

Winmostar チュートリアル
NWChem
Nudged Elastic Band (NEB)
V8.001

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

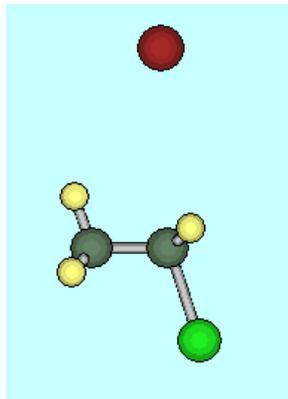
2017/10/09

Contents

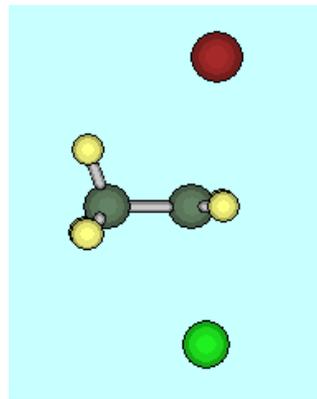
環境設定

- I. 始状態の作成
- II. 終状態の作成
- III. 計算実行
- IV. 結果のインポート
- V. 計算の再実行

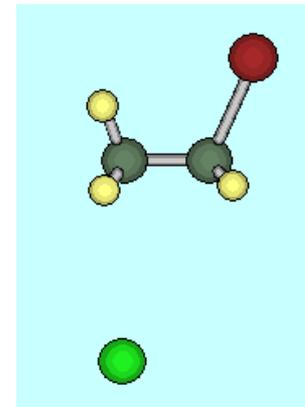
- Nudged Elastic Band(NEB)法とほぼ同じ手順でZero Temperature String(ZTS)法を使用することができますが、本チュートリアルでは詳細の説明は省略します。
- 本チュートリアルでは下記の反応を例にとって説明します。



始状態



遷移状態



終状態

環境設定

- NWChemの入手とセットアップ
以下のリンク先の「Windows版NWchemのインストール手順」に従い、NWChemをセットアップする。

https://winmostar.com/jp/manual_jp.html

2. 計算エンジンのインストール

Windows版

[cygwin_wmのインストール手順](#) ※ Gromacs, Amber Windowsビルド済パッケージ(Cygwin)

(上級者向け)Gromacs, AmberのCygwin用インストール手順 ※ ビルド済みパッケージからのインストール

[GAMESSのインストール手順](#)

[NWChemのインストール手順](#)※ ビルド済パッケージ

(上級者向け)NWChemのインストール手順※ ビルド済パッケージからのインストールを推奨します

Winmostar V7用 NWChemのインストールマニュアル

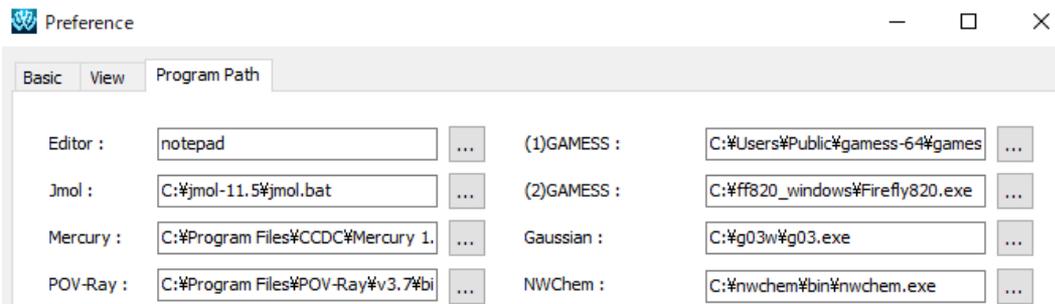
1. 簡易インストール方法(Windows)

下記リンクからコンパイル済のNWChemの自己解凍書庫をダウンロードし、実行します。
nwchem-6.6_32bit_20170124.exe(28MB)
ダウンロード後に実行して、C:*にインストールしてください。
C:\以外のフォルダにインストールした場合は、[ツール]>[環境設定]メニューからNWChemの[プログラムパス]を設定する必要があります。
※ダウンロードや実行が上手くいかない場合は、他のブラウザをお試しください。

