winmostar チュートリアル

GAMESS/Gaussian/NWChem 基礎編

V10.5.3

2020年7月8日　　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

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。

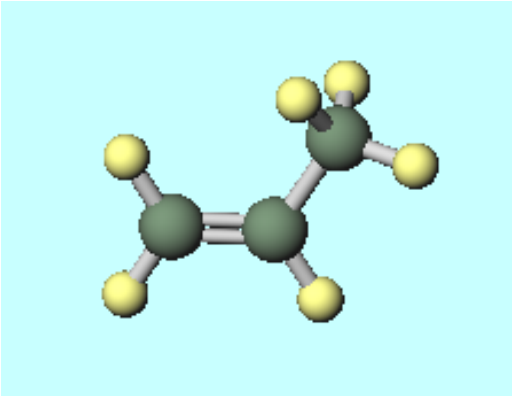
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

- 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

- プロピレン分子の量子化学計算をGAMESS、GaussianまたはNWChemを用いて実行します。まず構造最適化を実行し、最適化後の構造に対し、振動スペクトル（IR、ラマン）、NMRスペクトル、UV-Visスペクトルを計算します。また、分子軌道、静電ポテンシャルの表示も行います。



注意点：

- 本チュートリアルでの計算方法はB3LYP/6-31G*です。V10のデフォルトの計算方法は、V9までのHF/STO-3GからB3LYP/6-31G*に変わりました。
- GAMESSのNMRスペクトルのDFT計算は対応していないため、手順はここでは示しません。
- ESPの表示には時間が掛かるため、ここでは静電ポテンシャルとして、簡易的に得られる電荷解析(ラベル/電荷で指定していなければMulliken電荷)の結果を基にしたポテンシャル分布を表示します。

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

動作環境設定

- GAMESSの場合

  GAMESSインストールマニュアル

  https://winmostar.com/jp/manual_jp/installation/GAMESS_install_manual_jp_win.pdfに従い、GAMESSをインストールする。

- NWChemの場合

  NWChemのインストールマニュアルページ

  https://winmostar.com/jp/nwchem4wm_jp.htmlの内容に従い、NWChemをインストールする。

- Gaussianの場合

  ベンダーの提供する手順に従ってGaussianをインストールする。

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 分子を作成

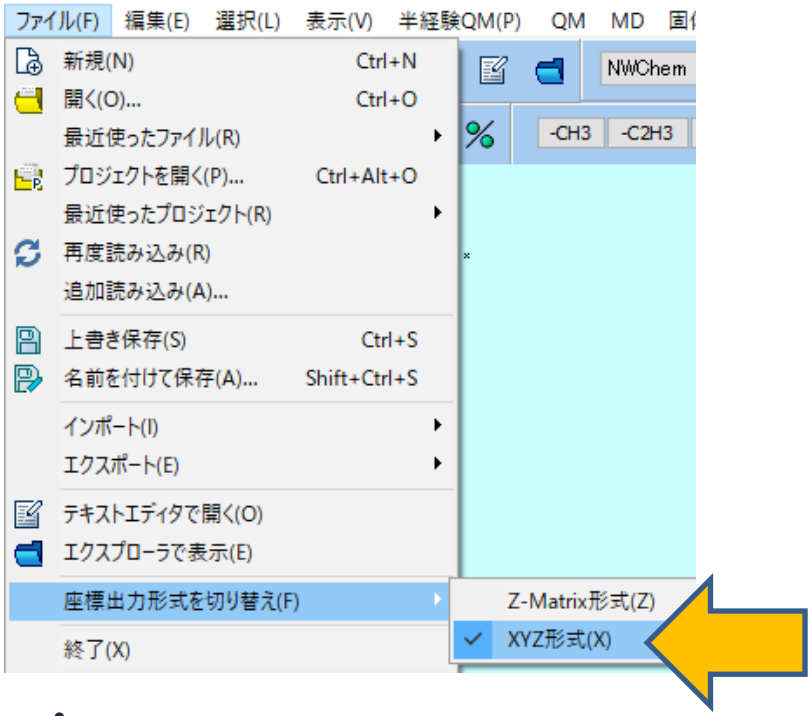
(NWChemのみ)

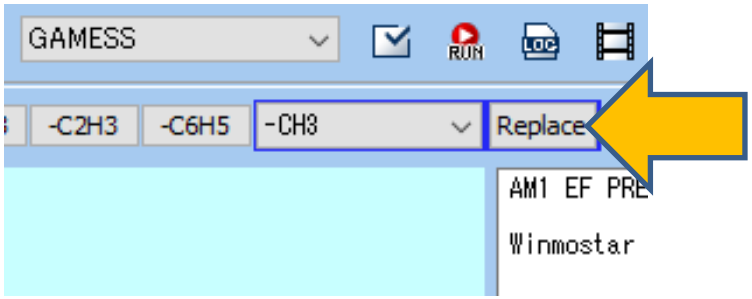
0. ファイル｜座標出力形式を切り替え｜XYZ形式を選択する。

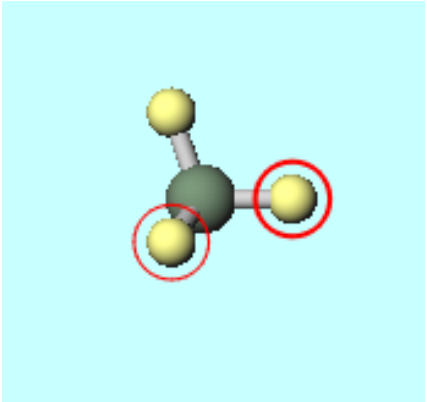
(GAMESS/Gaussian/NWChem共通)

1. ファイルメニュー｜新規をクリックする。

2. Replaceボタンをクリックすると、メタン分子が作成される。



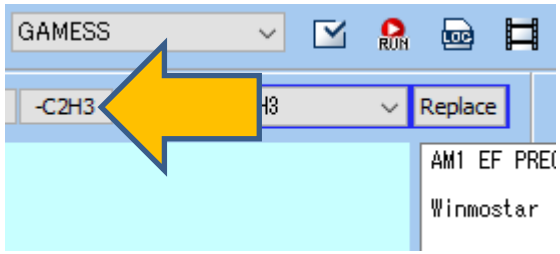


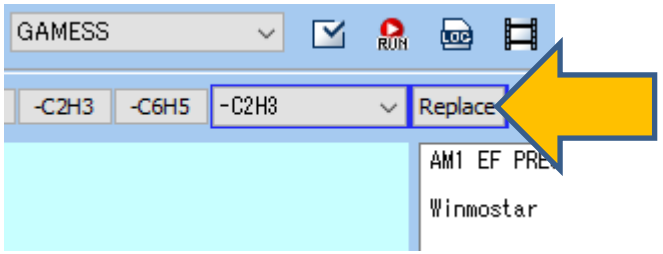


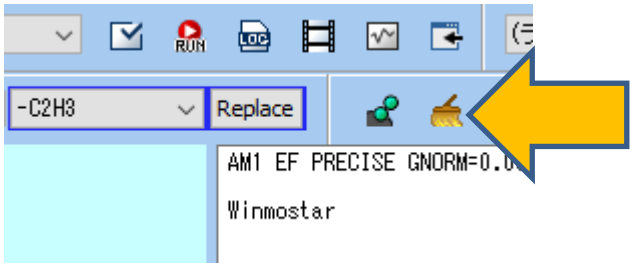
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

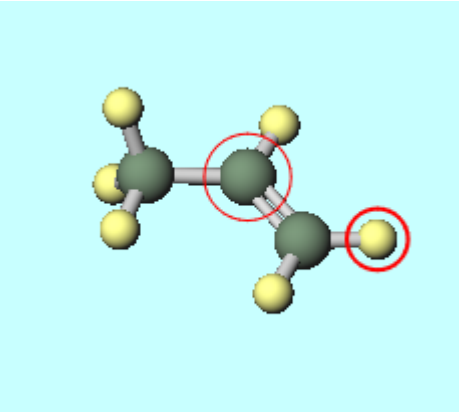
I. 分子を作成

1. ツールバーの**-C2H3**ボタンをクリックする。
2. 再度**Replace**ボタンをクリックするとプロピレン分子が作成される
3. (簡易構造最適化)ボタンをクリックして、力場パラメータを使った簡易的な構造最適化をする。





