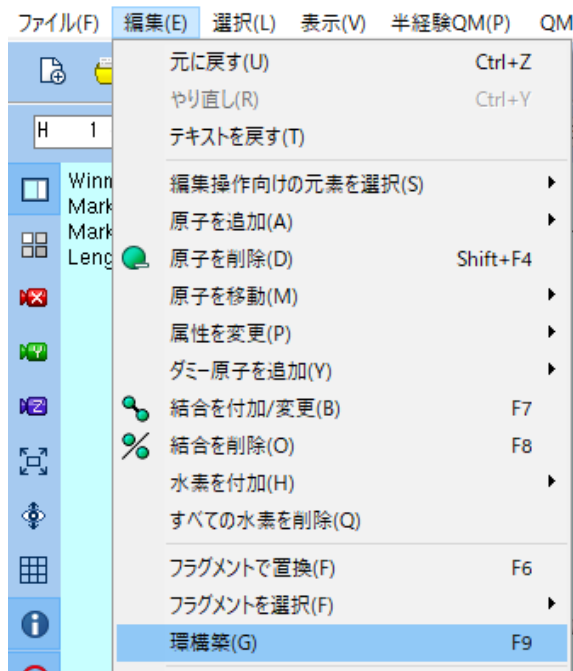
I. モデルの作成

1. メインウィンドウ上部の**フラグメント**を選択から**-C5H4**を選択し、その右にある**Replace**ボタンを1回クリックする。



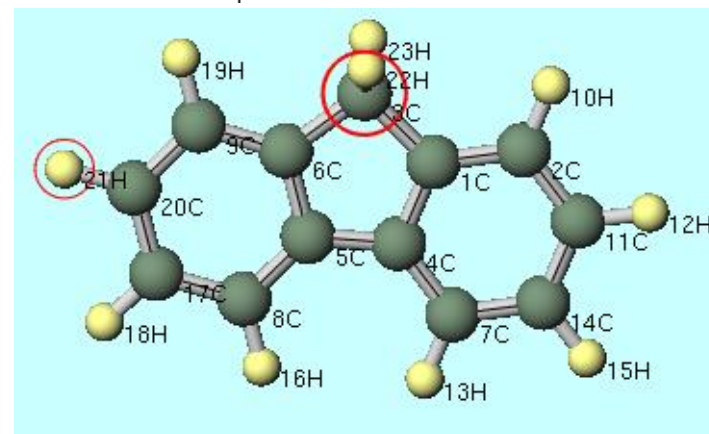
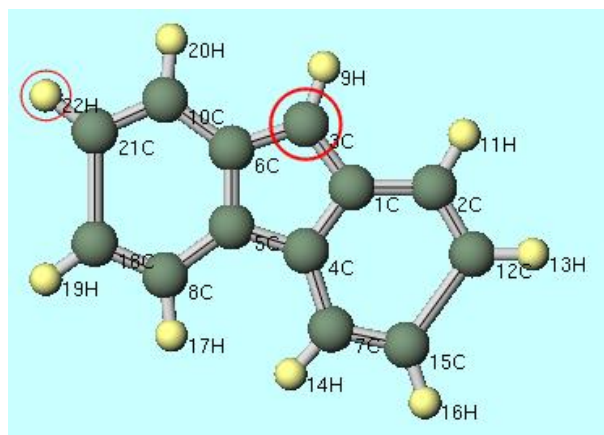
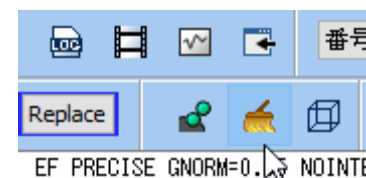
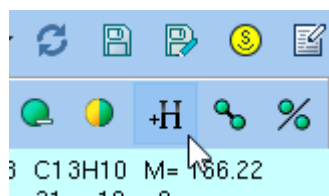
I. モデルの作成

1. 2Hと7H原子をクリックして2つの原子が赤丸で選択された状態で、**編集 | 環構築**を選択する。
2. 8Hと10H原子をクリックして2つの原子が赤丸で選択された状態で、**編集 | 環構築**を再度選択する。