MPI並列でNWChemを実行する場合は、別途MPICHのインストールが必要です。
LAMMPSインストール手順の3を参考にして、32bit版のMPICHをインストールしてください。

※LAMMPSあるいはQuantum ESPRESSOを同時に利用する場合は、MPICHに合わせて32bit版のLAMMPSやQuantum ESPRESSOを使用してください。

- パスの設定
[ツール]->[設定]画面のプログラムパスタブ(下図)で、インストールしたNWChemの実行ファイルのパスを指定する。



I. 始状態の作成(1)

Winmostar起動します。

[XYZ]のチェックをつけます。

[Repl]ボタンを2回クリックします。

元素のコンボボックスを「Cl 17」に変更します。

[Chg]ボタンをクリックします。

The screenshot shows the Winmostar software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a molecule. The top menu bar includes options like 'ファイル(E)', '編集(E)', '表示(V)', '半経験QM(P)', 'QM', 'MD', '固体(S)', 'ツール(I)', 'アドオン(A)', and 'チュートリアル'. Below the menu is a toolbar with various icons and buttons. The 'Repl' button is highlighted with a yellow arrow. The 'Cl 17' dropdown menu is also highlighted with a yellow arrow. The 'Chg' button is highlighted with a yellow arrow. The main window shows the following text: 'Winmostar 8 C2H5Cl MASS=64.51 X=1.4938 Y=0.0000 Z=0.0000 2-5-1-0 Leng=2.124 Ang=41.681 Dihed=* Lper=* C'. A table on the right side of the window shows the following data:

1	C	0.0000	1
2	C	1.4938	1
3	H	-0.3581	1
4	H	-0.3581	1
5	H	-0.3581	1
6	H	1.8519	1
7	H	1.8519	1
8	Cl	2.0668	1

At the bottom right, there is a panel with a table showing the following data:

2	C	1.4938
<input checked="" type="checkbox"/>	XYZ	1

A yellow arrow points to the 'XYZ' checkbox.

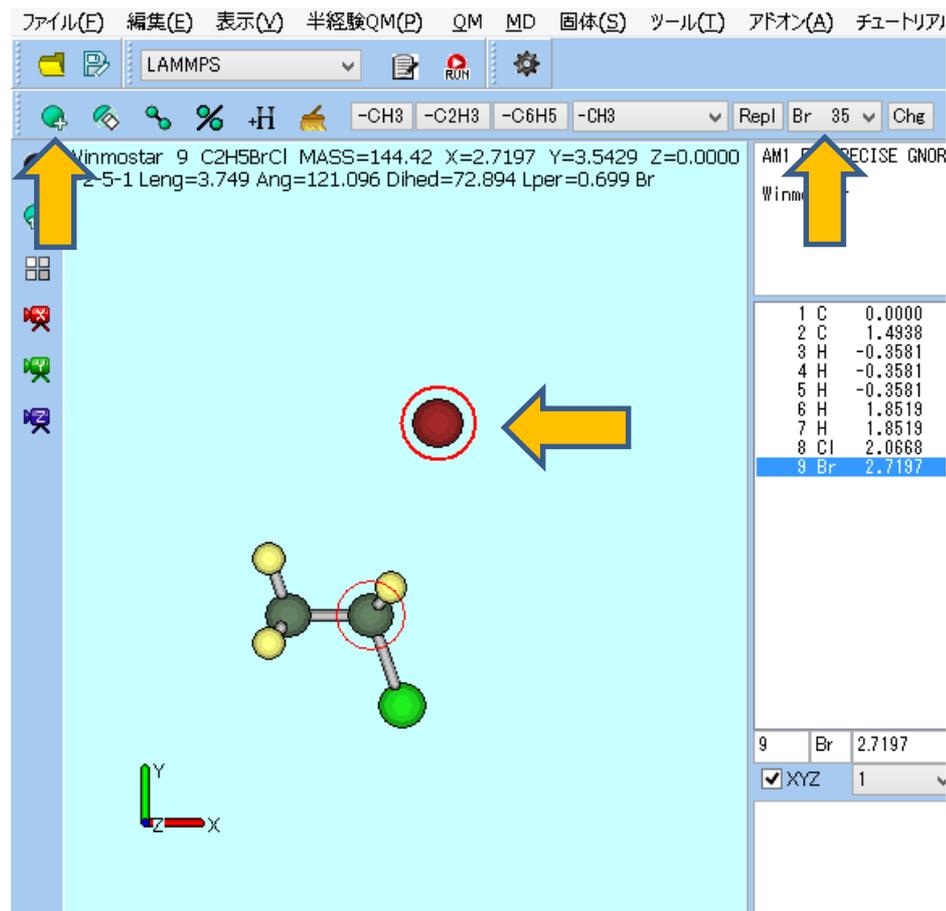
I. 始状態の作成(2)

