

 winmostar チュートリアル

Gaussian

溶媒効果

V10.1.3

2020年5月14日 株式会社クロスアビリティ

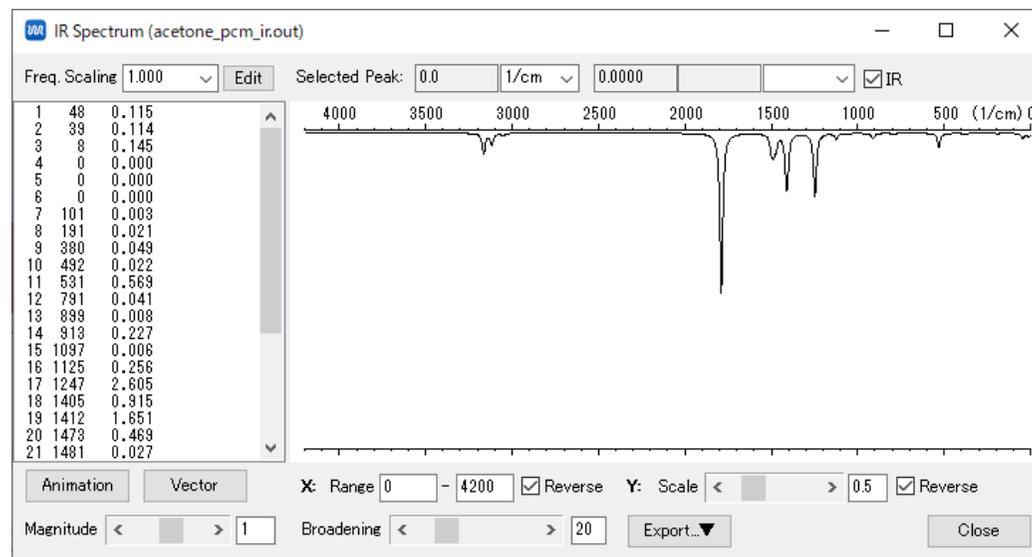
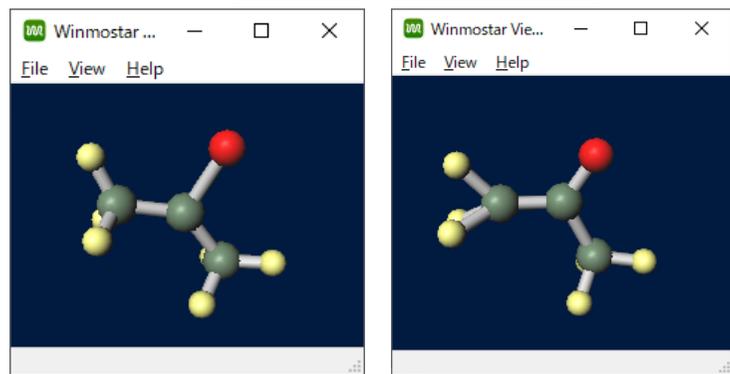
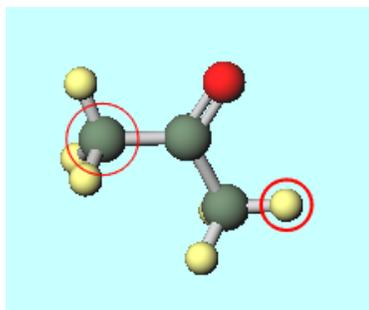
本書について

