

Winmostar™ チュートリアル  
GAMESS/Gaussian/NWChem  
基礎編  
V8.023

株式会社クロスアビリティ

2018/10/05

# 概要

- スチ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(IR、ラマン)スペクトル、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は、短時間で様々な計算を実行できるように、比較的精度の低い基底関数・計算手法を使用しています。
- 通常、構造最適化時と物性算出時で極力同じ計算条件を使うが、本チュートリアルでは便器上UV-Visの算出のみHFではなくDFTを使用する。
- GAMESSのNMRスペクトルの計算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Population解析後の点電荷から得られるポテンシャル分布を表示します。

# 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/GAMESS\\_install\\_manual\\_jp\\_win.pdf](https://winmostar.com/jp/GAMESS_install_manual_jp_win.pdf)

に従い、GAMESS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。

- NWChemの場合

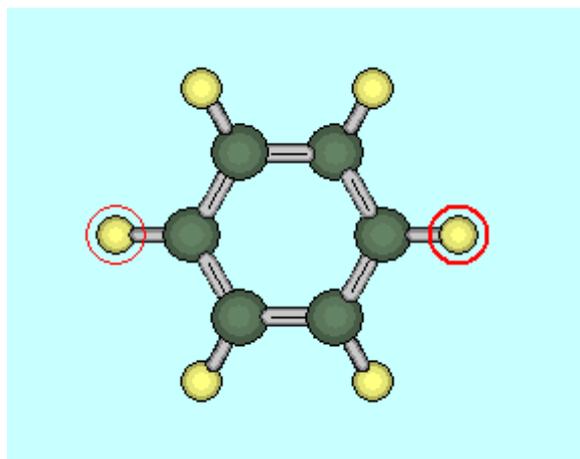
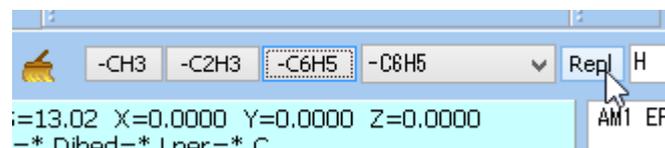
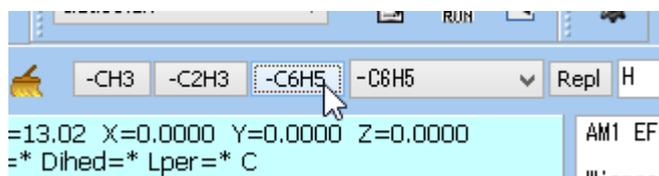
NWChemのインストールマニュアルページ

[https://winmostar.com/jp/nwchem4wm\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/nwchem4wm_jp.html)

の内容に従い、NWChemをインストールする。

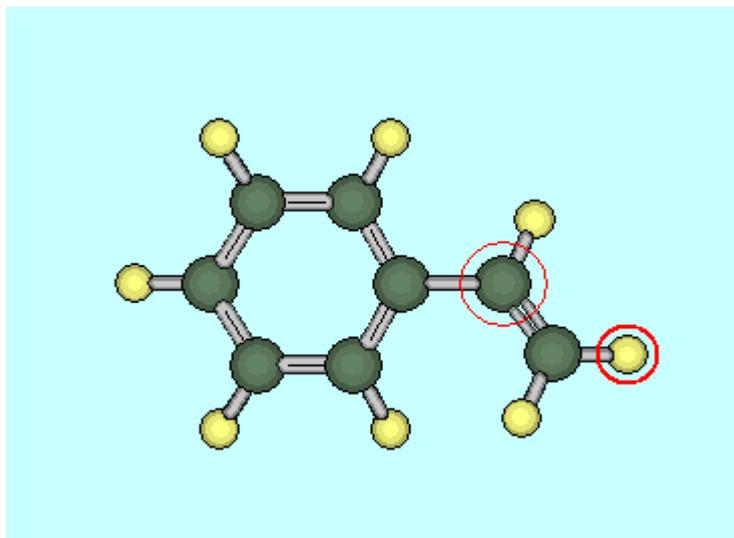
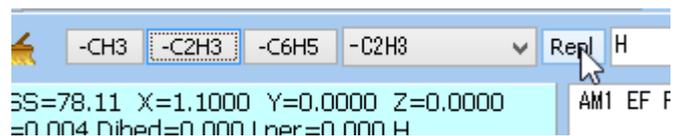
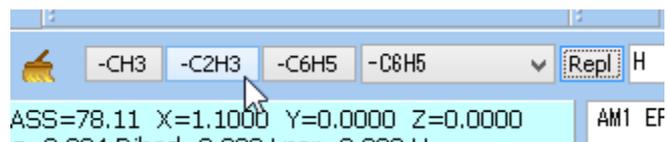
# I. モデルの作成