元素のコンボボックスを「Br 35」に変更します。

左上の[原子追加]ボタンをクリックします。

分子の上方3Å程度のところをクリックします。

これで始状態を作成できました。
[ファイル]-[名前を付けて保存]で
C:\¥winmos8¥UserData¥initial.mol2として
保存しておきます。



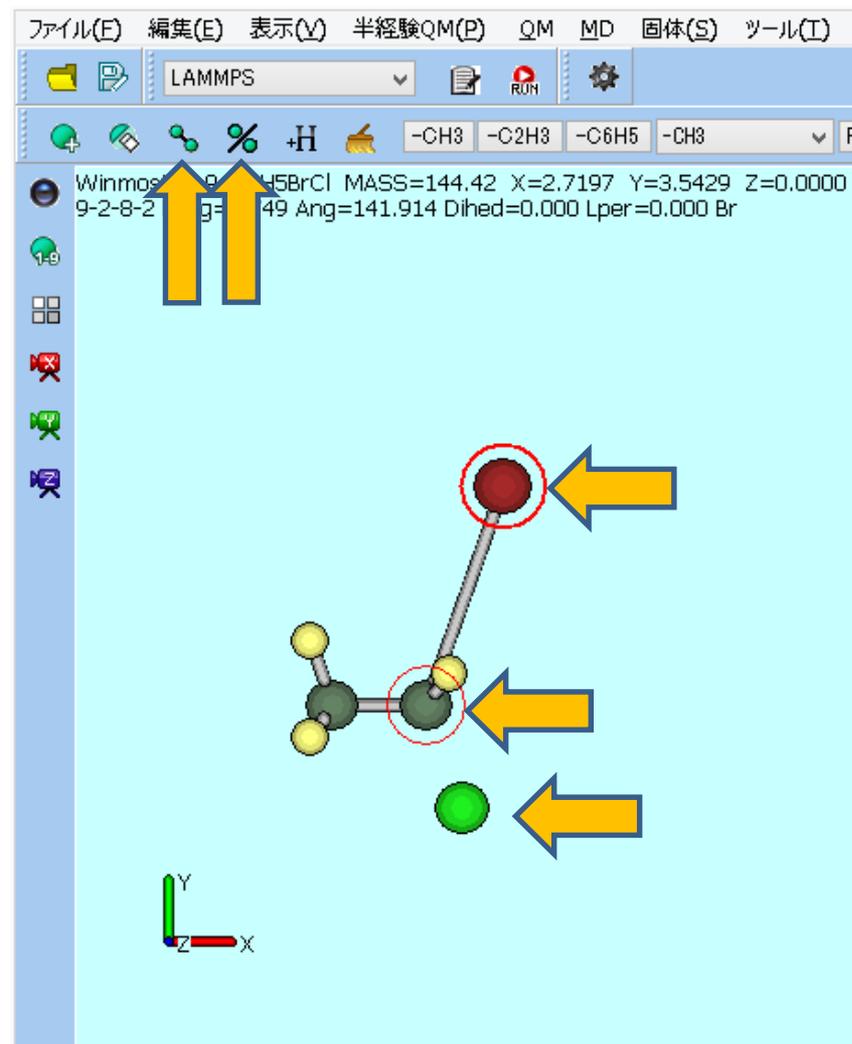
II. 終状態の作成(1)