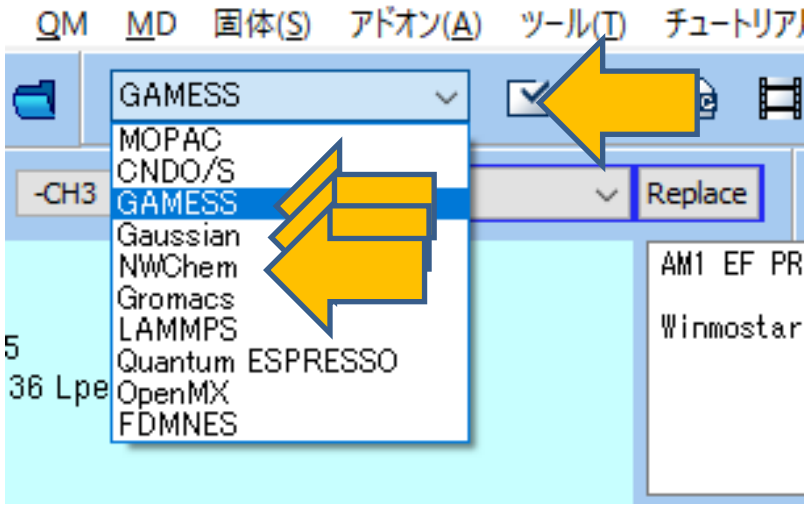




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 構造最適化計算

1. ソルバー一覧から**GAMESS**、**Gaussian**または**NWChem**のいずれかを選択する。
2. (キーワード設定) をクリックする。

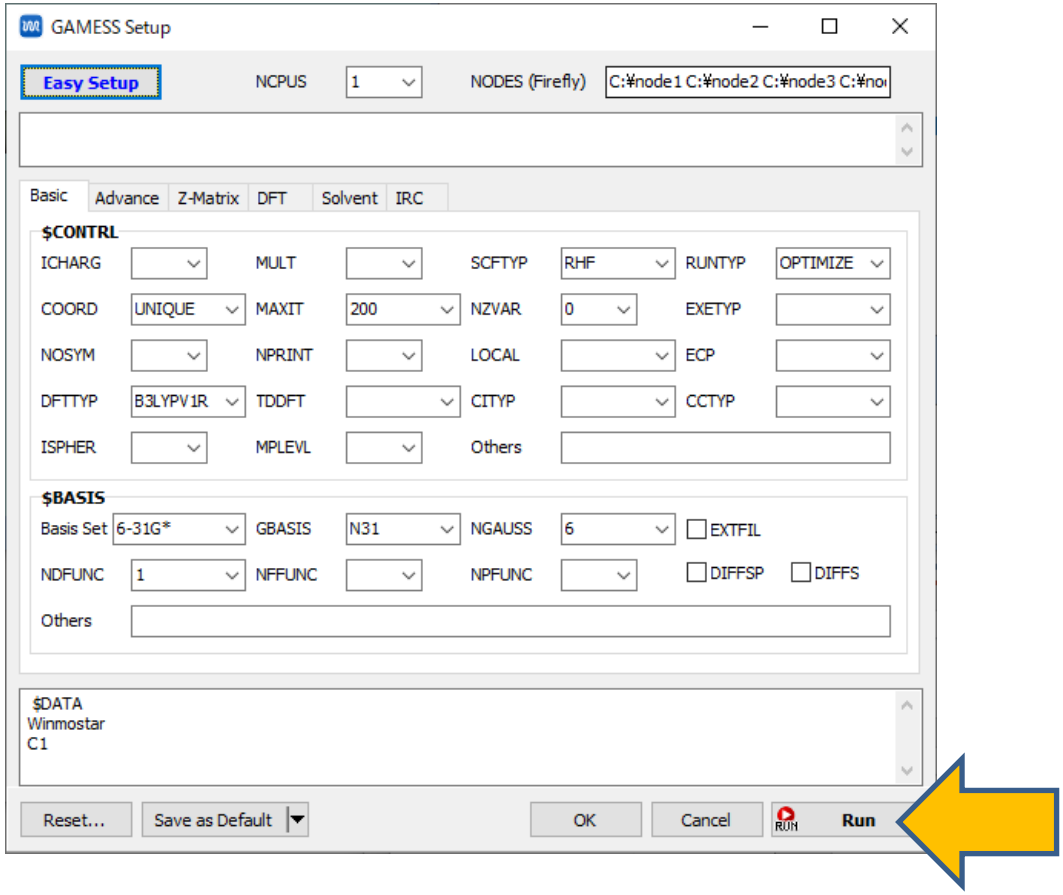


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 構造最適化計算

<u>ソルバー一覧で**GAMESS**を選択した場合</u>

1. **GAMESS　　Setup**ウインドウ下部の**Run**をクリックする（デフォルトの設定は、B3LYP/6-31G*の構造最適化計算）。

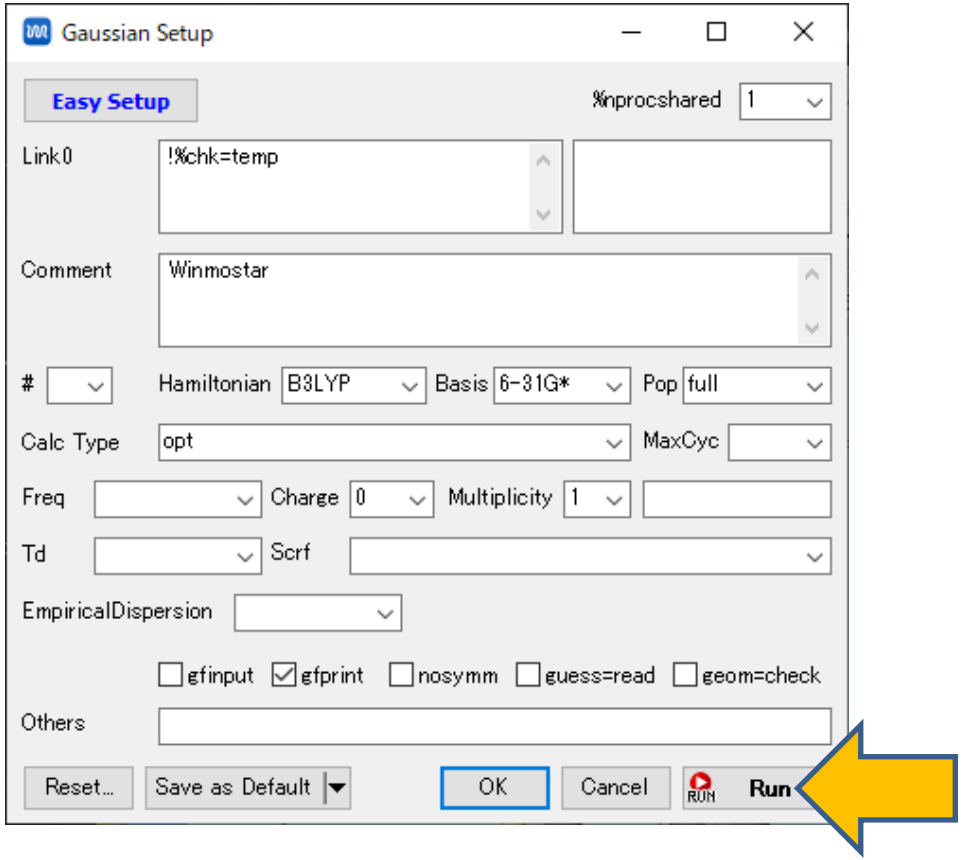


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 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**ウインドウ下部の**Run**をクリックする（デフォルトの設定は、B3LYP/6-31G*の構造最適化計算）。

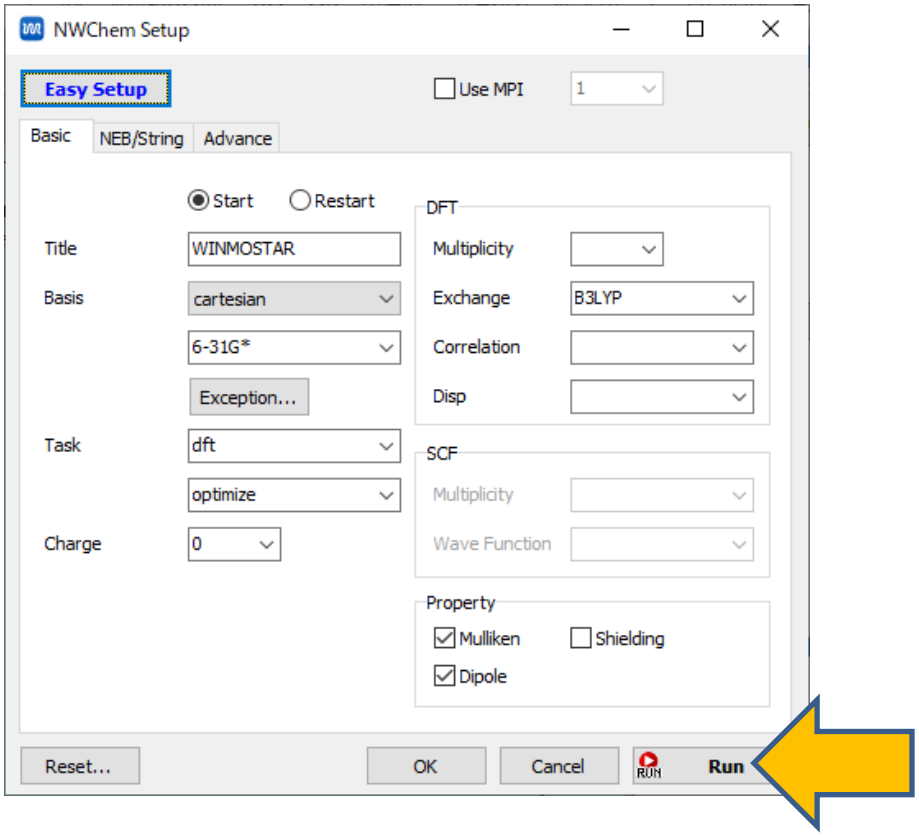


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 構造最適化計算

<u>ソルバー一覧で**NWChem**を選択した場合</u>

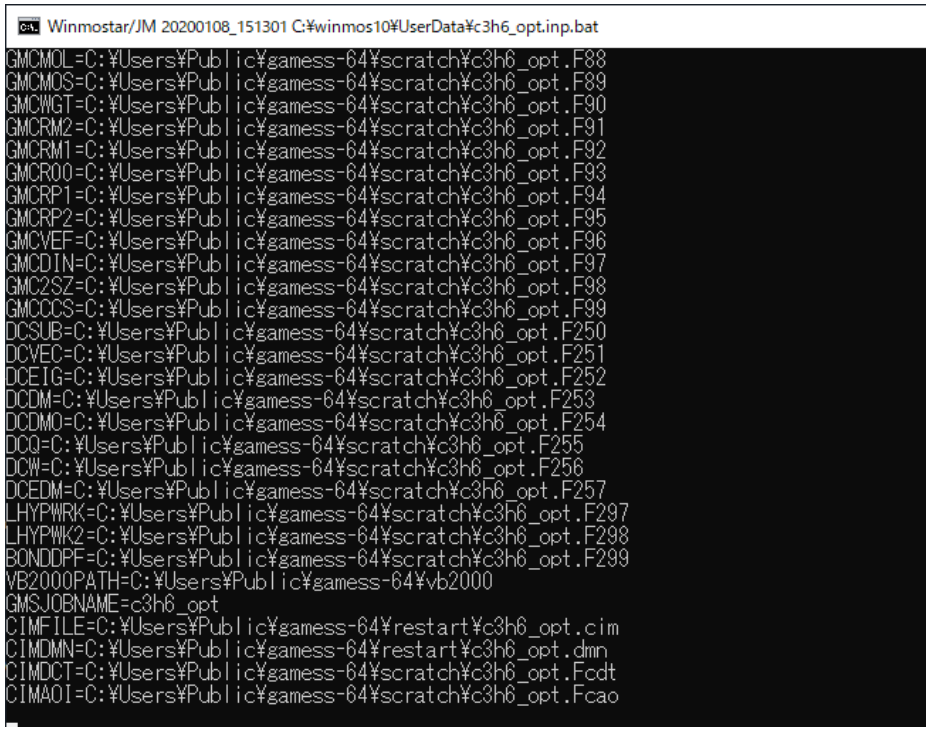
1. **NWChem　Setup**ウインドウ下部のRunをクリックする（デフォルトの設定は、B3LYP/6-31G*の構造最適化計算）。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 構造最適化計算

- ファイル保存ダイアログが開くので、ファイル名を入力する。（例えば「**c3h6_opt**」）
- **保存**をクリックすると、**Winmostar Job Manager**とコマンドプロンプトの黒いウインドウが起動して計算が開始される。
- 計算が終わると、黒いウインドウが自動的に閉じる。