Winmostarを起動し、画面上部の[-C6H5]ボタンをクリックし、その右の[Repl]ボタンをクリックするとベンゼン分子が作成される。



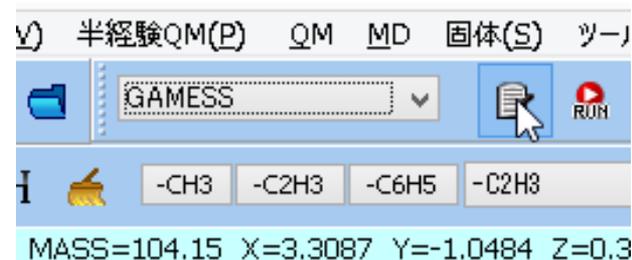
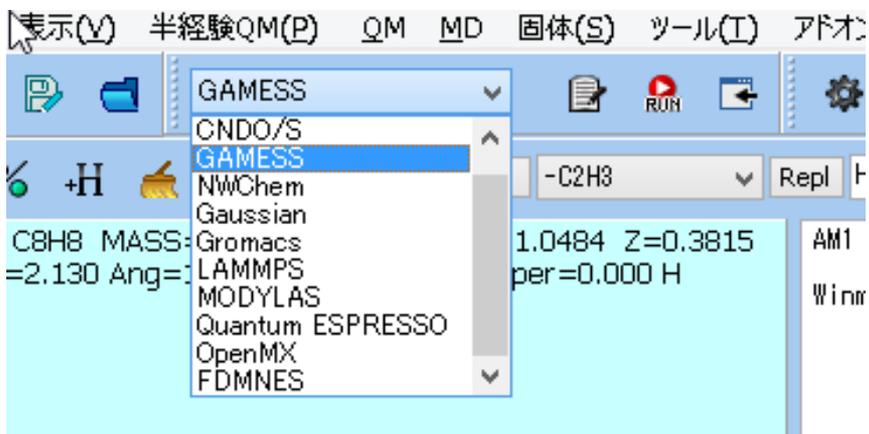
# I. モデルの作成

