

 winmostar チュートリアル

Gaussian

元素ごとの基底関数・ECP設定

V10.6.3

2021年10月11日 株式会社クロスアビリティ

本書について

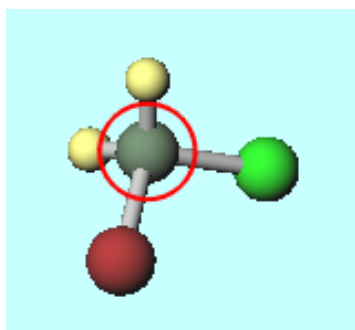
- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - [個別講習会](#)：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

ブロモクロロメタン(CH₂BrCl)の元素ごとの基底関数の設定、基底関数及びECPの設定をします。

基底関数のみの設定 C,Cl,Br: 6-31G*、H: STO-3G

基底関数及びECPの設定 C,H: 6-31G*、Cl,Br: LANL2DZ(基底関数、ECP共に)



基底関数のみ

```
C Cl Br
6-31G*
****
H
STO-3G
****
```

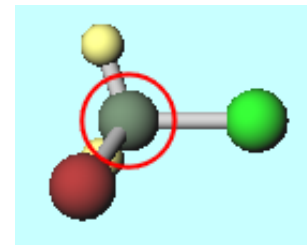
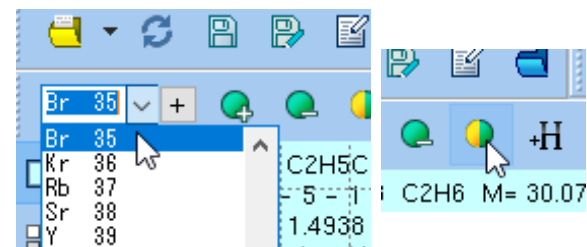
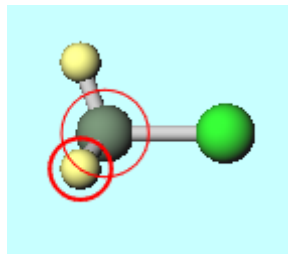
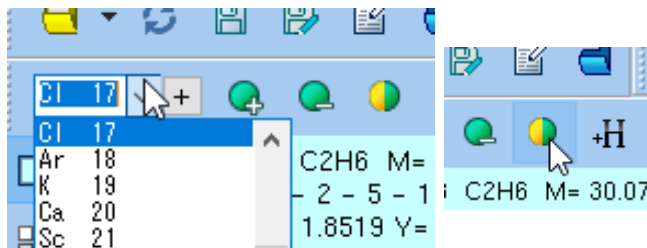
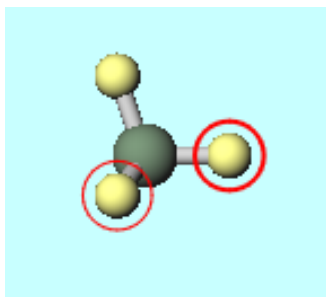
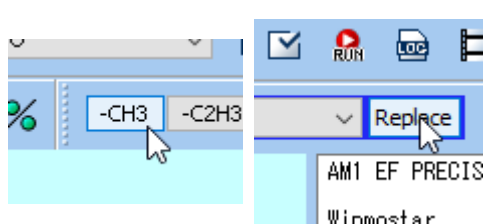
基底関数及びECP

```
C H
6-31G*
****
Cl Br
LANL2DZ
****

Cl Br
LANL2DZ
```

I. ブロモクロロメタ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回クリックして、メタンを作成する。
2. 水素原子が太い赤丸で選択された状態で、メインウィンドウ上部の**編集操作向けの元素を選択**メニューから **Cl 17**を選択し、**元素を変更**ボタンをクリックして、クロロメタンを作成する。
3. 水素原子が太い赤丸で選択された状態で、メインウィンドウ上部の**編集操作向けの元素を選択**メニューから **Br 35**を選択し、**元素を変更**ボタンをクリックして、ブロモクロロメタンを作成する。