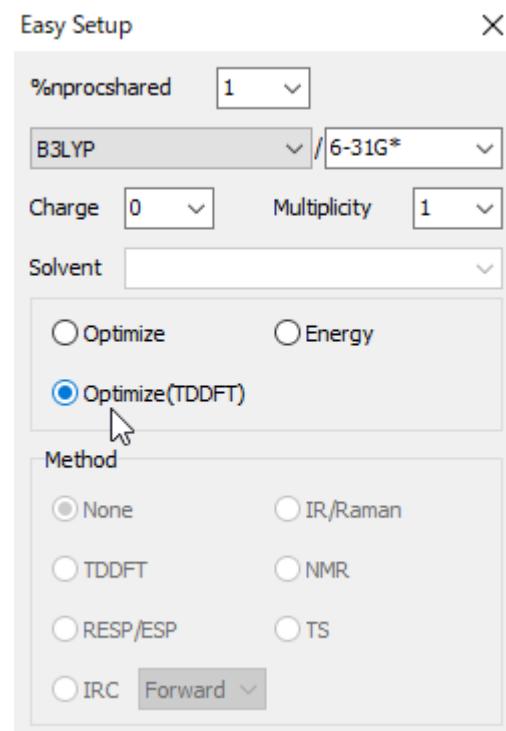
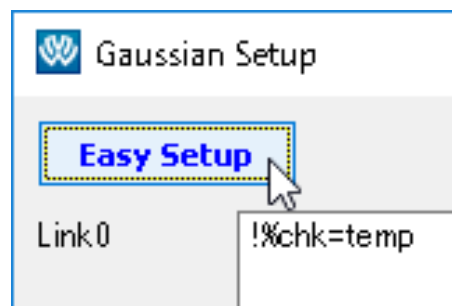
I. モデルの作成

1. 3C原子をクリックして、**選択原子に水素を付加**を1回クリックする。
2. **簡易構造最適化**ボタンをクリックする。これで9H-フルオレン分子の初期構造が完成する。



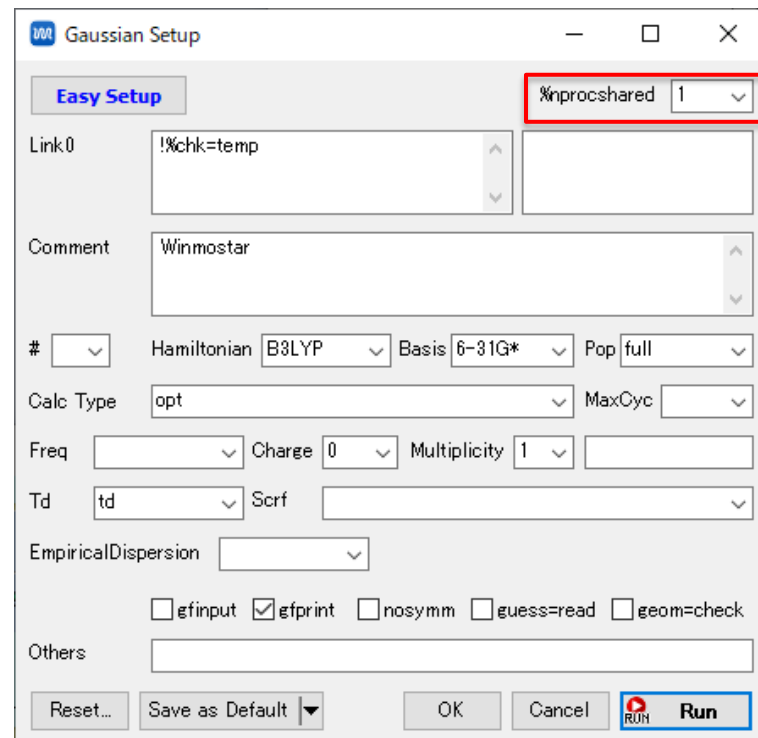
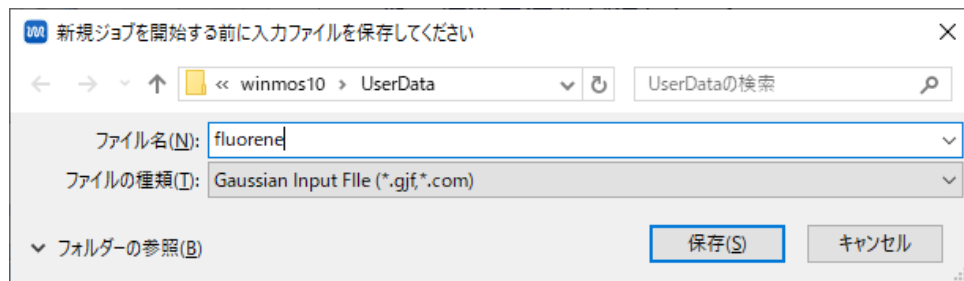
II. 一重項励起状態構造最適化計算