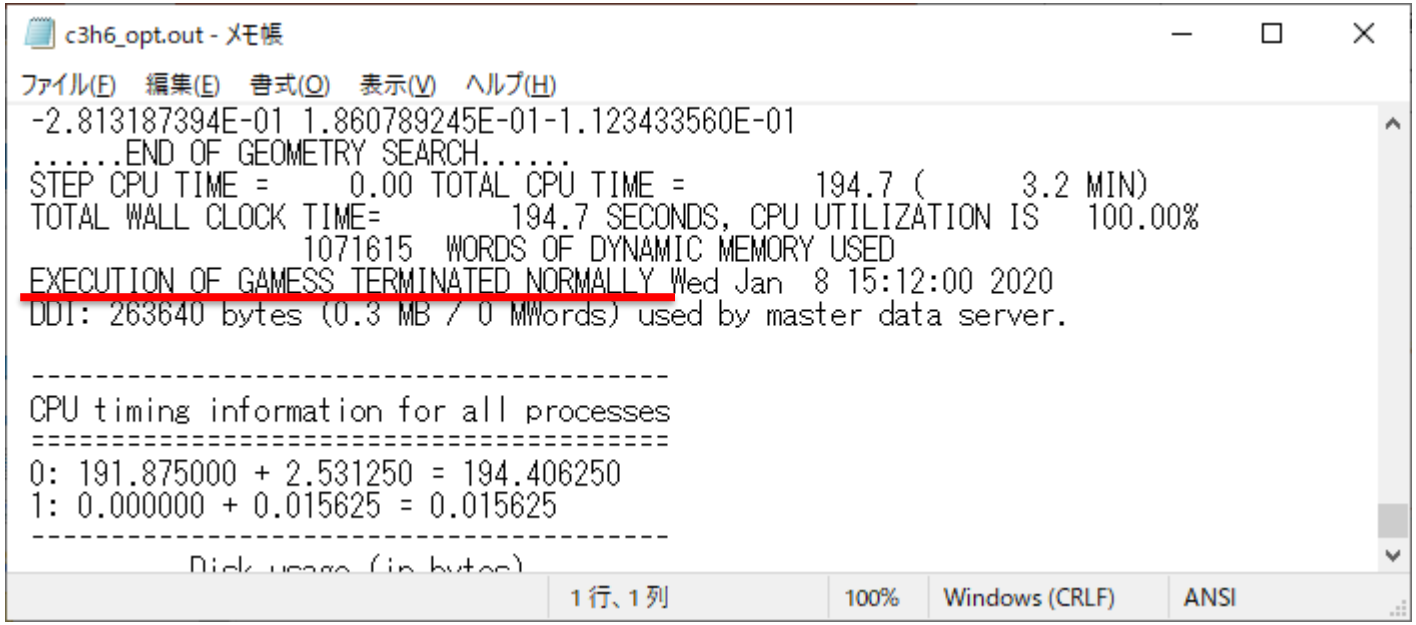


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 構造最適化計算

<u>ソルバー一覧で**GAMESS**を選択した場合</u>

1. 計算終了後、メインウインドウにて、 (**ログを表示**)をクリックする。
2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開く。
3. ログファイルが開くので、「**EXECUTION OF GAMESS TERMINATED NORMALLY...**」などの、計算が正常終了したことを示すメッセージを確認する。これは全ての計算の後に必ず行う。

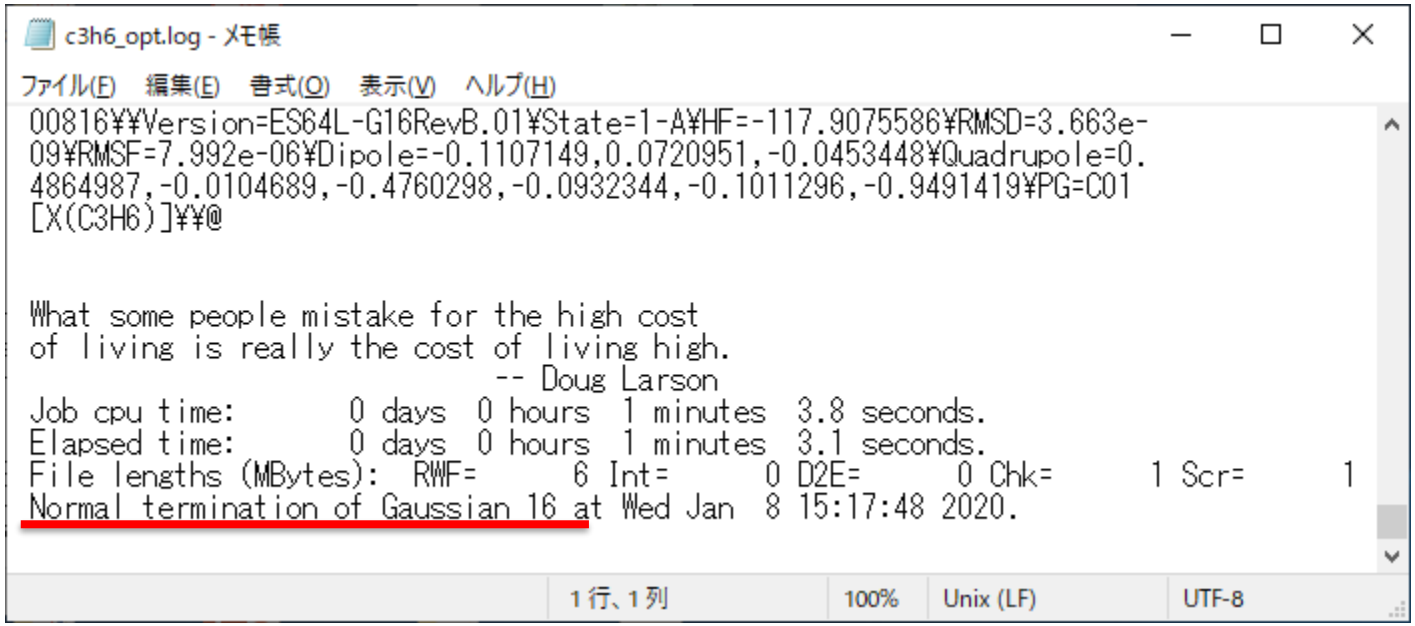


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 構造最適化計算

ソルバー一覧で**Gaussian**を選択した場合

1. 計算終了後、メインウインドウにて、 (**ログを表示**)をクリックする。
2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開く。
3. ログファイルが開くので、「**Normal termination of Gaussian 16...**」などの、計算が正常終了したことを示すメッセージを確認する。これは全ての計算の後に必ず行う。

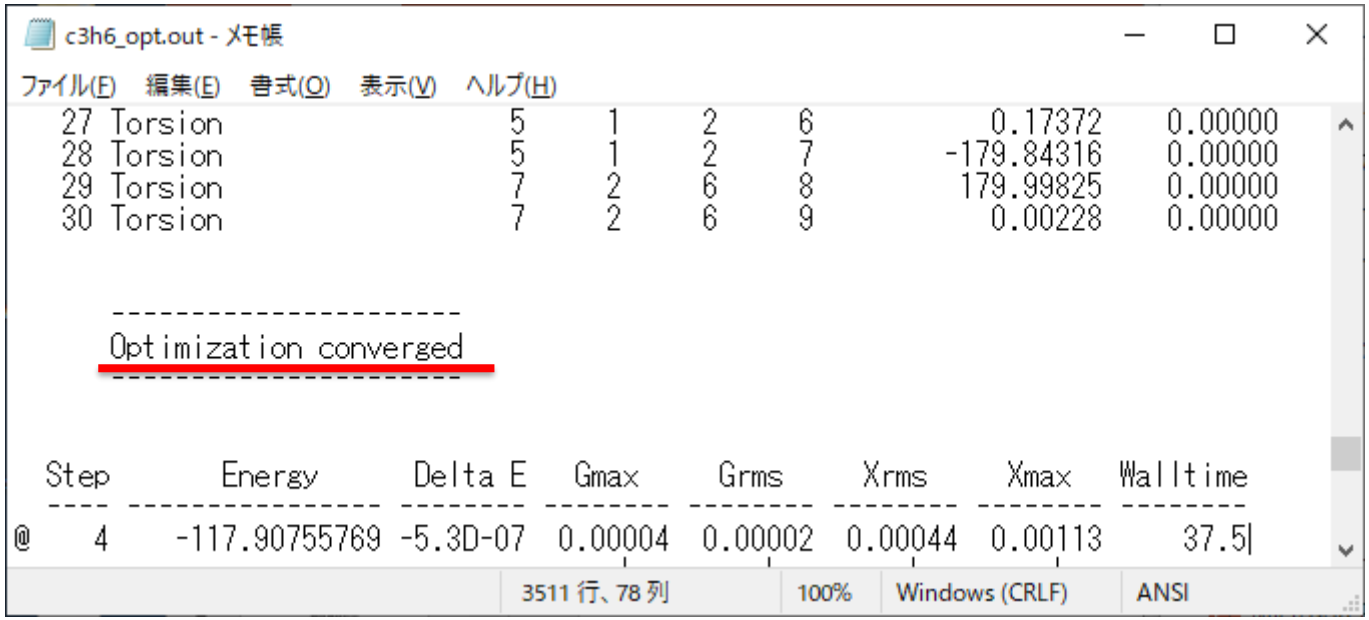


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 構造最適化計算

<u>ソルバ一覧で**NWChem**を選択した場合</u>

1. 計算終了後、メインウインドウにて、 (**ログを表示**)をクリックする。
2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開く。
3. ログファイルが開くので、「**Optimization　converged**」などの、計算が正常終了したことを示すメッセージがあることや、計算の異常終了を示すメッセージがないことを確認する。これは全ての計算の後に必ず行う。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 構造最適化計算

(GAMESS)

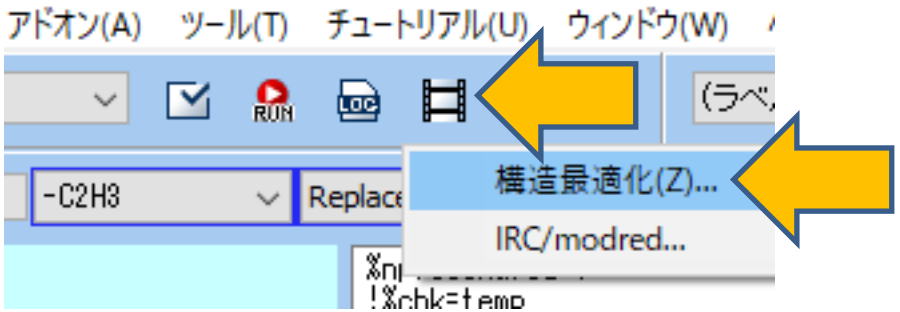
1. 計算終了後、メインウインドウ上部の (**アニメーション**) をクリックする。

(Gaussian、NWChem)

1. 計算終了後、メインウインドウ上部の (**アニメーション**) の**構造最適化**をクリックする。
2. 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。

(GAMESS)

(Gaussian、NWChem)