次に終状態を作成します。

まず結合を付け替えます。

右側のC原子、Cl原子を順にクリックして結合削除ボタンをクリックします。

右側のC原子、Br原子を順にクリックして結合追加ボタンをクリックします。

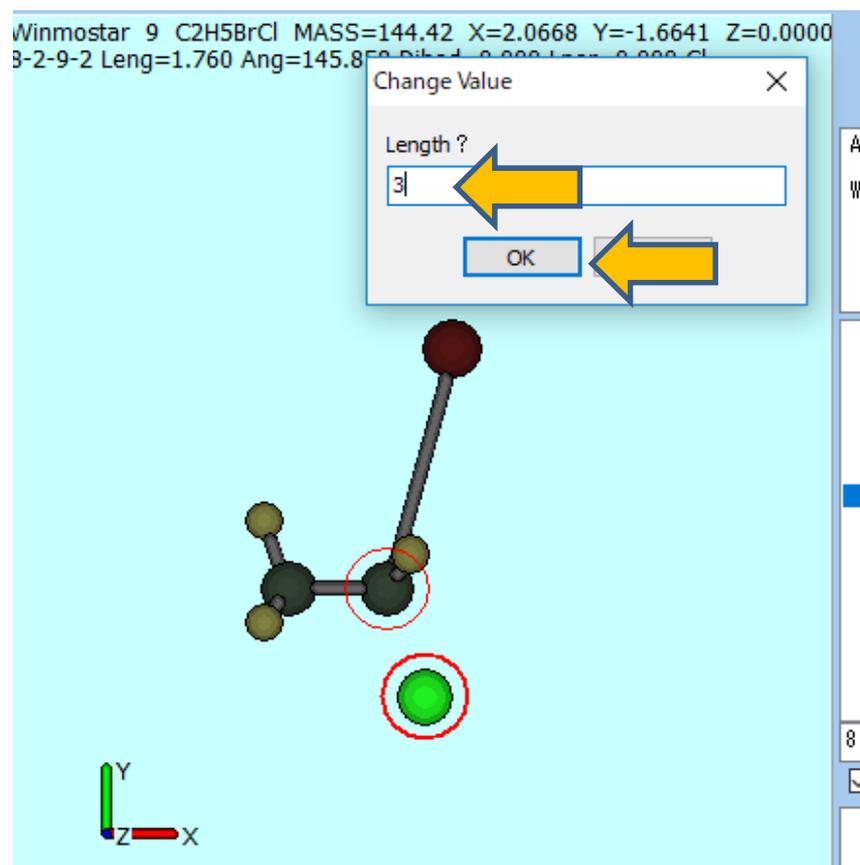


II. 終状態の作成(2)

Cl原子を少し離しておきます。

右側のC原子、Cl原子を順にクリックして[編集]-[変更]-[距離]メニューを選択します。

「Length?」に「3」と入力して[OK]ボタンを押します。



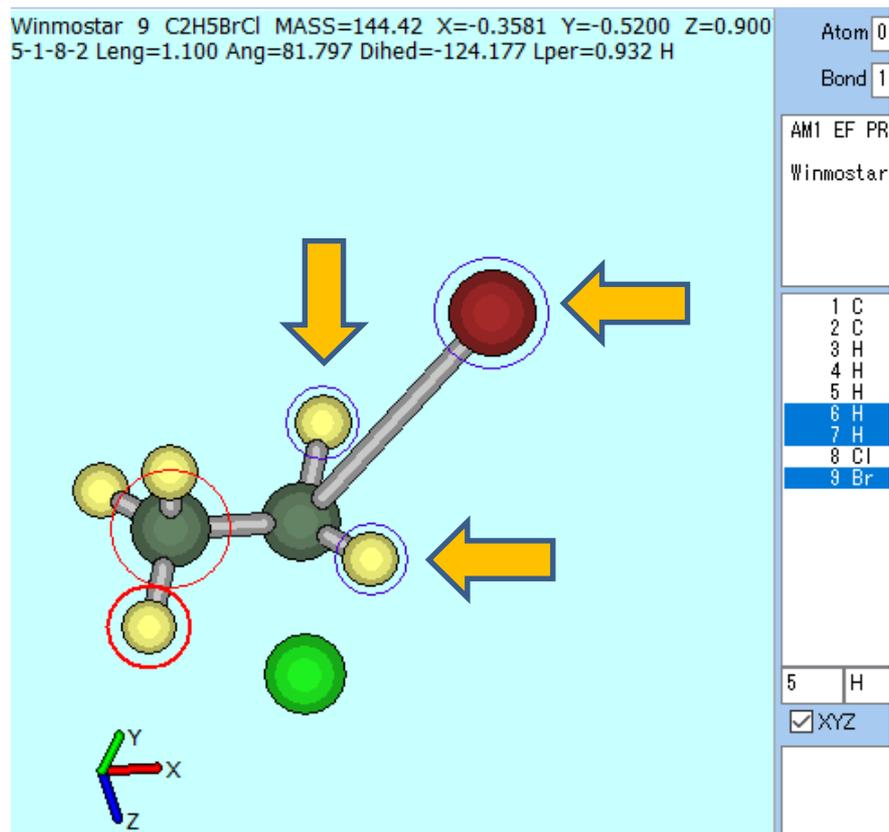
II. 終状態の作成(3)