1. ソルバを選択メニューで**Gaussian**を選択して、**キーワード設定**ボタンをクリックする。
2. 開いた**Gaussian Setup**ウィンドウで、**Easy Setup**ボタンをクリックする。
3. **Easy Setup**ウィンドウで**Optimize(TDDFT)**を選択して、**OK**ボタンをクリックする。



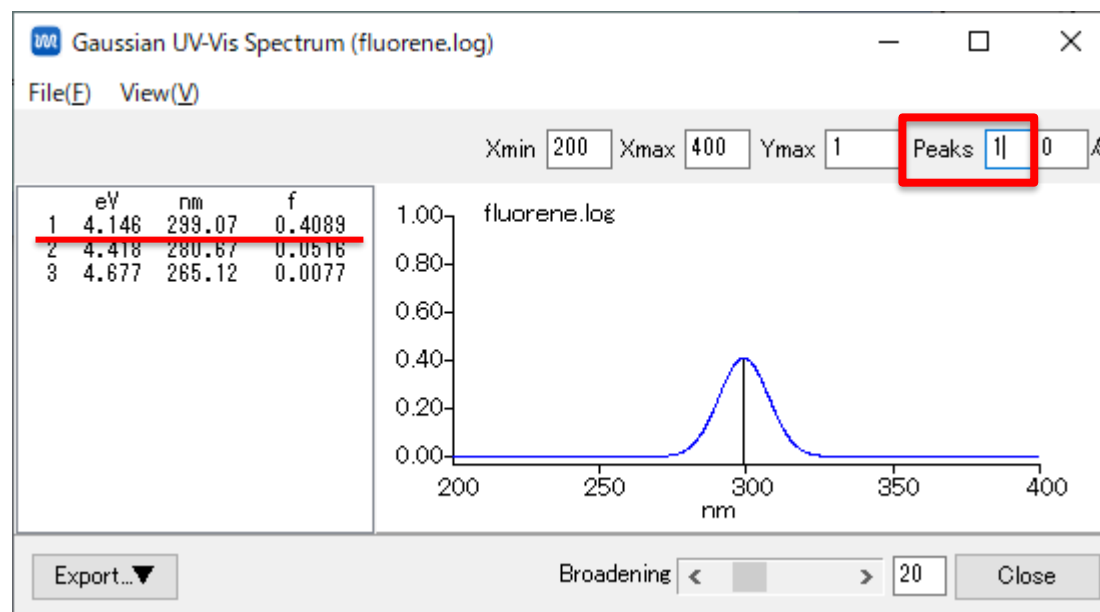
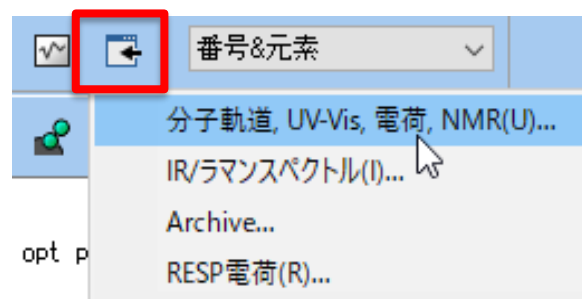
II. 一重項励起状態構造最適化計算

1. SetupウィンドウでRunボタンをクリックする。
2. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（ここでは「fluorene」とする）、保存ボタンを押すとファイルが保存され、黒いウィンドウが開きGaussianの処理が開始される。
 - Td欄で追加の指定をしなければ、一重項第1励起状態の構造最適化が行われる。
 - 20原子程度のフルオレン分子でも、B3LYP/6-31G*レベルでは1CPUコアで10時間程度かかるため、計算機のコア数に応じて%nprocsharedを設定する。