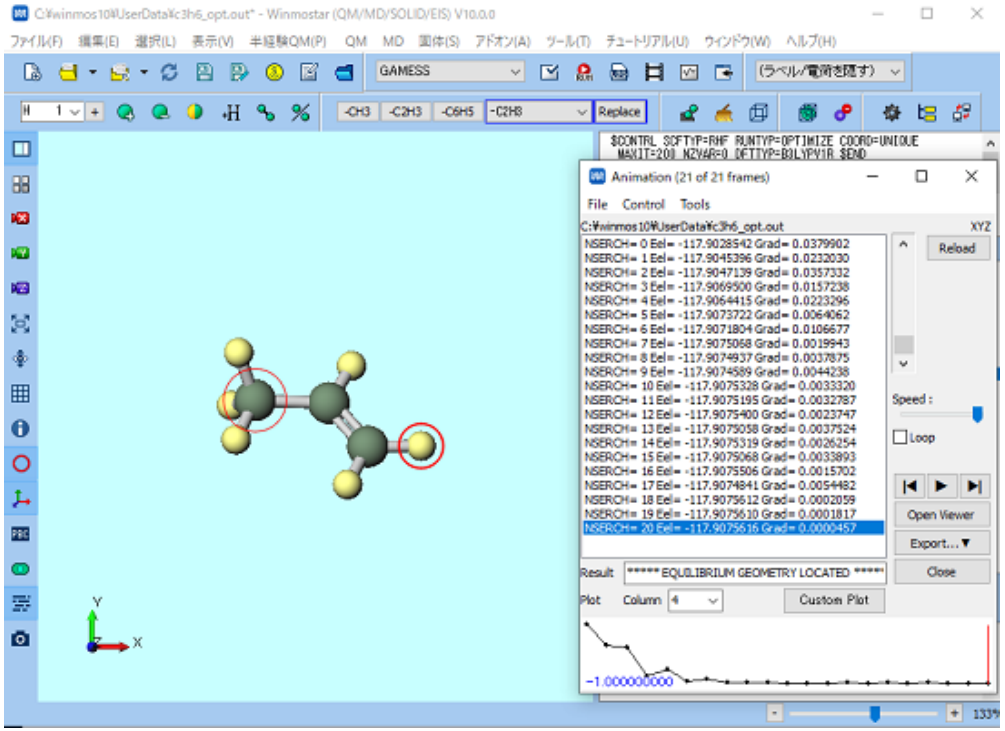


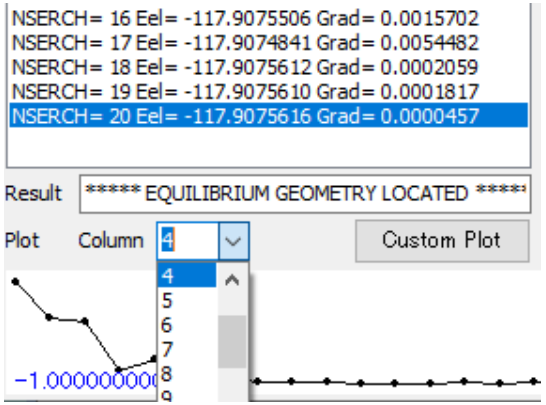
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 構造最適化計算

1. **Animation**ウインドウ右下の ▶ をクリックすると、構造最適化のアニメーションが再生される（デフォルトでは一瞬で再生が終わる）。
2. ここでは最後に、そのまま最終フレームの構造が選択・表示された状態で、**Animation**ウインドウを閉じる。

- **Animation**ウインドウの下部には、同ウインドウ中部の各ステップの数値データの内、**Column**で選んだ列のデータのグラフが表示される。



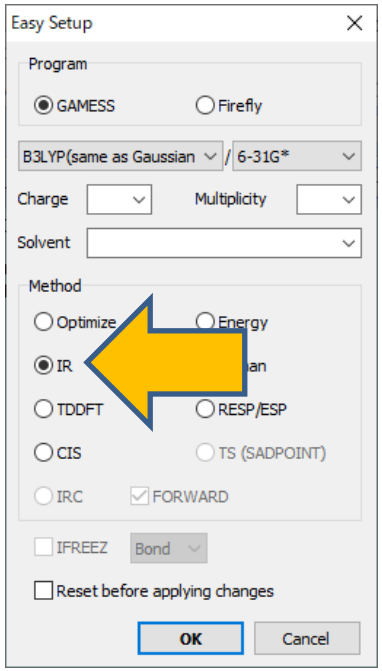


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

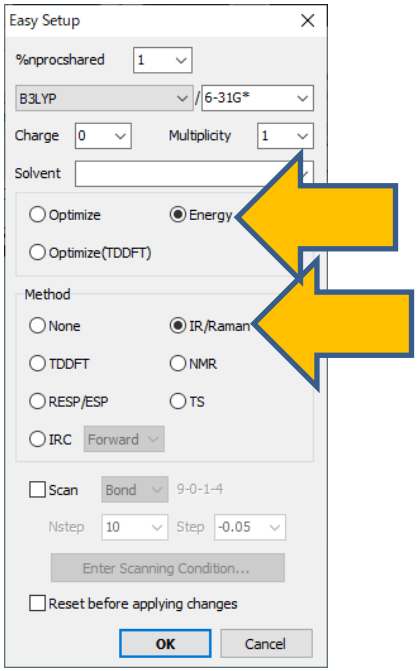
III.振動スペクトルの計算

1. 再びキーワード設定ウインドウの**EasySetup**を開く。
2. **GAMESS**の場合は、**IR**を選択し、**OK**の後**Run**をクリックする。
   Gaussianの場合は、**Energy**と**IR/Raman**を選択し、**OK**の後**Run**をクリックする。
   NWChemの場合は、**Energy**と**IR**を選択し、**OK**の後**Run**をクリックする。
3. 「**c3h6_ir**」など、構造最適化計算と異なるファイル名で保存し、計算を開始する。

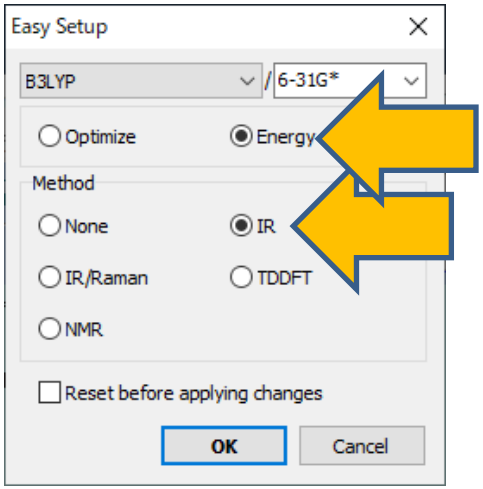
GAMESSの場合



Gaussianの場合



NWChemの場合

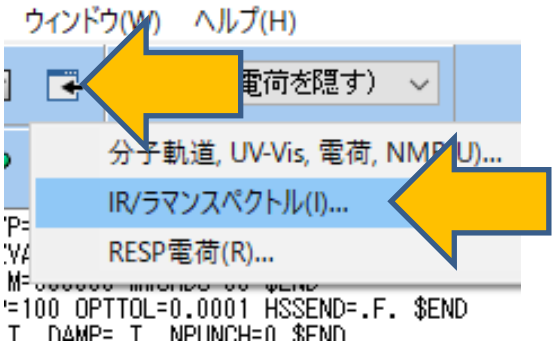


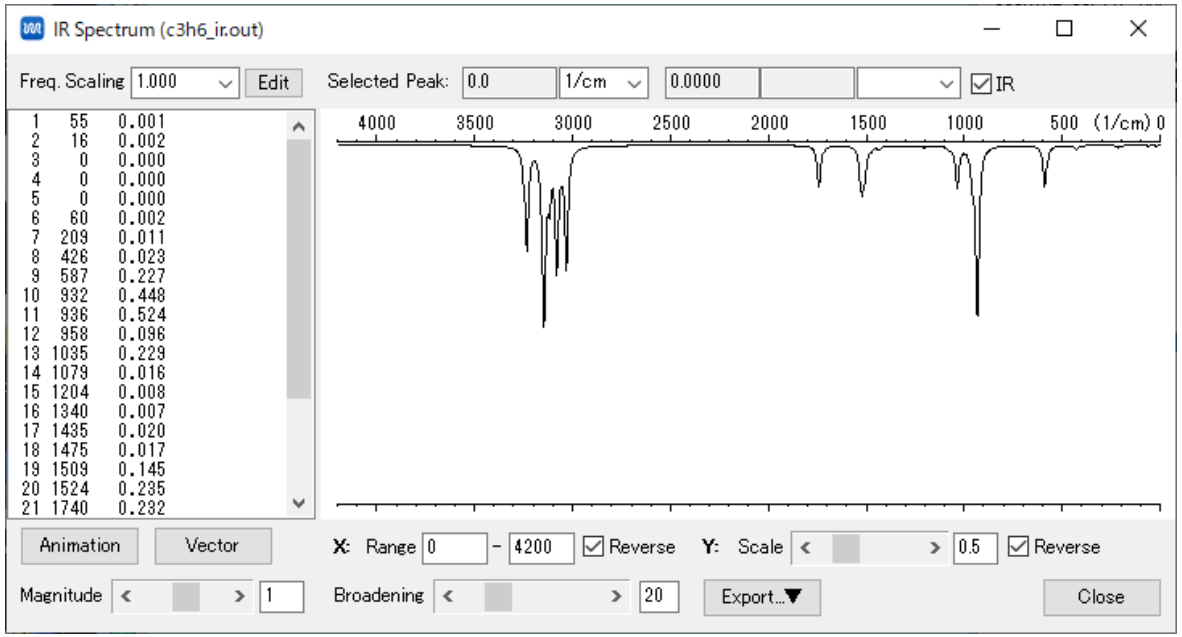
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.振動スペクトルの計算

1. 計算終了後、 (**結果解析**)の**IR/ラマンスペクトル**をクリックする。
2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを選択すると、**IR Spectrum**ウインドウが出現する。**Gaussian**の場合は青色のラマンスペクトルも描画される。

- 必要に応じて計算手法・基底関数ごとのスケーリング係数は**Freq Scaling**で選択する。

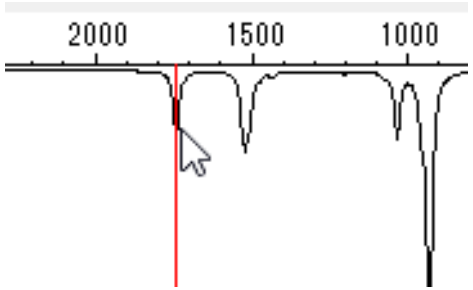


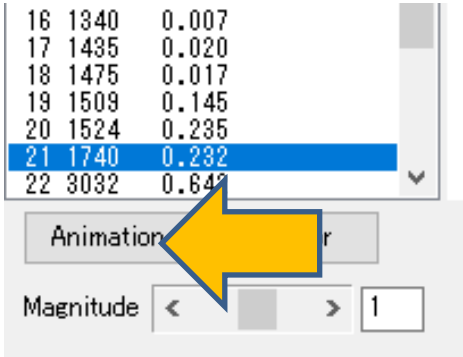


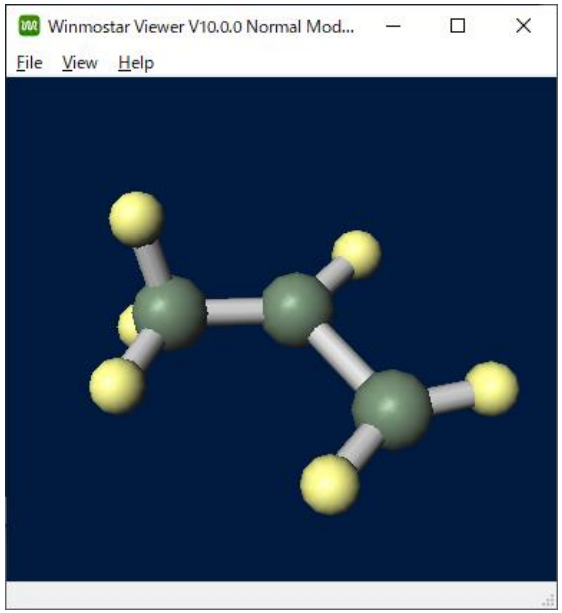
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.振動スペクトルの計算