形を整えるために部分クリーンをします。

6,7番のH原子とBr原子をCtrlを押しながらクリックして、部分選択状態にします。

[編集]-[部分編集]-[部分クリーン]メニューを選択します。

これで終状態を作成できました。
[ファイル]-[名前を付けて保存]で
C:\¥winmos8¥UserData¥final.mol2として
保存しておきます。



III. 計算実行(1)

[ファイル]-[最近使ったファイル]からC:\¥winmos8¥UserData¥initial.mol2を選択して開きます。

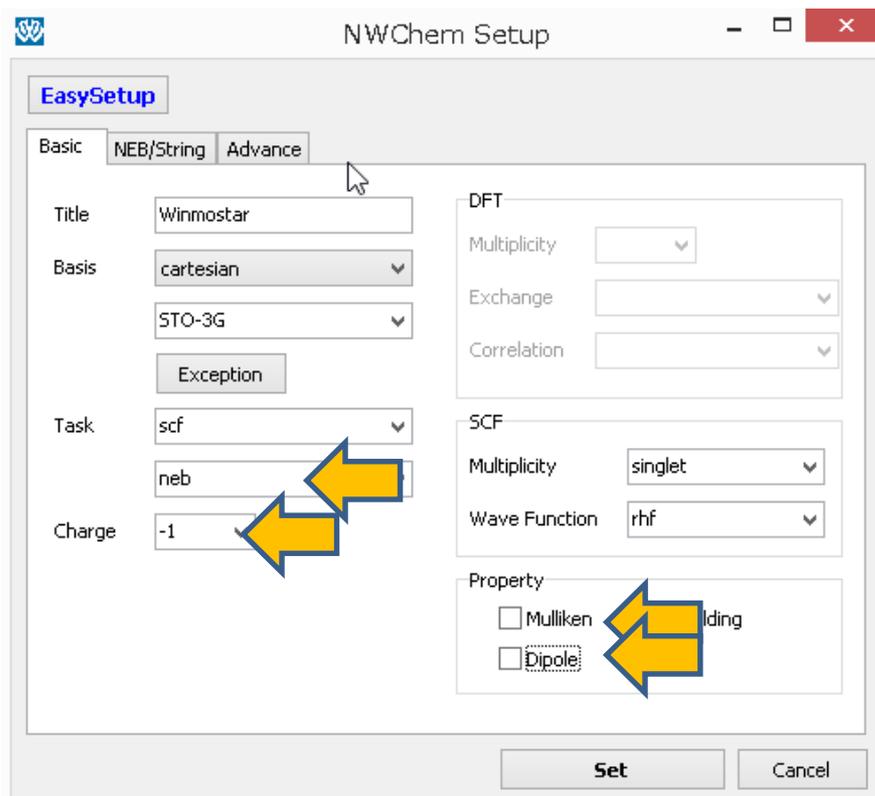
[QM]-[NWChem]-[NWChemキーワード設定]メニューを選択します。