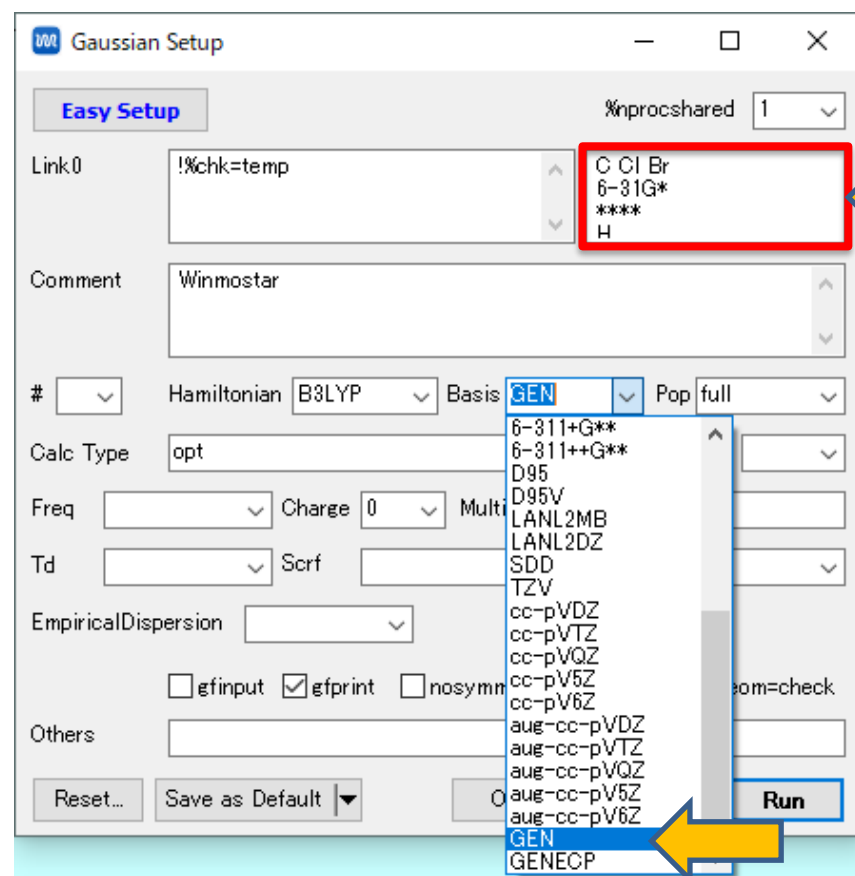
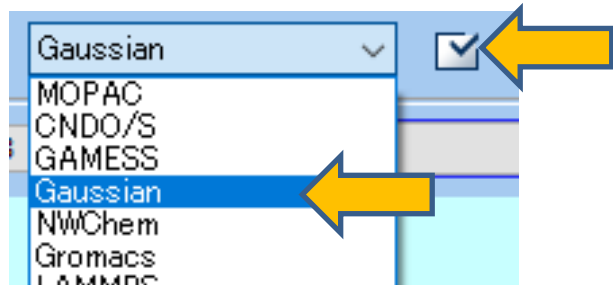


II. 計算条件設定(基底関数のみ)


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、**Basis**を**GEN**に変更する。
3. **Gaussian Setup**ウィンドウのLink0欄の右の空欄(右下図の赤枠)に、次のように記入する。

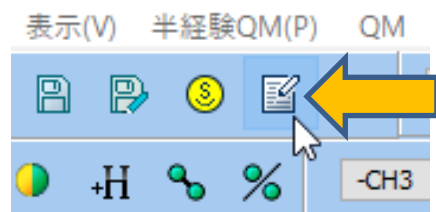
```
C Cl Br
6-31G*
****
H
STO-3G
****
```

同じ基底関数の元素はまとめて書ける。
基底関数ごとの区切りには****を書く。
大文字小文字の区別はない。



II. 計算条件設定(基底関数のみ)

1. Gaussian SetupウィンドウでRunボタンをクリックして、計算を実行する。
2. 入力ファイルの内容を確認するには、テキストエディタで開くボタン  をクリックする。
3. 入力ファイルの計算方法を指定している行のb3lyp/の後にGEN、原子座標の後に1行空けて、前ページの基底関数の内容が書かれているか確認する。