1. **IR Spectrum**ウインドウ上で、1740 cm^{-1}付近をクリックすると、赤線でピークが選択される。
2. その後**Animation**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動し、1740 cm^{-1}のピークの振動方向に原子を動かしたアニメーションが出現する。







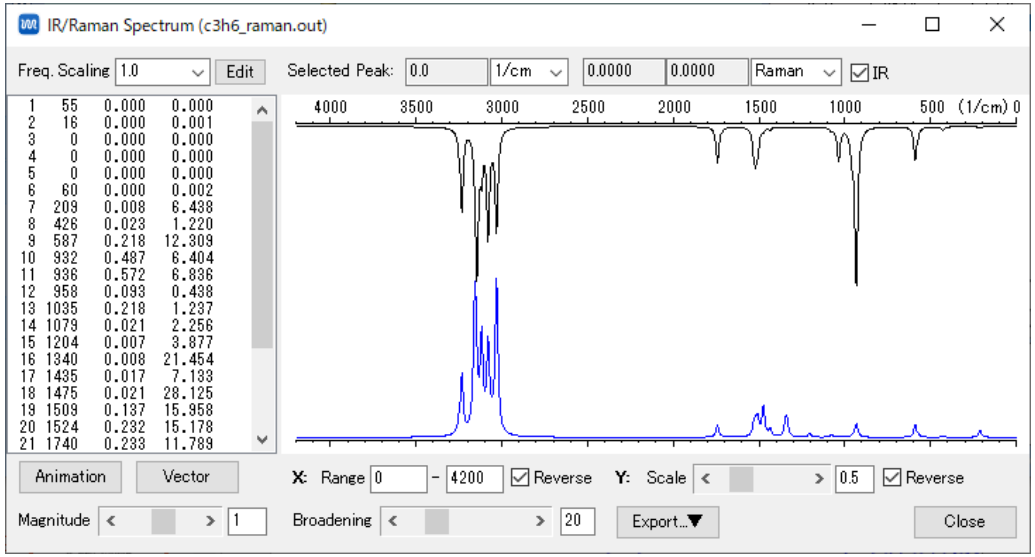
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.振動スペクトルの計算

<u>**GAMESS、NWChem**でラマンスペクトルも計算する場合</u>

1. キーワード設定ウインドウの**EasySetup**で**GAMESS**では**Raman**、**NWChem**では**IR/Raman**を選択し、**OK**の後**Run**をクリックすることで計算をする。
2. ファイル名は「**c3h6_raman**」など**IR**を選択した時と違うものとして保存する。
3. 計算終了後、 (**結果解析**)から**IR/ラマンスペクトル**をクリックする。
4. 再びデフォルトで選択されるファイルを開くと、**IR・ラマンスペクトル**両方が描画されたウインドウが出現する。

- NWChem6.6では、DFT法によるラマン計算は対応しておらず、HF法であれば実行可能。



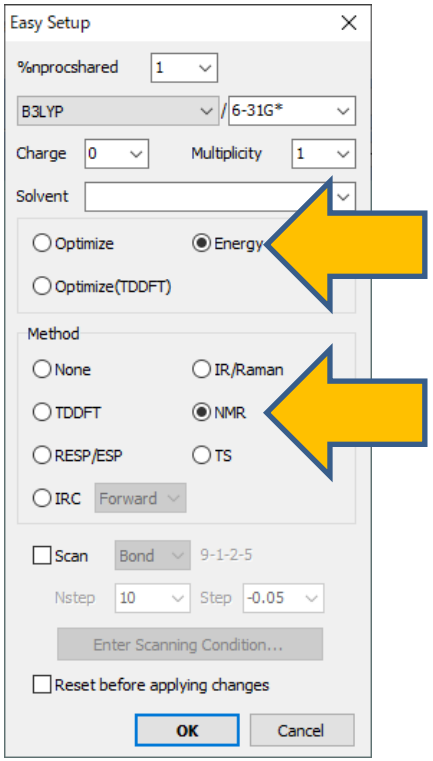
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV.NMRスペクトルの計算

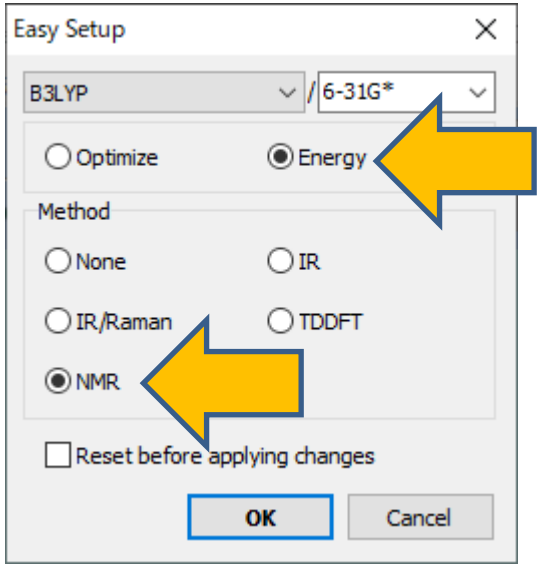
(**GAMESS**の場合は「V. UV-Visスペクトルの計算」に進む。)

1. **IR Spectrum**ウインドウを閉じる。
2. 再びキーワード設定の**EasySetup**を開き、 **Energy**と**NMR**を選択し、**OK**の後**Run**をクリックする。「**c3h6_nmr**」などとしてファイル名を入力し保存すると計算が開始される。

Gaussianの場合



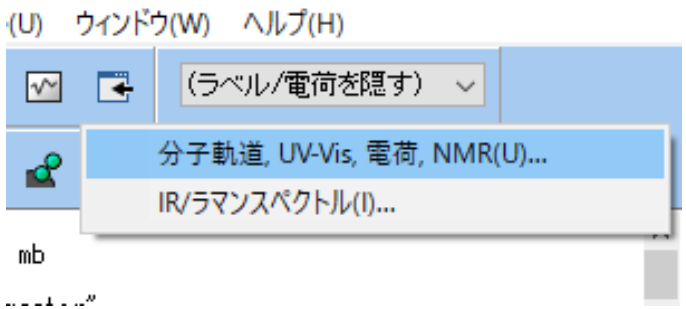
NWChemの場合

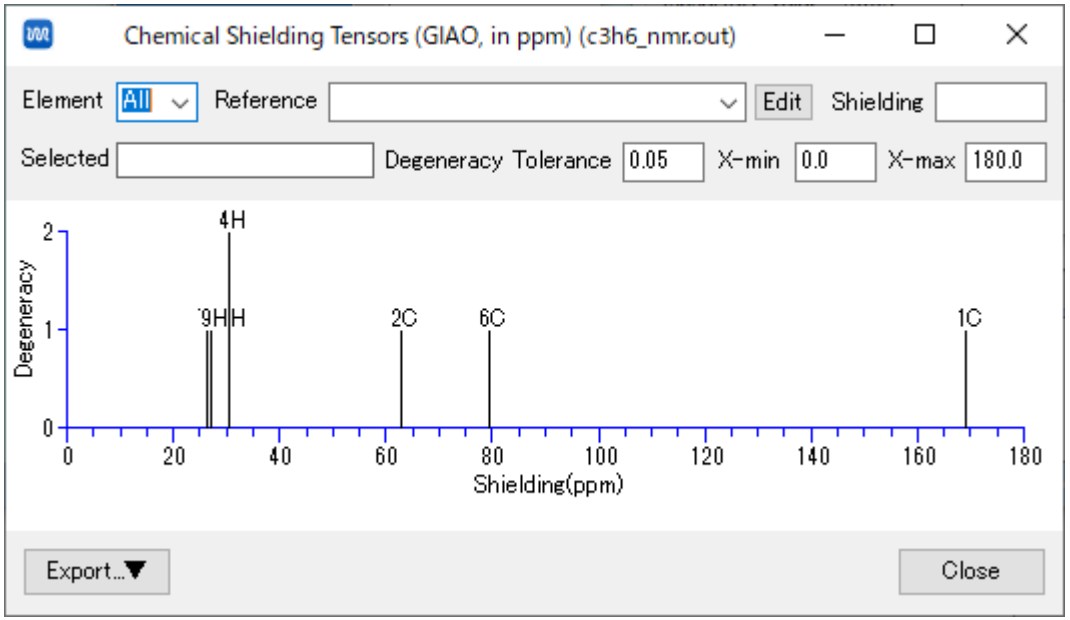


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV.NMRスペクトルの計算

1. 計算終了後、 (**結果解析**) から**分子軌道,UV-Vis,電荷,NMR…**を選択する。
2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開く。他のウインドウと一緒に**Chemical Shielding Tensors** ウインドウが開き、NMRスペクトルが描画される。この時点では全原子の磁気遮蔽定数が表示される。



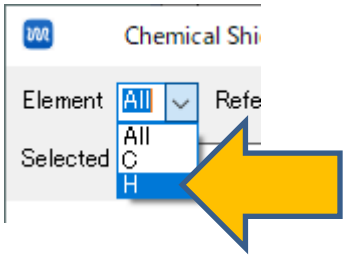


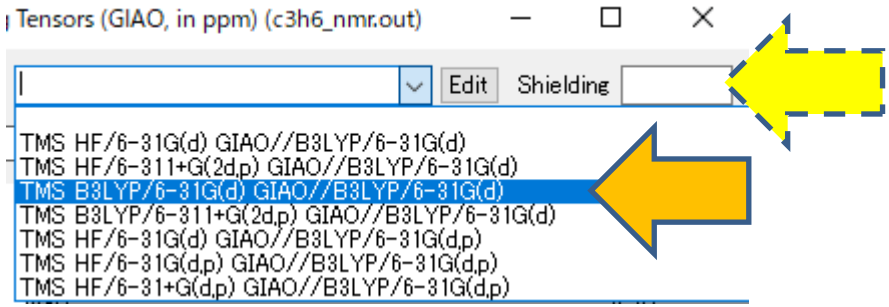
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