[Basic]タブにおいて、

[Task] を「neb」にします。

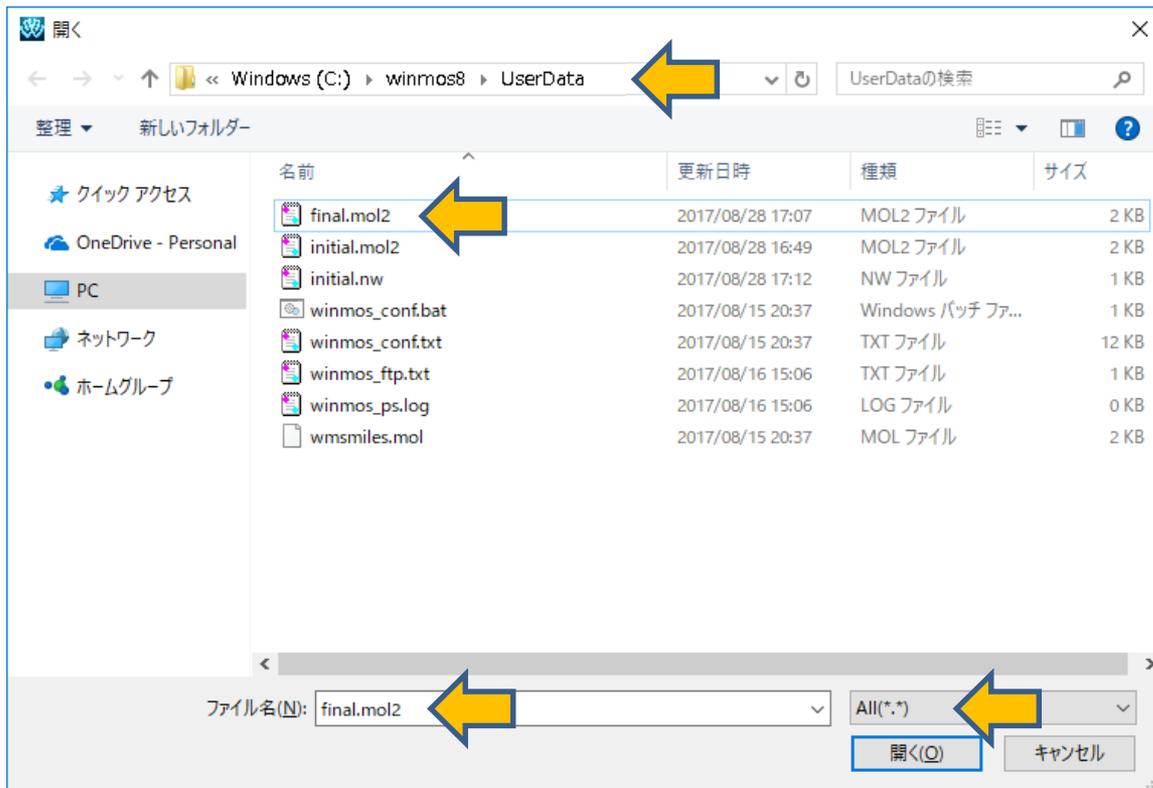
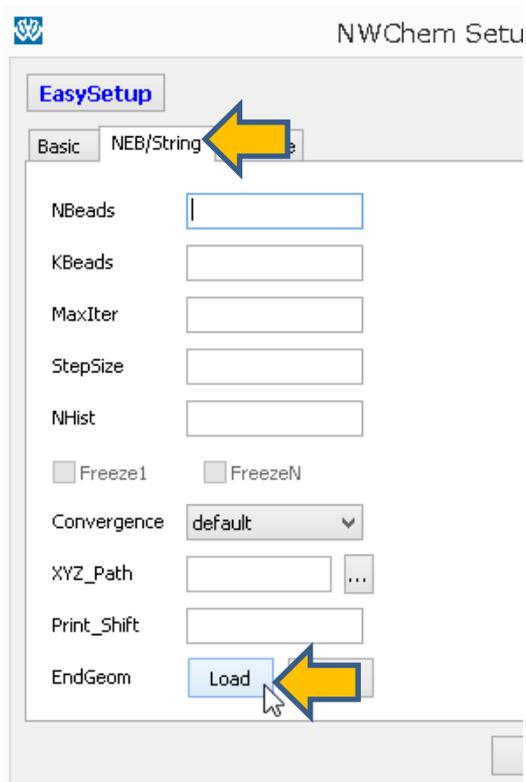
[Charge] を「-1」にします。