続けて、同様に[-C2H3]ボタンをクリックし、[Repl]ボタンをクリックするとスチレン分子が作成される。



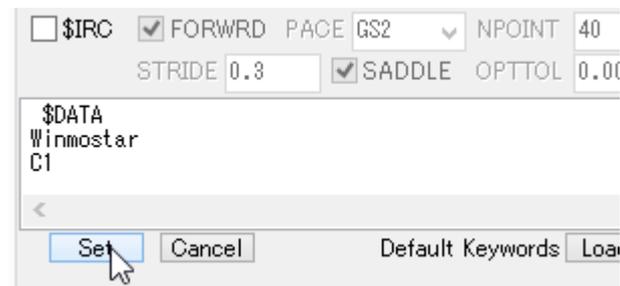
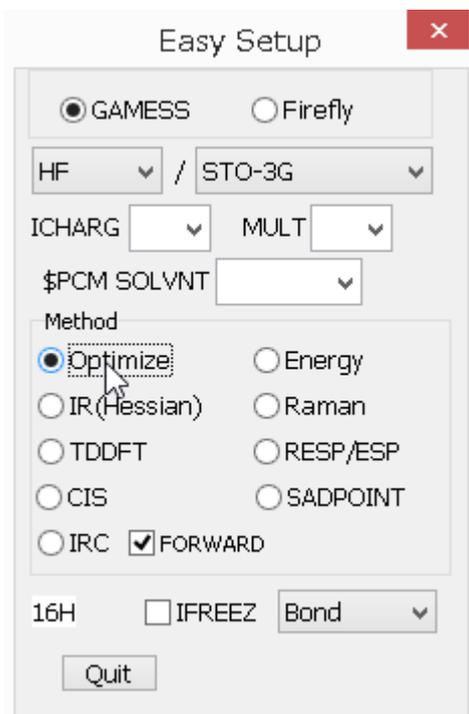
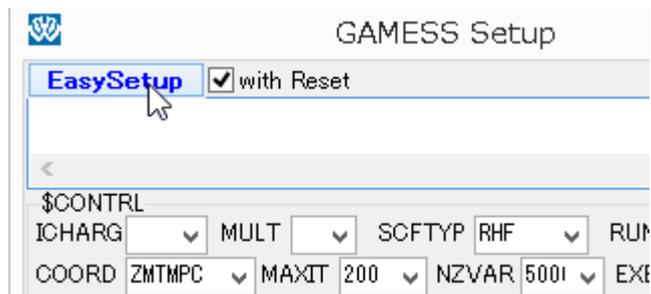
## II. 構造最適化計算

ウインドウ上部のソルバー選択のプルダウンで[GAMESS], [Gaussian]または[NWChem]を選択し、そのすぐ右の[キーワード設定]ボタンをクリックする。