- 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

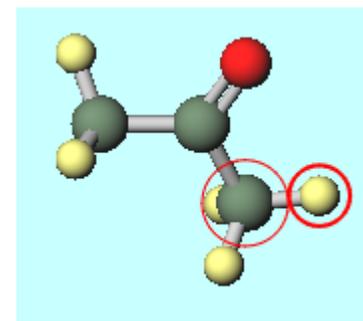
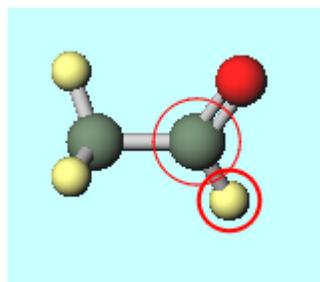
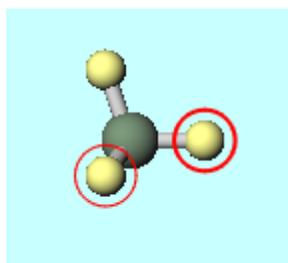
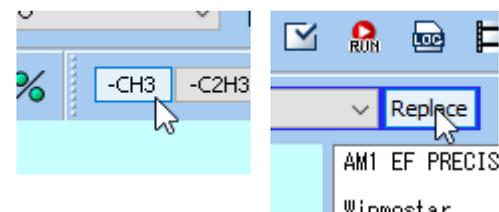
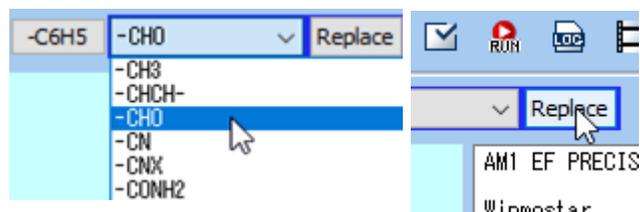
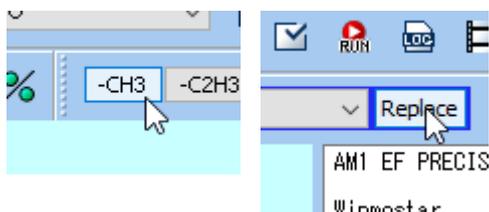
PCM法を用いて水溶液中のアセトン分子の構造最適化とIR計算をB3LYP/6-31G*レベルで計算します。PCM(polarizable continuum model、分極連続体モデル)法では、溶媒の誘電率を持った連続誘電体を溶質分子の周りに置き、近似的に溶媒効果を取り込みます。

比較のために、真空中で同様に構造最適化と振動計算をB3LYP/6-31G*レベルで計算し、親水基のC=O部分の伸縮振動、疎水基のC-H部分の変角運動がどのように変化するかを確認します。



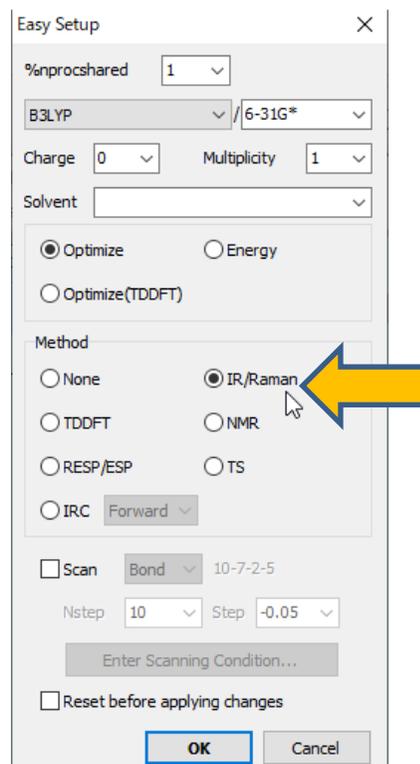
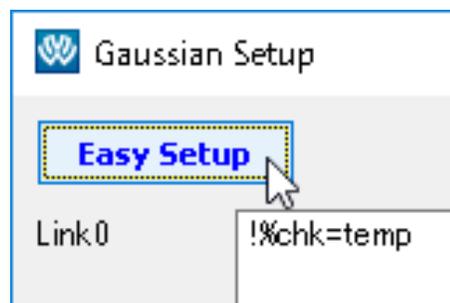
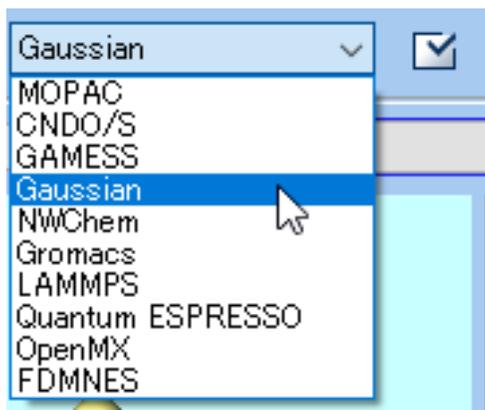
I. アセトン分子のモデリング