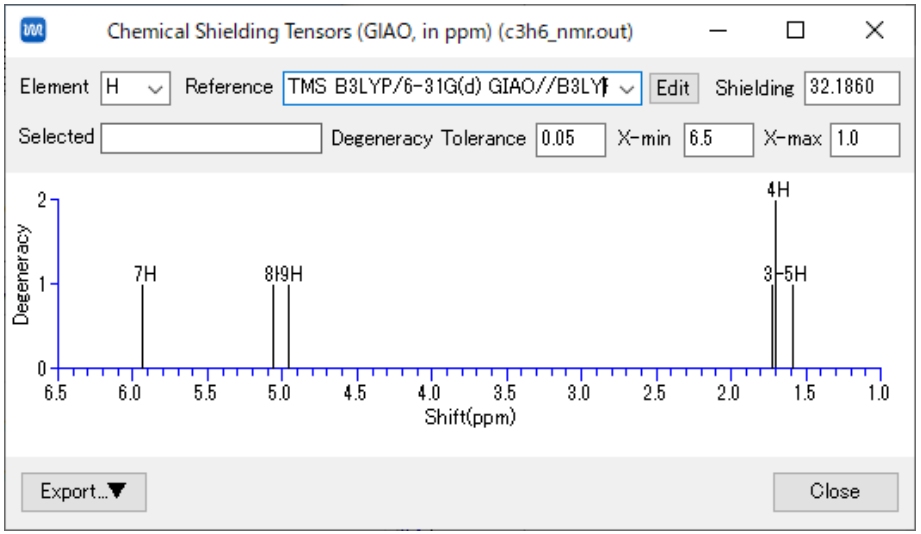
IV.NMRスペクトルの計算

1. NMR化学シフトを表示する場合は、**Element**で注目したい元素を選択する。
2. **Reference**で参照データを選択するか、**Shielding**に遮蔽定数を入力すると、横軸が変化し選択した元素の化学シフトが表示される。B3LYP/6-31G* で計算を行っている場合、**Reference**の**TMS B3LYP/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)**を選択する。
3. 確認後、同ウインドウと**MO Plot**ウインドウを閉じる。

- 参照データを追加する方法は、本チュートリアルの補足に示す。





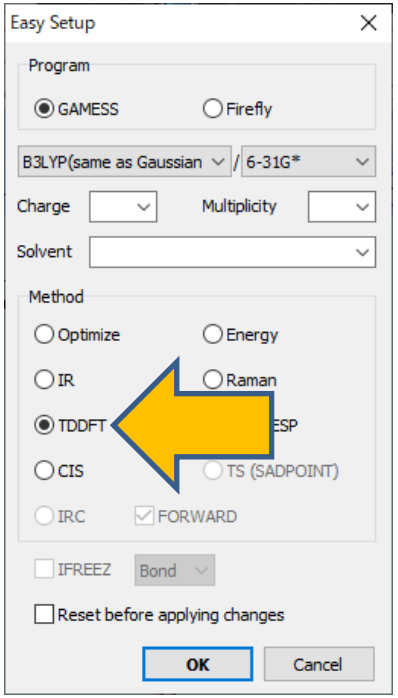


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

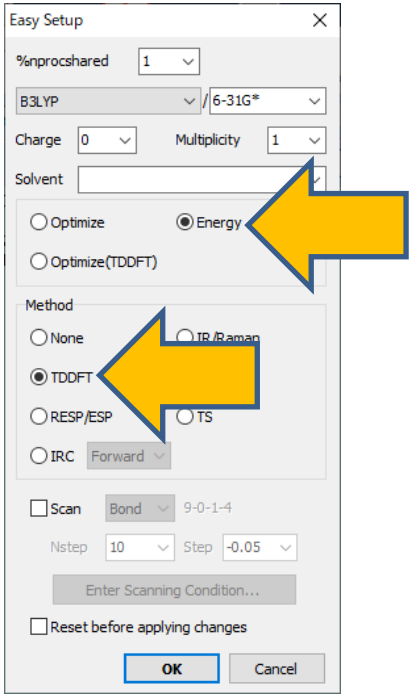
V. UV-Visスペクトルの計算

1. 再びキーワード設定の**EasySetup**を開く。
2. **GAMESS**の場合は**TDDFT**、
   Gaussian、**NWChem**の場合は**Energy**と**TDDFT**を選択する。
3. **OK**の後**Run**をクリックする。
4. ファイル名を「**c3h6_uvvis**」と指定し計算を開始する。

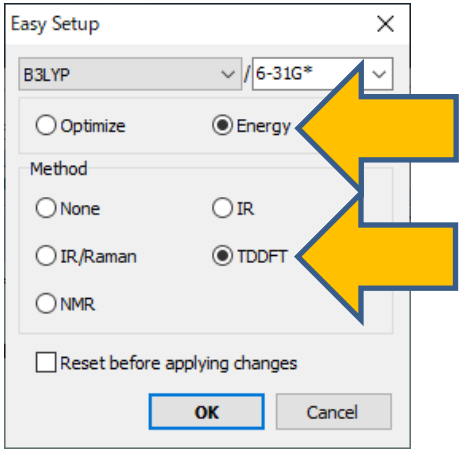
GAMESSの場合



Gaussianの場合



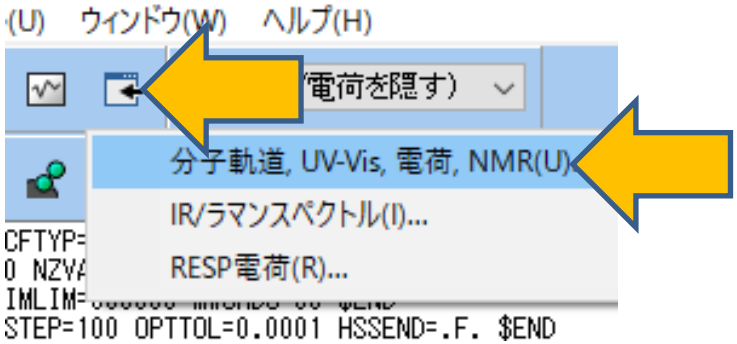
NWChemの場合

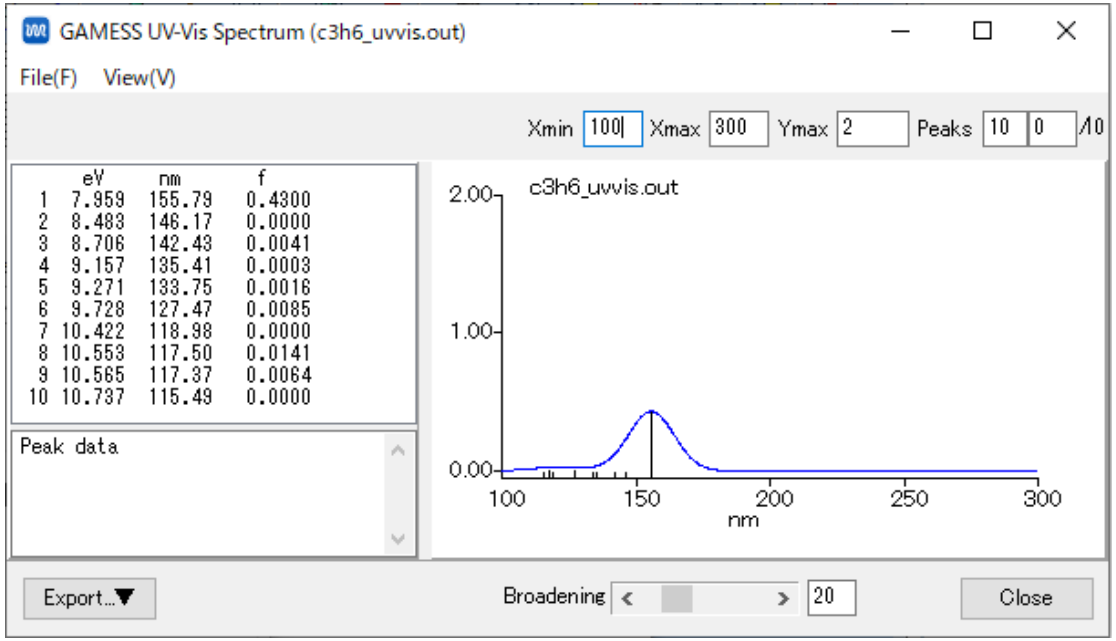


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

V. UV-Visスペクトルの計算

1. 計算終了後、 (**結果解析**) から**分子軌道,UV-Vis,電荷,NMR…**を選択する。
2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開く。他のウインドウと一緒に**UV-Vis Spectrum**ウインドウが開き、**UV-Visスペクトル**が描画される。左上欄には、それぞれのピークの吸収エネルギー(eV)、吸収波長(nm)、強度が表示される。