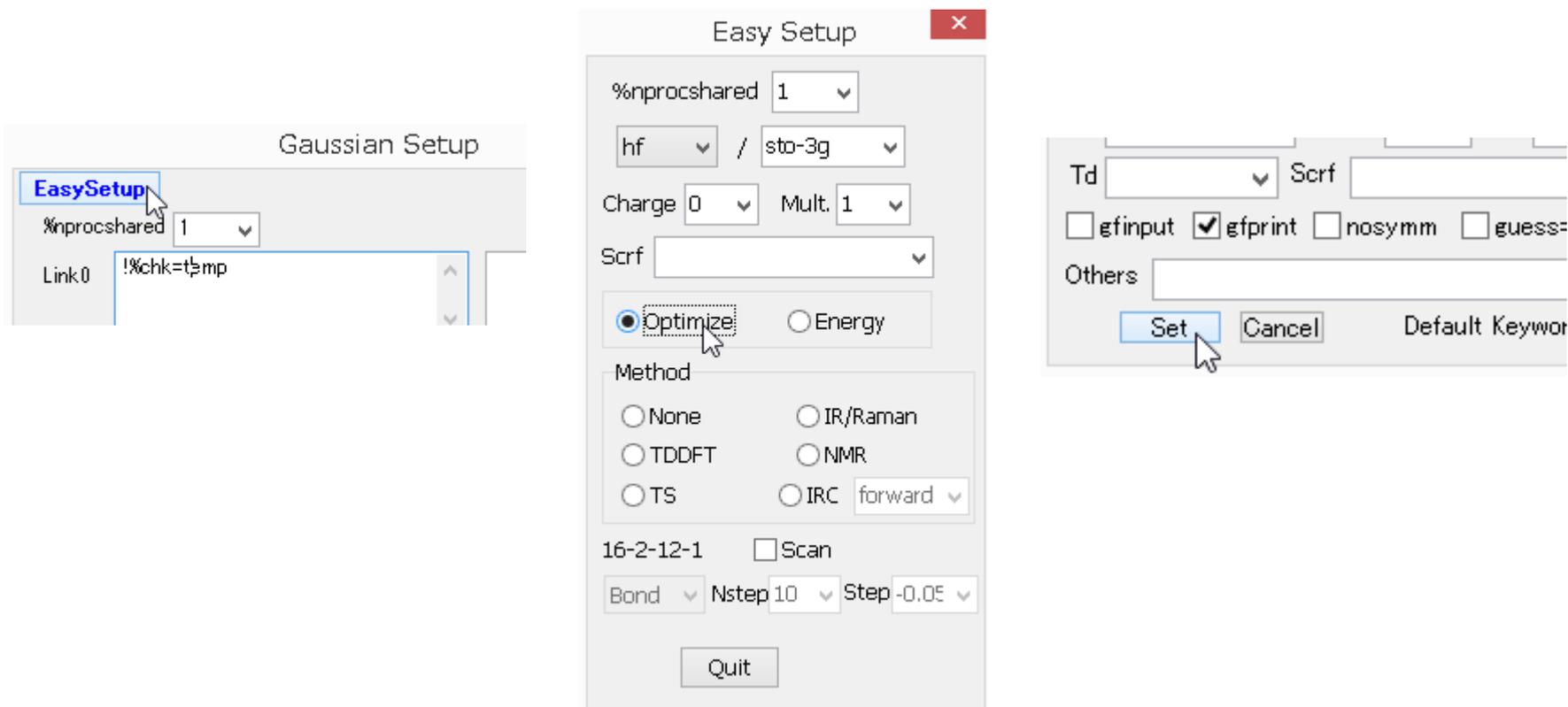
## II. 構造最適化計算

GAMESSの場合、[GAMESS Setup]ウインドウ上部の[EasySetup]ボタンを押す。  
[Easy Setup]ウインドウで[Method]の[Optimize]を選択し、その下の[Quit]ボタンを押す。  
その後、[GAMESS Setup]ウインドウ下部の[Set]ボタンをクリックして閉じる。



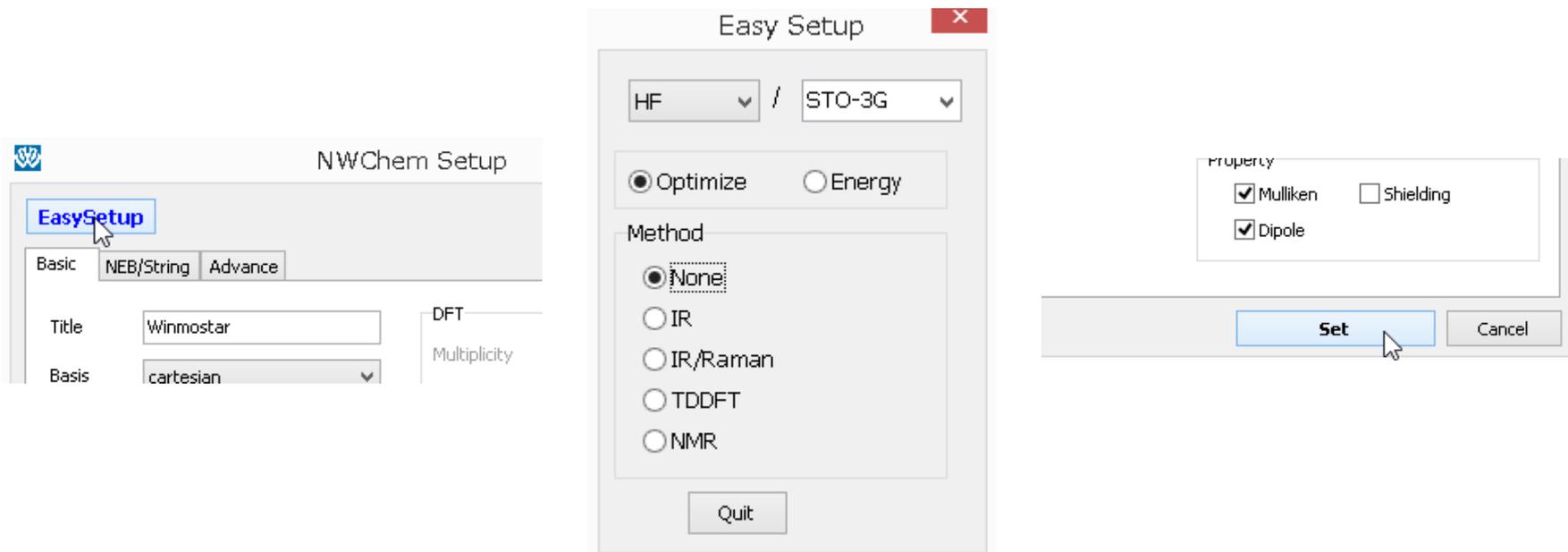
## II. 構造最適化計算

Gaussianの場合、[Gaussian Setup]ウインドウ上部の[EasySetup]ボタンを押す。  
[Easy Setup]ウインドウで[Method]の[Optimize]を選択し、その下の[Quit]ボタンを押す。  
その後、[Gaussian Setup]ウインドウ下部の[Set]ボタンをクリックして閉じる。