1. メインウィンドウ上部の**-CH3**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、メタンを作成する。
2. **フラグメントを選択**から**-CHO**を選択し、**Replace**ボタンを1回クリックし、アセトアルデヒドを作成する。
3. 再度**-CH3**ボタンをクリックし、**Replace**ボタンを1回クリックし、アセトンを作成する。



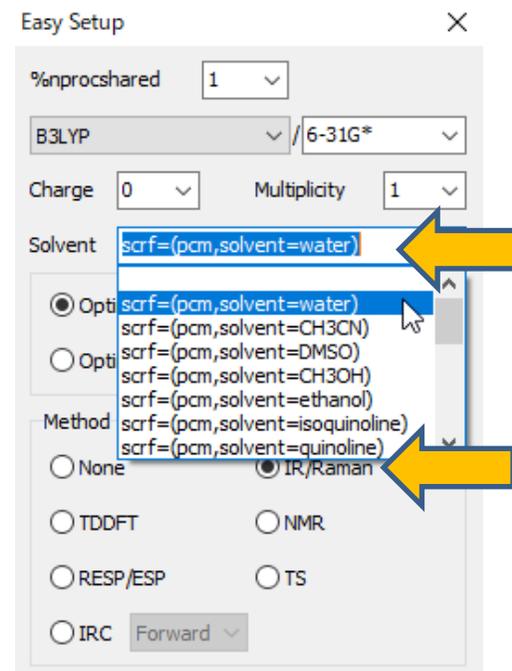
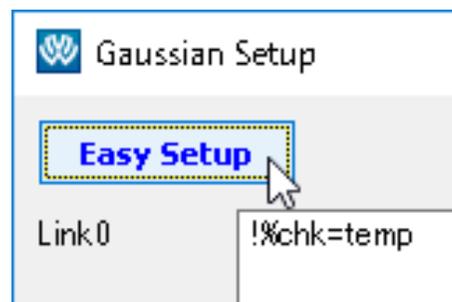
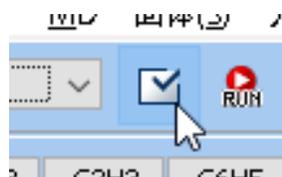
II. 構造最適化+IR計算(真空中)

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**ボタンを押す。
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**ウィンドウの**Method**で**IR/Raman**を選択し、**OK**ボタンをクリックする。
まず構造最適化を行って、その構造でIR/Raman計算を行う内容となる。
4. **Gaussian Setup**ウィンドウで**Run**ボタンをクリックする。
5. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（仮にファイル名は「acetone_opt_ir」
とする）、**保存**ボタンを押して計算を実行する。