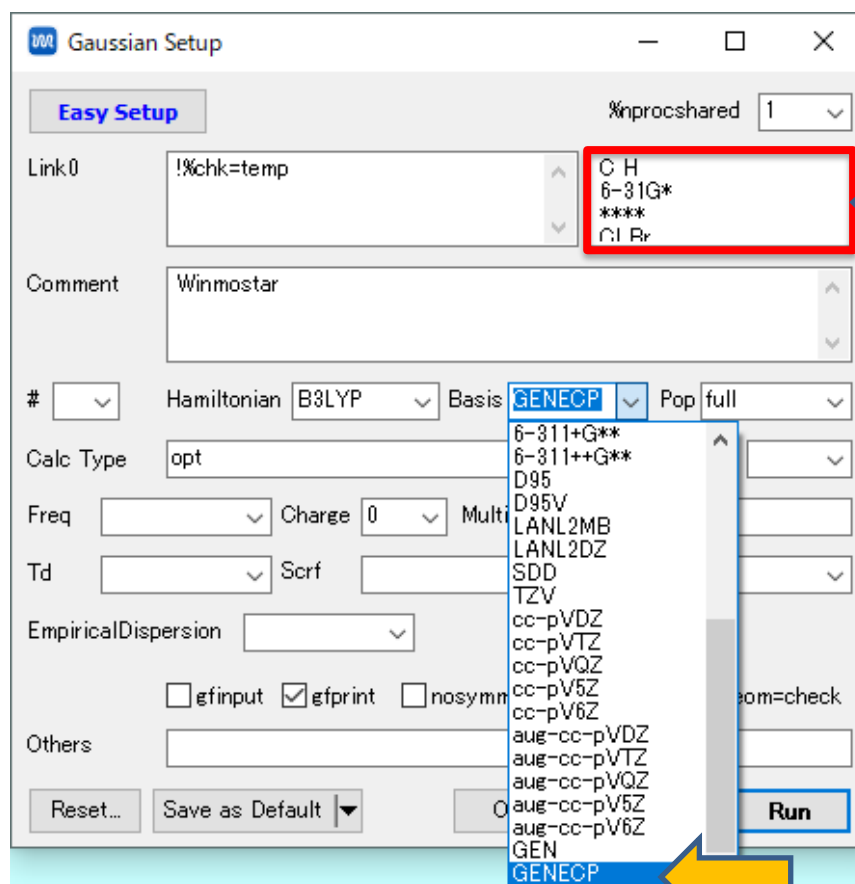
```
%nprocshared=1↓
!%chk=temp↓
# b3lyp/GEN opt pop=full gfprint↓
↓
Winmostar↓
↓
0 1 ↓
C 0.00000000000 0.00000000000 0.00000000000
Cl 1.76000000000 0.00000000000 0.00000000000
H -0.35812496990 1.04007043316 0.00000000000
H -0.35812496990 -0.52003521658 -0.90072741684
Br -0.62509085656 -0.90769783258 1.57217876394
↓
C Cl Br↓
6-31G*↓
****↓
H↓
STO-3G↓
****↓
↓
```

III. 計算条件設定(基底関数及びECP)


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、**Basis**を**GENECP**に変更もしくはは記入する。
3. **Gaussian Setup**ウィンドウのLink0欄の右の空欄(右下図の赤枠)に、次のように記入する。

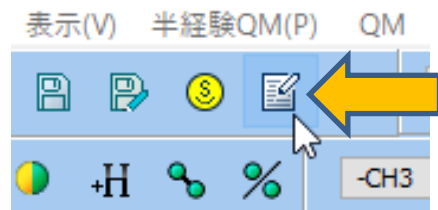
```
C H  
6-31G*  
****  
  
Cl Br  
LANL2DZ  
****  
  
Cl Br  
LANL2DZ
```

まず元素ごとの基底関数を書く。
1行空けて元素ごとのECPを書く。
同じECPの元素はまとめて書ける。
ECPには区切りの****は必要ない。
大文字小文字の区別はない。