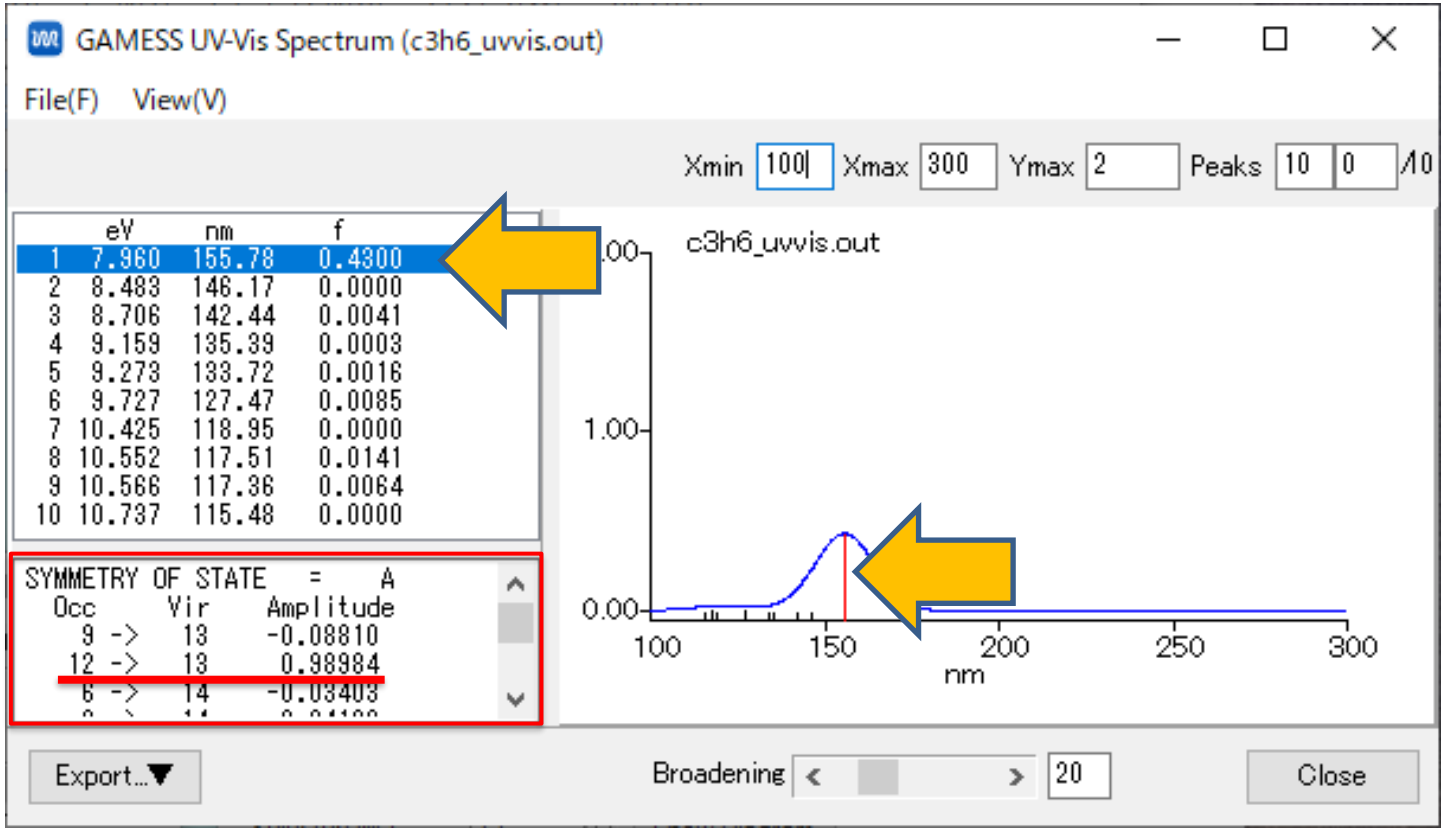




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

V. UV-Visスペクトルの計算

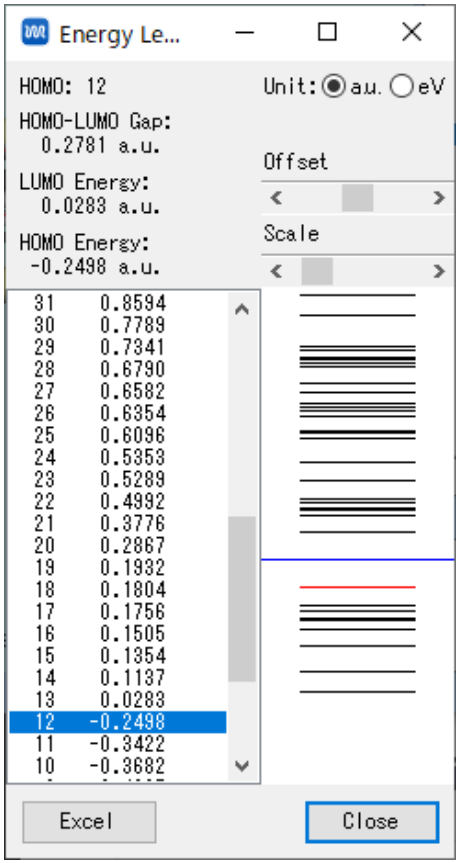
1. 右欄のスペクトルのピーク、もしくは左上欄のピークのリストをクリックすると、そのピークの励起の内容(励起元と励起先の軌道番号とその係数)が左下欄に表示される。係数の絶対値が大きいほど重要な励起配置となる。12、13番目の軌道はHOMOとLUMOであることから(分子軌道の表示は27-29ページ参照)、第1ピークはHOMOからLUMOへの励起であることがわかる。

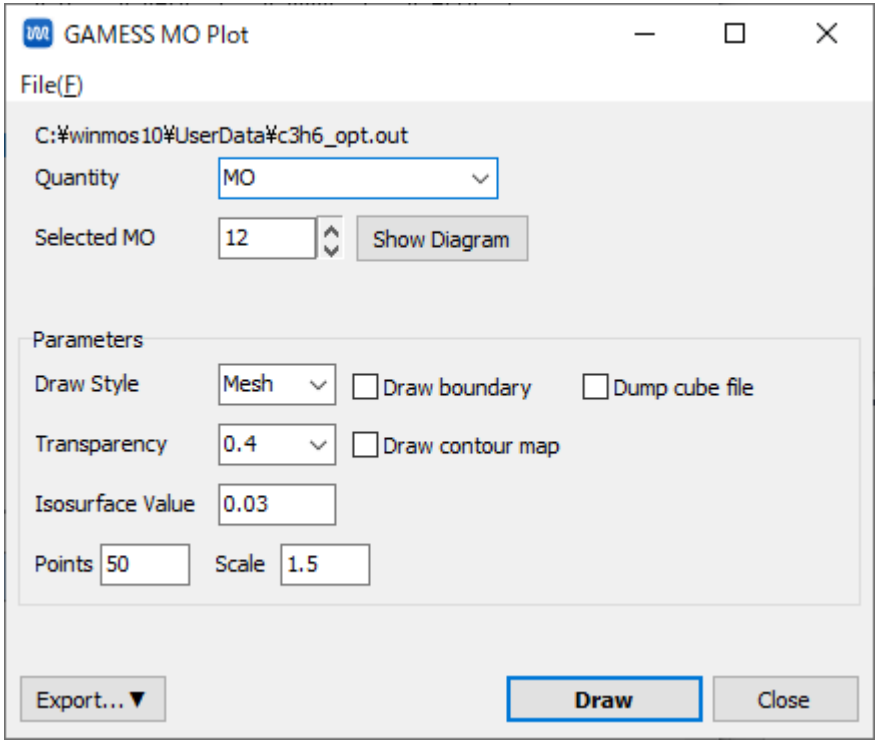


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

VI.分子軌道の表示

1. (**結果解析**)から**分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR**を選択する。
2. 構造最適化計算のログファイル（「**c3h6_opt.out**」または「**c3h6_opt.log**」）を開く。
3. **Energy Level Diagram**ウインドウと**(GAMESS、Gaussian、NWChem) MO Plot**ウインドウが開く。

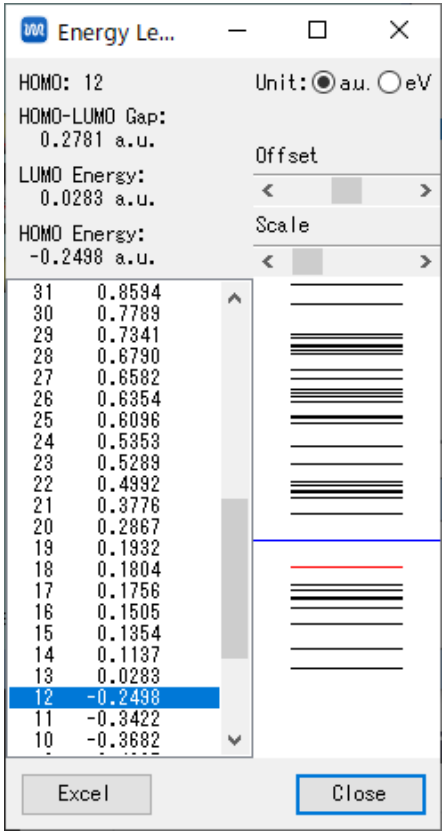




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

VI.分子軌道の表示

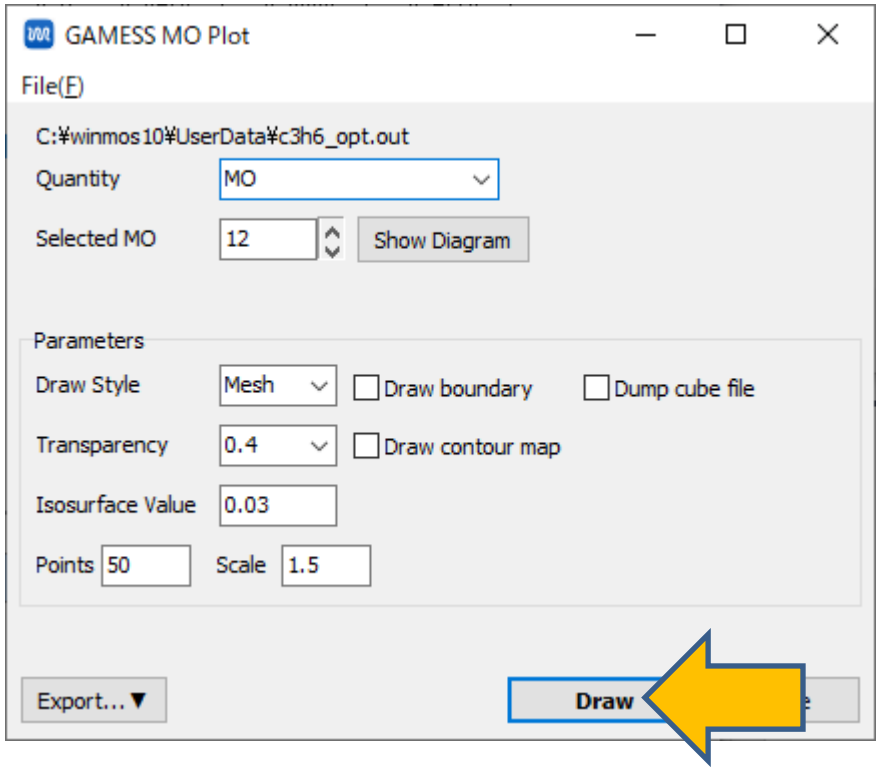
- **Energy Level Diagram**ウインドウには、計算した各分子軌道のエネルギーが表示される。初期状態では電子が入っている軌道の中で最もエネルギーが高いHOMOが選択される。
- ウインドウ上部にはHOMOの軌道番号、HOMO-LUMO Gap、LUMO及びHOMOエネルギーが表示され、HOMOエネルギーの符号を反対にした値が近似的なイオン化ポテンシャルとなる。

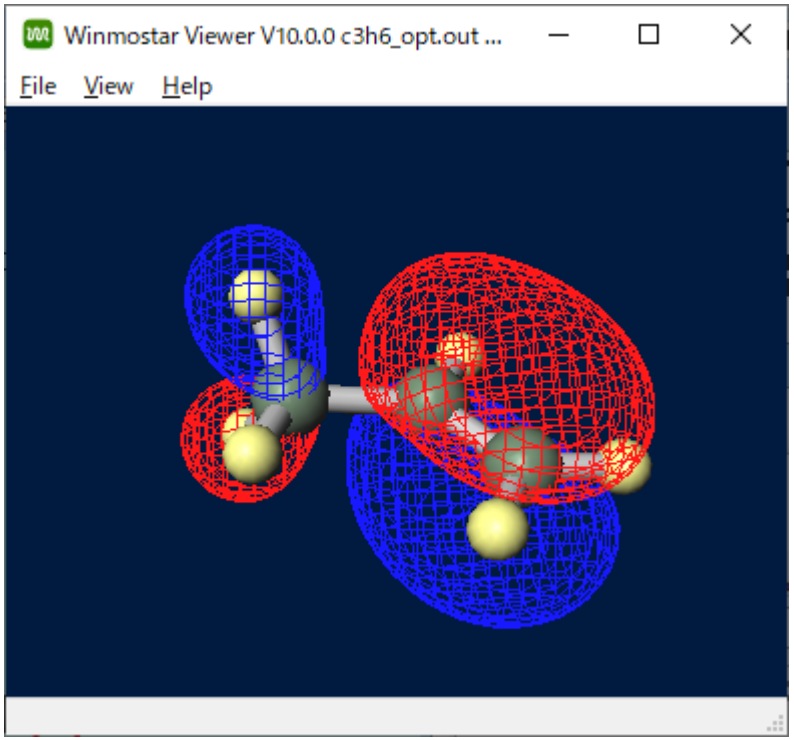


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

VI.分子軌道の表示

1. **MO Plot**ウインドウの**Draw**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動し、**Selected MO**で指定された軌道（図の例では12番目）が表示される。