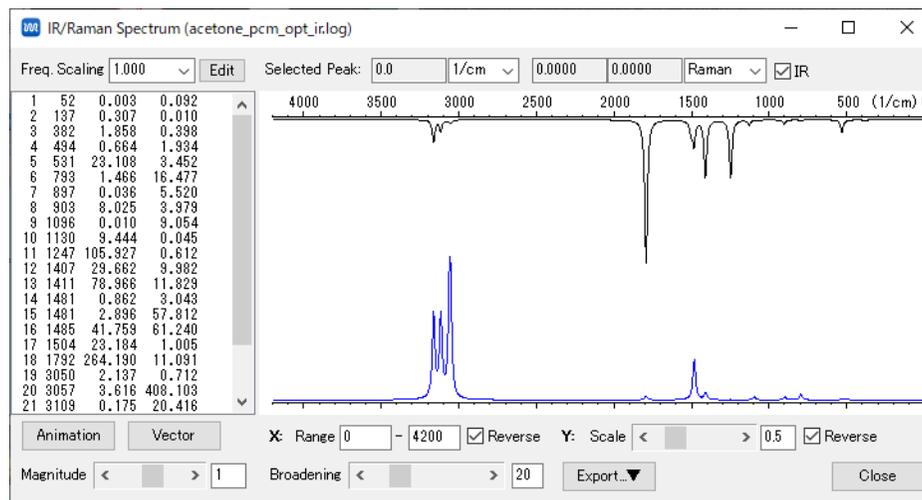
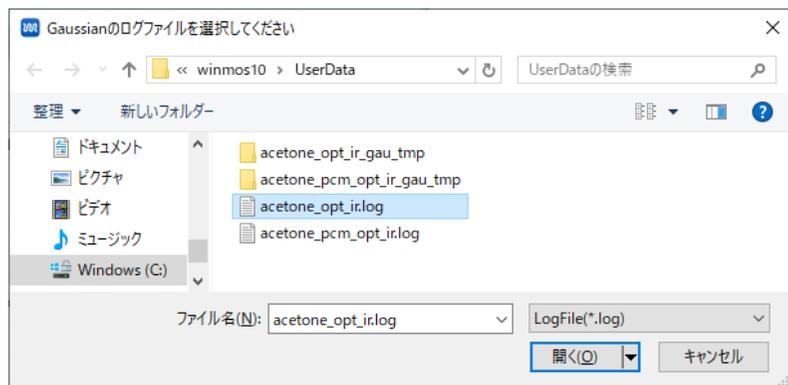
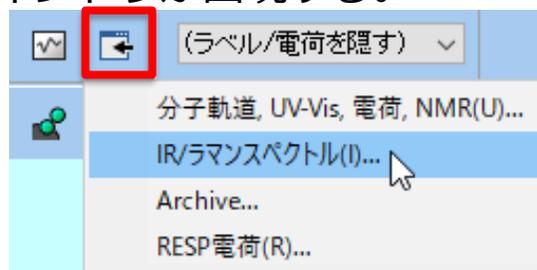
III. 構造最適化+IR計算(水溶液中)

1. キーワード設定ボタンを押す。
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ウィンドウのSolventでscrf=(pcm,solvent=water)、MethodでIR/Ramanを選択し、OKボタンをクリックする。まず水溶液中で構造最適化を行って、その構造で水溶液中のIR/Raman計算を行う内容となる。
4. Gaussian SetupウィンドウでRunボタンをクリックする。
5. 続いて開く保存ダイアログでファイル名を入力し（仮にファイル名は「acetone_pcm_opt_ir」とする）、保存ボタンを押して計算を実行する。



IV. 結果の比較

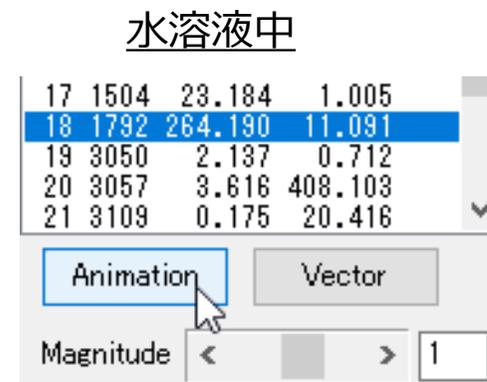
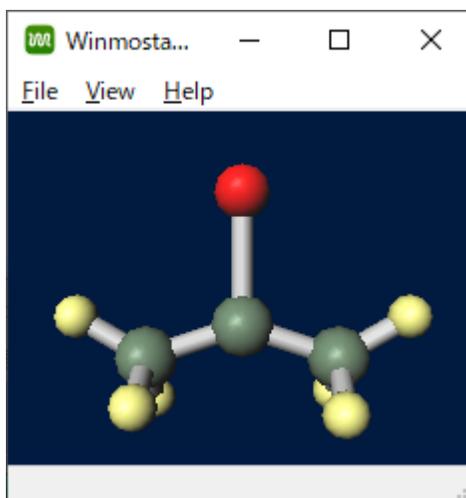
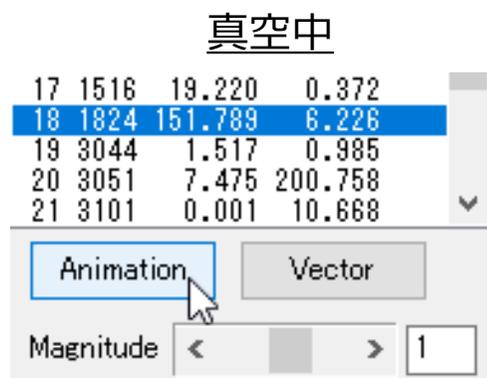
1. Winmostarをもう一つ起動する。
2. 片方のWinmostarで**結果解析のIR/ラマンスペクトル**をクリックし、ダイアログにて「acetone_opt_ir.out」を選択すると、真空中での**IR Spectrum**ウィンドウが出現する。
3. もう片方のWinmostarでも**結果解析のIR/ラマンスペクトル**をクリックし、ダイアログにて「acetone_pcm_opt_ir.out」を選択すると、PCM法による水溶液中での**IR Spectrum**ウィンドウが出現する。