III. 計算条件設定(基底関数及びECP)

1. Gaussian SetupウィンドウでRunボタンをクリックして、計算を実行する。
2. 入力ファイルの内容を確認するには、**テキストエディタで開くボタン**  をクリックする。
3. 入力ファイルの計算方法を指定している行のb3lyp/の後にGENECP、原子座標の後に1行空けて、前ページの基底関数及びECPの内容が書かれているか確認する。



```
%nprocshared=1↓
!%chk=temp↓
# b3lyp/GENECP opt pop=full gfprint↓
↓
Winmostar↓
↓
0 1 ↓
C 0.000000000000 0.000000000000 0.000000000000
Cl 1.760000000000 0.000000000000 0.000000000000
H -0.35812496990 1.04007043316 0.000000000000
H -0.35812496990 -0.52003521658 -0.90072741684
Br -0.62509085656 -0.90769783258 1.57217876394
↓
C H↓
6-31G*↓
****↓
Cl Br↓
LANL2DZ↓
****↓
↓
Cl Br↓
LANL2DZ↓
↓
```


補足 リストにない基底関数・ECP指定方法

Basis Set Exchangeウェブサイト(<https://www.basissetexchange.org/>)から、基底関数・ECPの数値を得ることができる。

C及びHの6-31++G**の場合：

1. 基底関数(6-31++G**)を選択
2. 元素(C,H)を選択
3. フォーマット(Gaussian)を選択
4. Get Basis Setをクリック

The screenshot shows the Basis Set Exchange website interface. On the left, a list of basis sets is displayed, with '6-31++G**' highlighted and a yellow arrow labeled '1' pointing to it. Below the list is a search bar and a 'Get References' button. On the right, a periodic table is shown with 'H' and 'C' highlighted and a yellow arrow labeled '2' pointing to them. A dropdown menu is open over the table, showing various basis set formats, with 'Gaussian' selected and a yellow arrow labeled '3' pointing to it. At the bottom right, a 'Get Basis Set' button is highlighted with a yellow arrow labeled '4'.

補足 リストにない基底関数・ECP指定方法

新たに表示されたウィンドウの基底関数の情報を**Gaussian Setup**ウィンドウに記入する。

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. **Gaussian Setup**ウィンドウで、**Basis**を**GEN**に変更する(ECPを含む場合は**GENECP**)。
3. **Gaussian Setup**ウィンドウのLink0欄の右の空欄(右下図の赤枠)に基底関数のデータ(H 0以下の行)を貼り付ける。

The image shows two windows. On the left is a browser window displaying a website with a table of basis function data. On the right is the Gaussian Setup window. A red dashed box highlights the data table in the browser. A yellow arrow points from this box to a red-bordered empty input field in the Gaussian Setup window's Link0 section. Another yellow arrow points from the Basis dropdown menu (set to GEN) to the same input field.

H	S	C	SP	3P	SP	D
1	1.00					
0.1873212492+02	0.3346468434+01					
0.2825288340+01	0.23472685310+00					
0.64822183230+00	0.01375732610+00					
1	1.00					
0.14127771480+00	1.00000000					
1	1.00					
0.50000000000+01	0.10000000000+01					
1	1.00					
0.11000000000+01	1.00000000					

C	0					
1	1.00					
0.30475248880+04	0.18347371320+02					
0.45736652880+03	0.14807322810+01					
0.28784883580+03	0.6884282250+01					
0.29218535380+02	0.23218444520+00					
0.82866621980+01	0.46794538840+00					
0.31638264980+01	0.36232188530+00					
3P	1	1.00				
0.78682723580+01	0.11533241900+00	0.4899966550+01				
0.18832885880+01	0.16885415170+00	0.31842396180+00				
0.54424823880+00	0.11424564300+01	0.74438820000+00				
1	1.00					
0.10871447820+00	0.10000000000+01	0.18888888880+01				
1	1.00					
0.43000000000+01	0.10000000000+01	0.10000000000+01				
1	1.00					
0.00000000000+00	1.00000000					

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