[Property]のチェックボックスは外します。



III. 計算実行(2)

[NEB/String]タブの[EndGeom]の[Load]ボタンをクリックします。
 拡張子を[All(*.*)]にしてC:¥winmos8¥UserData¥final.mol2を選択します。
 [Set]ボタンを押して閉じます。
 [ファイル]-[名前を付けて保存]メニューで
 C:¥winmos8¥UserData¥sn2_neb.nwとして保存します。



III. 計算実行(3)

[QM]-[NWChem]-[NWChem実行]メニューを選択します。
正常終了すれば下図のようなウィンドウが表示されます。

```

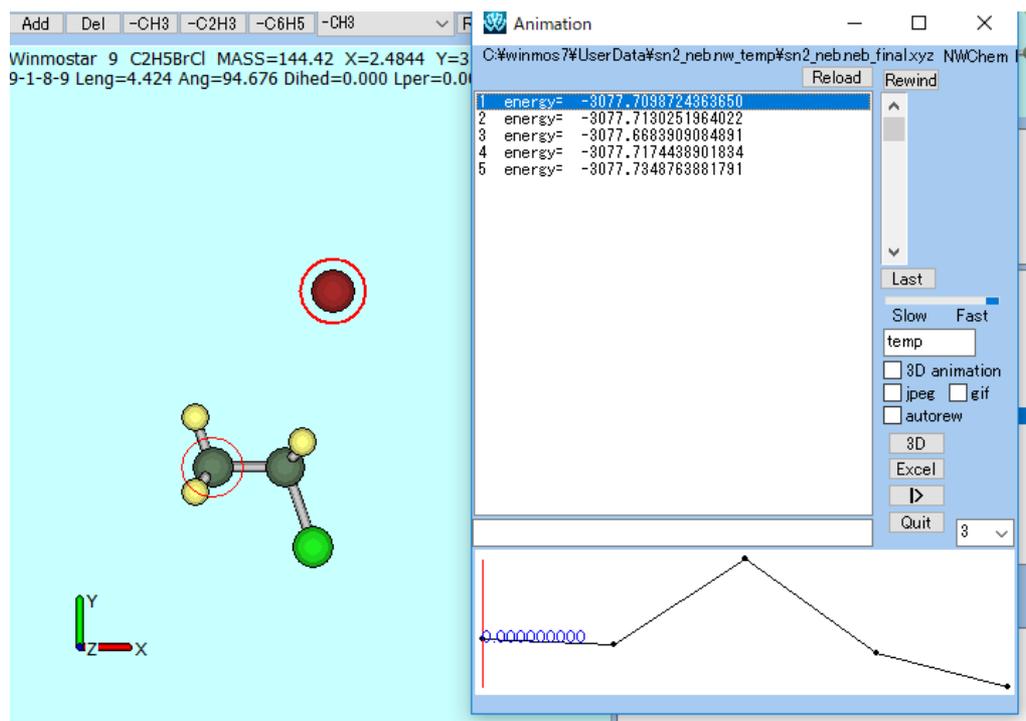
E. Apra, E. J. Bylaska, W. A. de Jong, N. Govind, K. Kowalski,
T. P. Straatsma, M. Valiev, H. J. J. van Dam, D. Wang, T. L. Windus,
J. Hammond, J. Autschbach, K. Bhaskaran-Nair, J. Brabec, K. Lopata,
S. A. Fischer, S. Krishnamoorthy, W. Ma, M. Klemm, O. Villa, Y. Chen,
V. Anisimov, F. Aquino, S. Hirata, M. T. Hackler, T. Risthaus, M. Malagoli,
A. Marenich, A. Otero-de-la-Roza, J. Mullin, P. Nichols, R. Peverati,
J. Pittner, Y. Zhao, P.-D. Fan, A. Fonari, M. Williamson, R. J. Harrison,
J. R. Rehr, M. Dupuis, D. Silverstein, D. M. A. Smith, J. Nieplocha,
V. Tipparaju, M. Krishnan, B. E. Van Kuiken, A. Vazquez-Mayagoitia,
L. Jensen, M. Swart, Q. Wu, T. Van Voorhis, A. A. Auer, M. Nooijen,
L. D. Crosby, E. Brown, G. Cisneros, G. I. Fann, H. Fruchtl, J. Garza,
K. Hirao, R. A. Kendall, J. A. Nichols, K. Tsemekhman, K. Wolinski,
J. Anchell, D. E. Bernholdt, P. Borowski, T. Clark, D. Clerc, H. Dachsel,
M. J. O. Deegan, K. Dylla, D. Elwood, E. Glendening, M. Gutowski, A. C. Hess,
J. Jaffe, B. G. Johnson, J. Ju, R. Kobayashi, R. Kutteh, Z. Lin,
R. Littlefield, X. Long, B. Meng, T. Nakajima, S. Niu, L. Pollack, M. Rosing,
K. Glaesemann, G. Sandrone, M. Stave, H. Taylor, G. Thomas, J. H. van Lenthe,
A. T. Wong, Z. Zhang.

Total times cpu:      48.4s    wall:      48.4s
C:\winmos7\UserData\sn2_neb.nw_temp>move /y "sn2_neb.moveecs" ..\sn2_neb.moveecs
1 個のファイルを移動しました。

C:\winmos7\UserData\sn2_neb.nw_temp>cd ..
*****
**  NWChem END  **
*****
Exit in 10 seconds.
  