IV. 結果の比較

C=O伸縮振動を確認する。

1. 真空中での**IR Spectrum**ウィンドウでは、18番目 1824cm^{-1} をクリックして、**Animation**ボタンをクリックする。
2. PCM法による水溶液中での**IR Spectrum**ウィンドウでは、18番目 1792cm^{-1} をクリックして、**Animation**ボタンをクリックする。
3. 新たに表れたViewer双方で、選択したモードが親水基のC=O部分の伸縮振動であり、真空中と水溶液中で 32cm^{-1} の差があることを確認する。



IV. 結果の比較

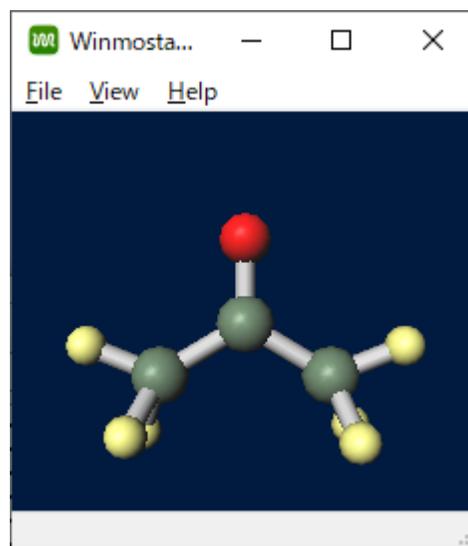
C-H変角振動を確認する。

1. 真空中での**IR Spectrum**ウィンドウでは、12番目 1411cm^{-1} もしくは13番目 1413cm^{-1} をクリックして、**Animation**ボタンをクリックする。
2. PCM法による水溶液中での**IR Spectrum**ウィンドウでは、12番目 1407cm^{-1} もしくは13番目 1411cm^{-1} をクリックして、**Animation**ボタンをクリックする。
3. 新たに表れたViewer双方で、選択したモードが疎水基のC-H部分の変角振動であり、C=O伸縮振動とは異なり真空中と水溶液中で 5cm^{-1} 以下の差しかないことを確認する。

真空中

11	1245	78.945	0.384
12	1411	14.899	3.463
13	1413	52.951	5.779
14	1491	0.277	1.627
15	1495	0.000	31.996
16	1499	23.329	31.639
17	1516	19.220	0.372
18	1824	151.789	6.226
19	3044	1.517	0.985
20	3051	7.475	200.758
21	3101	0.001	10.668

Animation Vector
Magnitude < > 1



水溶液中

11	1247	105.927	0.612
12	1407	29.662	9.982
13	1411	78.966	11.829
14	1481	0.862	3.043
15	1481	2.896	57.812
16	1485	41.759	61.240
17	1504	23.184	1.005
18	1792	264.190	11.091
19	3050	2.137	0.712
20	3057	3.616	408.103
21	3109	0.175	20.416