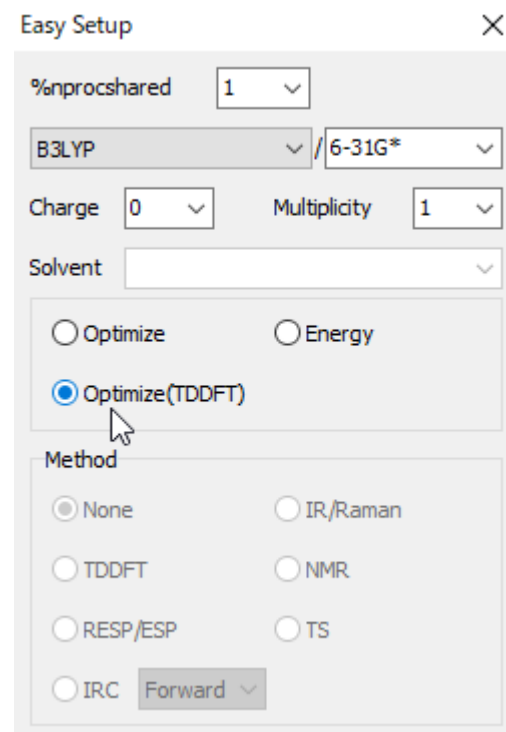
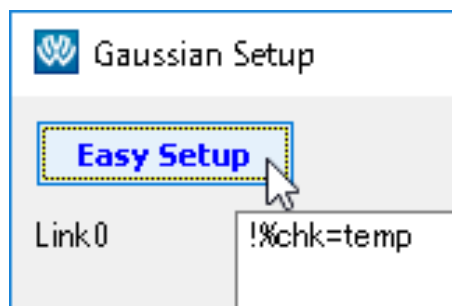
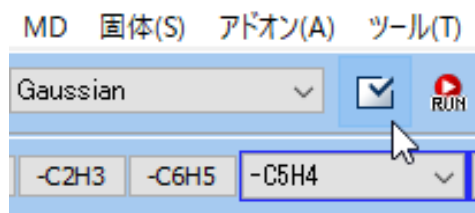
III. 蛍光スペクトル表示

1. **結果解析** | **分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR**をクリックし、デフォルトで選択されるファイル (fluorene.log) を開くと、一重項第1励起状態最適化構造でのスペクトルが表示される。
2. スペクトルを見やすくするため、**Xmin**を**200**、**Xmax**を**400**、**Ymax**を**1**にする。
3. 今回の計算で意味があるのは基底状態と第1励起状態のエネルギー差であること、蛍光のほとんどは第1励起状態から起こる(カシャの法則)ことから、余分なピークを削除するためPeaksの右横の数値を1にする。蛍光波長はUV-Visスペクトルウィンドウの左欄リスト1番目の299.07 nmとなる。



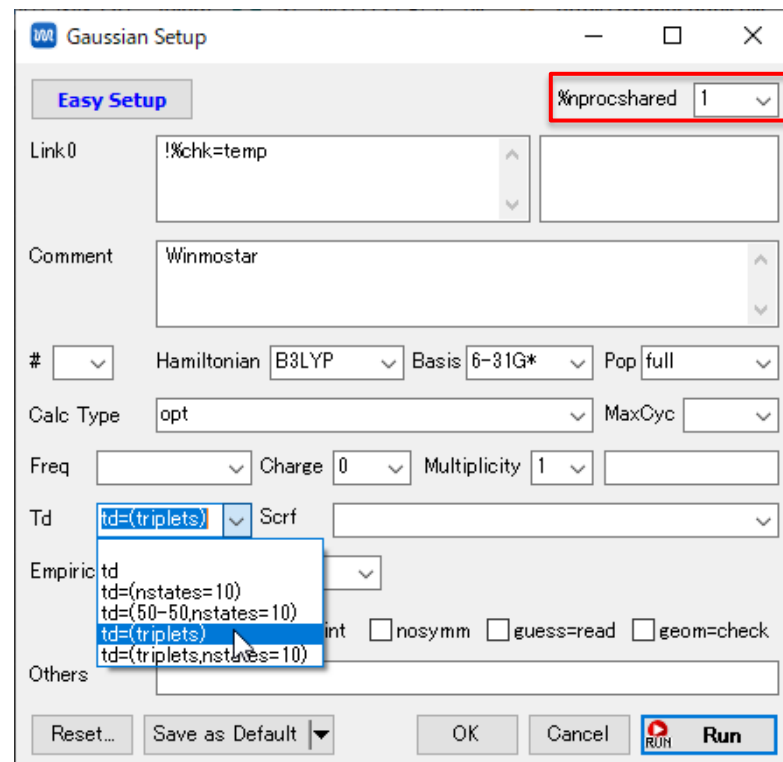
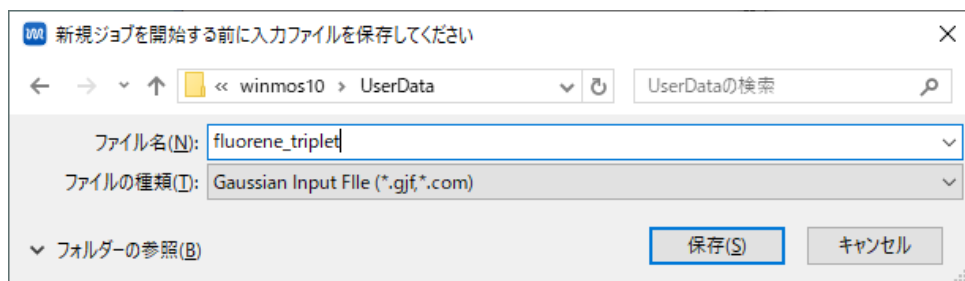
IV. 三重項励起状態構造最適化計算