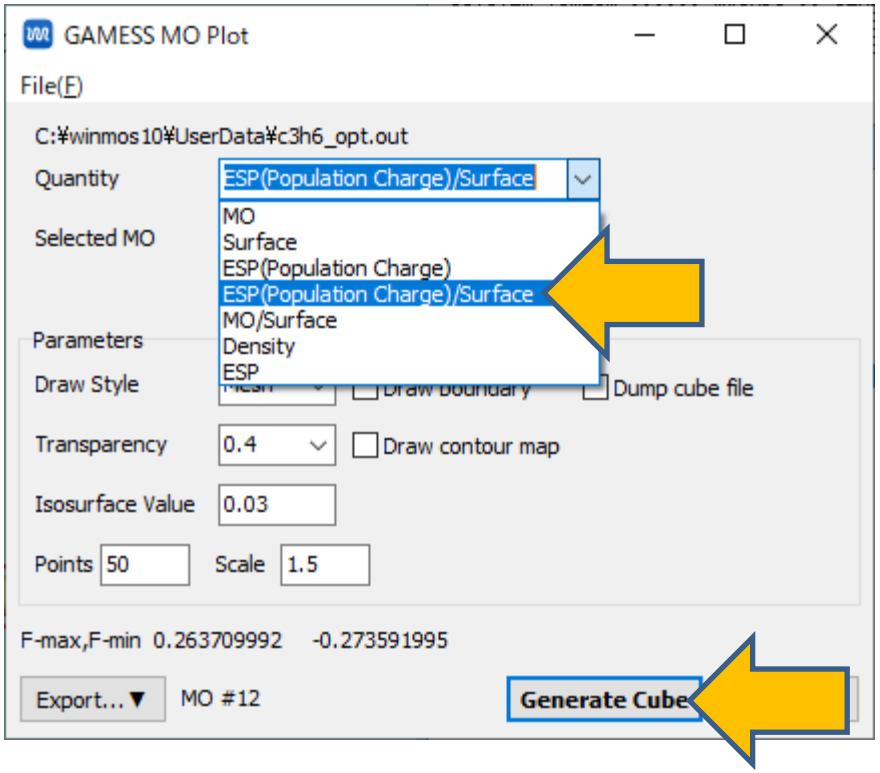




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

VII.静電ポテンシャルの表示

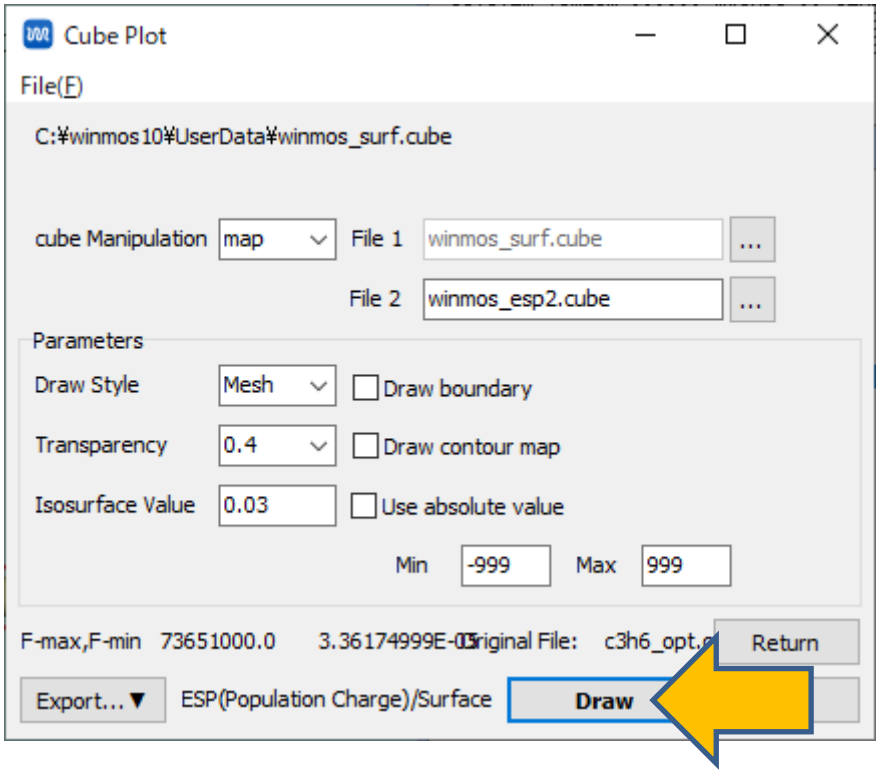
1. **MO Plot**ウインドウの**Quantity**で**ESP(Population Charge)/Surface**を選択し、右下の**Generate Cube**ボタンを押す。

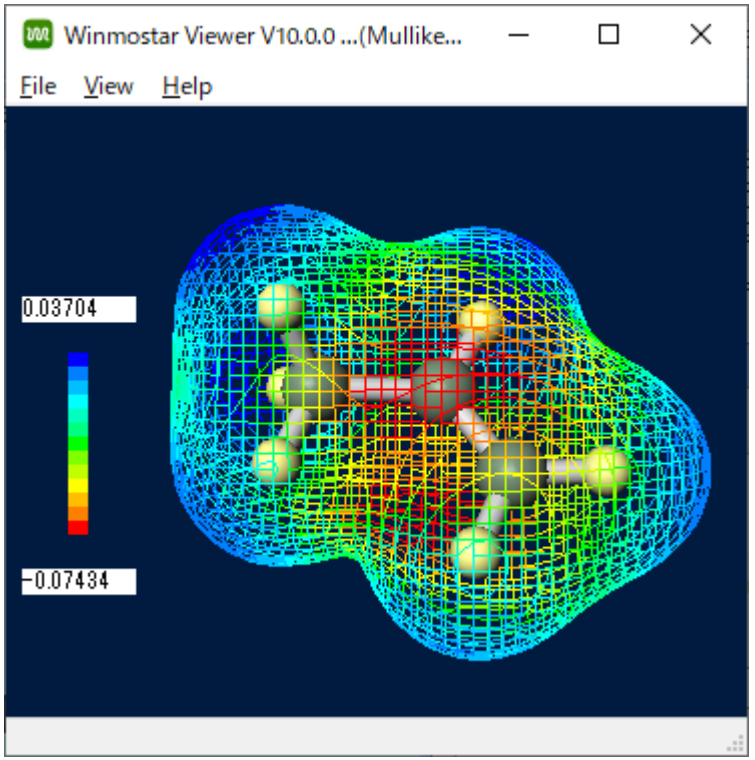


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

VII.静電ポテンシャルの表示

1. **Cube Plot**ウインドウが出現し、右下の**Draw**ボタンを押すと、**Winmostar Viewer**が起動し、Mulliken電荷から計算された静電ポテンシャルを分子表面にマッピングした様子が現れる（ここで表示しているのは、いわゆるESPそのものではない）。

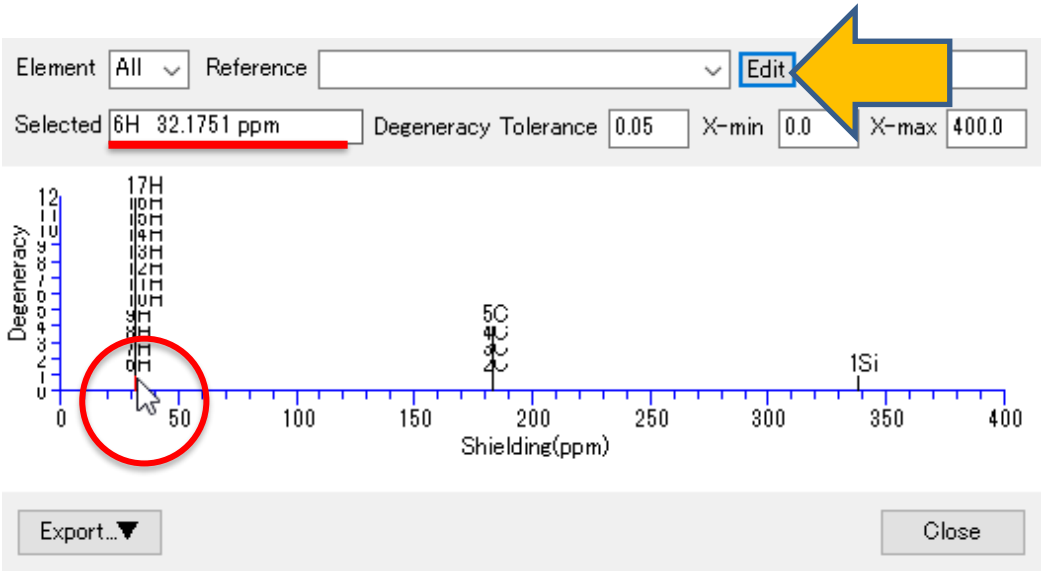


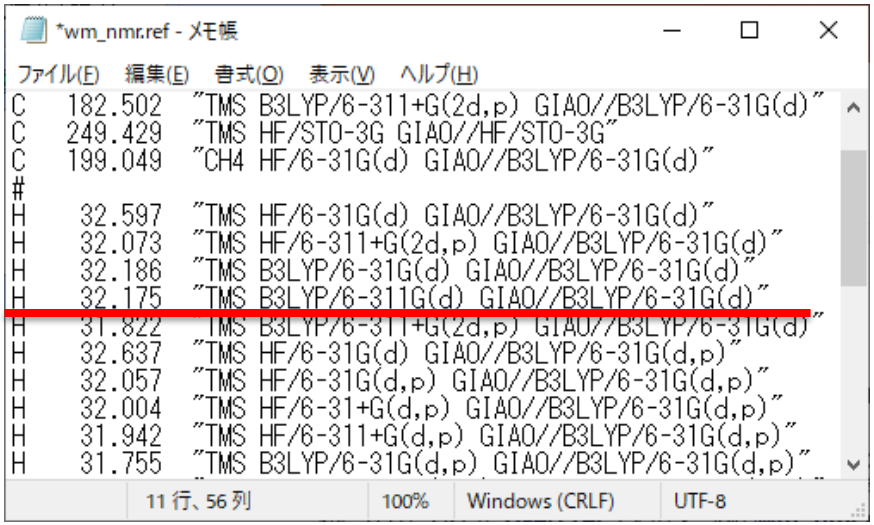


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

補足 NMR参照データ

1. 基準にしたい分子(TMSなど)、計算方法で構造最適化、NMR計算を行う。
2. **Chemical Shielding Tensors**ウインドウを開く。
3. 参照元にしたいスペクトルを左クリックする。すると、**Selected**に「6H 32.1751 ppm」などとそのスペクトルの磁気遮蔽定数が表示される（下図参照）。
4. **Edit**をクリックすると**UserPref**フォルダー内の**wm_nmr.ref**が開かれる。
5. 「**（元素名）　（上で取得したShielding定数）　“（Winmostarで表示されるときの名前）”**」という行を追加すると、**Reference**でその遮蔽定数を選択できるようになる。





Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

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

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.