Animation Vector
Magnitude < > 1

補足 リストにない溶媒の指定方法

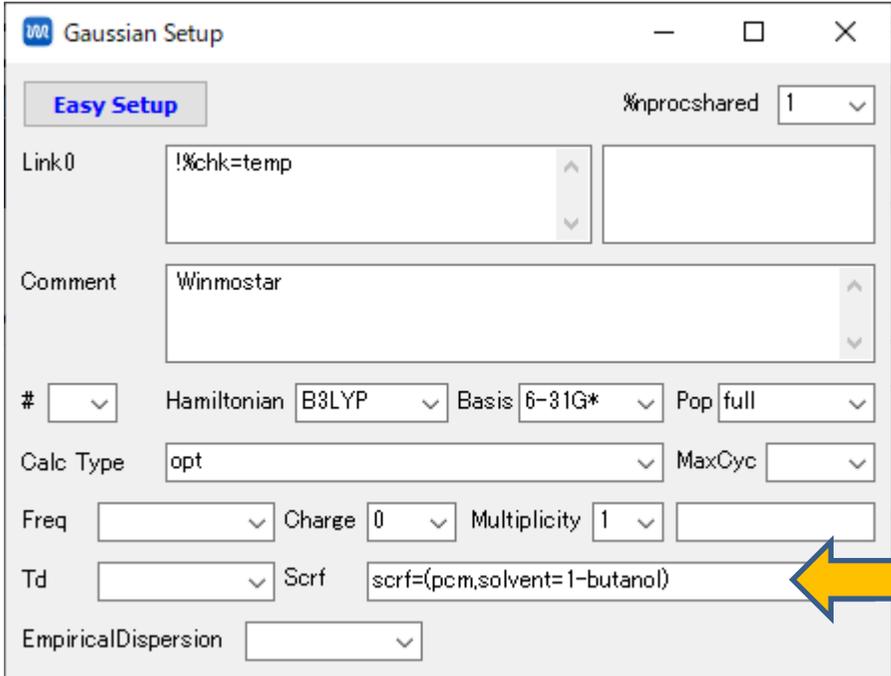
Gaussian Setupウィンドウの**Scrf**欄に、Scrf=(pcm,solvent=溶媒名) を追記する。

例：1-butanolの場合

Scrf=(pcm,solvent=1-butanol)

を追記する。

<https://gaussian.com/scrf/>のMoreをクリックしSolventsを選択すると、Gaussian16で使える溶媒名一覧が表示される。

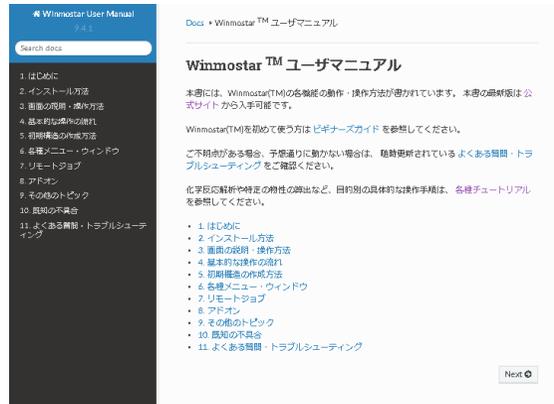


The screenshot shows the Gaussian Setup window with the following settings:

- Easy Setup: %nprocshared 1
- Link0: !%chk=temp
- Comment: Winmostar
- #: [dropdown]
- Hamiltonian: B3LYP
- Basis: 6-31G*
- Pop: full
- Calc Type: opt
- MaxCyc: [dropdown]
- Freq: [dropdown]
- Charge: 0
- Multiplicity: 1
- Td: [dropdown]
- Scrf: scrf=(pcm,solvent=1-butanol) (highlighted with a yellow arrow)
- EmpiricalDispersion: [dropdown]

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