1. UV-Visスペクトルウィンドウを閉じた後、**キーワード設定**ボタンをクリックする。
2. 開いた**Gaussian Setup**ウィンドウで、**Easy Setup**ボタンをクリックする。
3. **Easy Setup**ウィンドウで**Optimize(TDDFT)**を選択して、**OK**ボタンをクリックする。



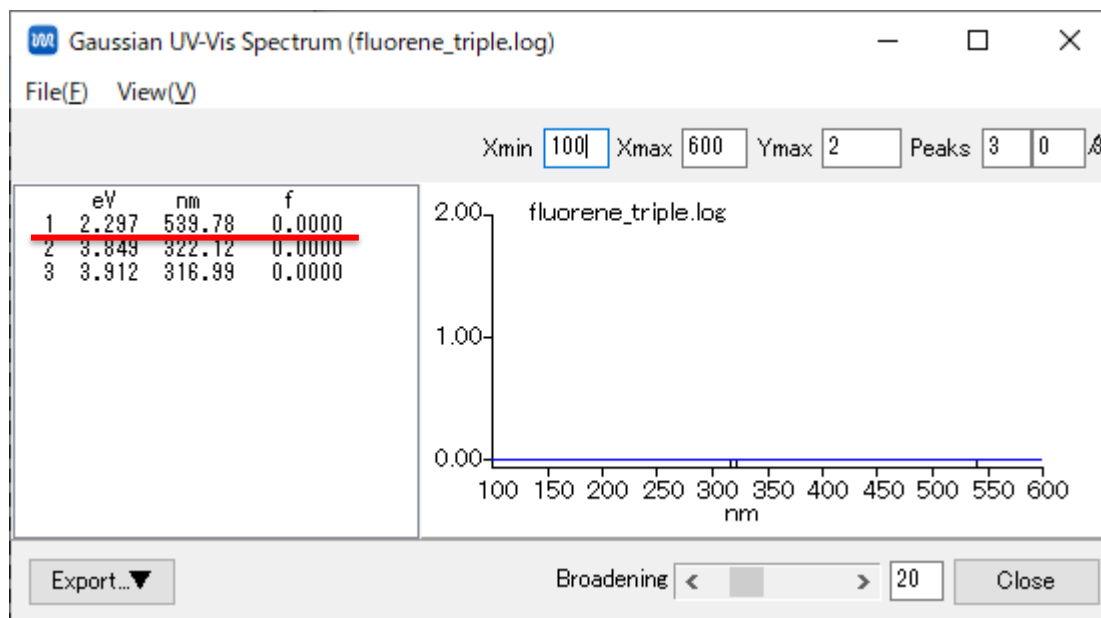
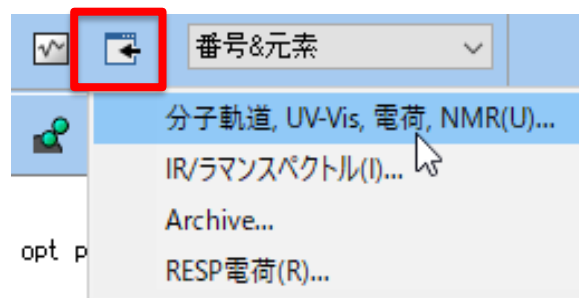
IV. 三重項励起状態構造最適化計算

1. **Setup**ウィンドウで**Td**欄で**td=(triplets)**を選択して、三重項第1励起状態の構造最適化の指定にする。
 2. **Run**ボタンをクリックする。
 3. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（「fluorene_triplet」とする）、**保存**ボタンを押すとファイルが保存され、黒いウィンドウが開きGaussianの処理が開始される。
- B3LYP/6-31G*レベルでは1CPUコアで10時間程度かかるため、計算機のコア数に応じて%nprocsharedを設定する。



V. りん光スペクトル表示

1. **結果解析** | **分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR**をクリックし、デフォルトで選択されるファイル (fluorene_triplet.log) を開くと、三重項第1励起状態最適化構造でのスペクトルが表示される。
2. 今回の計算で意味があるのは基底状態と第1励起状態のエネルギー差であること、りん光のほとんどは第1励起状態から起こる(カシャの法則)ことから、りん光波長はUV-Visスペクトルウィンドウの左欄リスト1番目の539.78 nmとなる。一重項と三重項が混ざらない(スピン軌道相互作用が入っていない)非相対論の計算のため、強度は理論上必ず0になり、この計算では波長のデータのみ得られる。



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