```

IV. 結果のインポート

[QM] -[NWChem] -[インポート] -[Animation (NEB/String)]メニューを選択し、
C:\winmos8\UserData\sn2_neb.nw_temp\sn2_neb.neb_final.xyzを選択します。
アニメーションウィンドウでNEBのパスを確認することができます。



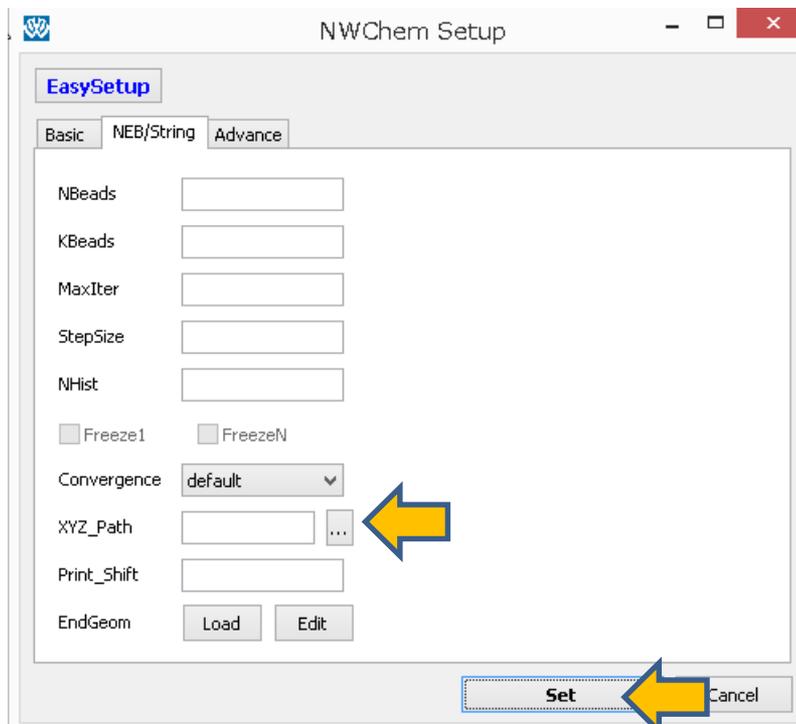
V. 計算の再実行(1)

計算が収束まで至らず、続きの計算をする場合は[NWChemキーワード設定]画面の、[NEB/String]タブにて[XYZ_Path]を設定します。

[...]ボタンをクリックして、sn2_neb.neb_final.xyzを選択します。

[Set]ボタンをクリックして、ファイルを上書き保存します。

[NWChem実行]メニューで続きの計算をすることができます。



facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

👍 いいね!