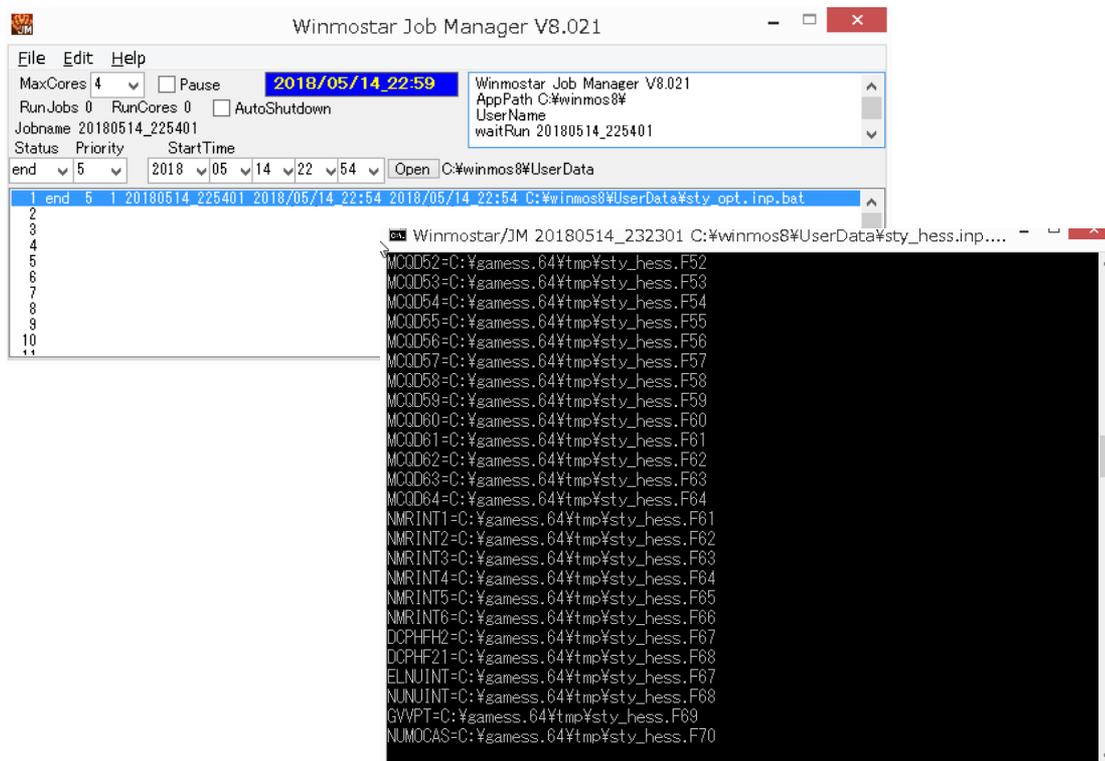
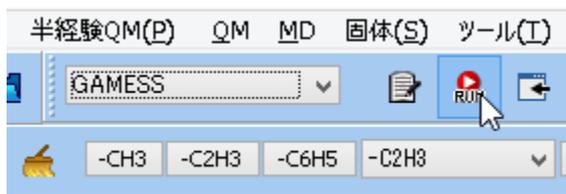
## II. 構造最適化計算

NWChemの場合、[NWChem Setup]ウインドウ上部の[EasySetup]ボタンを押す。  
[Easy Setup]ウインドウで[Optimize]と[Method]の[None]をクリックし、その下の[Quit]  
ボタンを押す。その後、[NWChem Setup]ウインドウ下部の[Set]ボタンをクリックして閉  
じる。



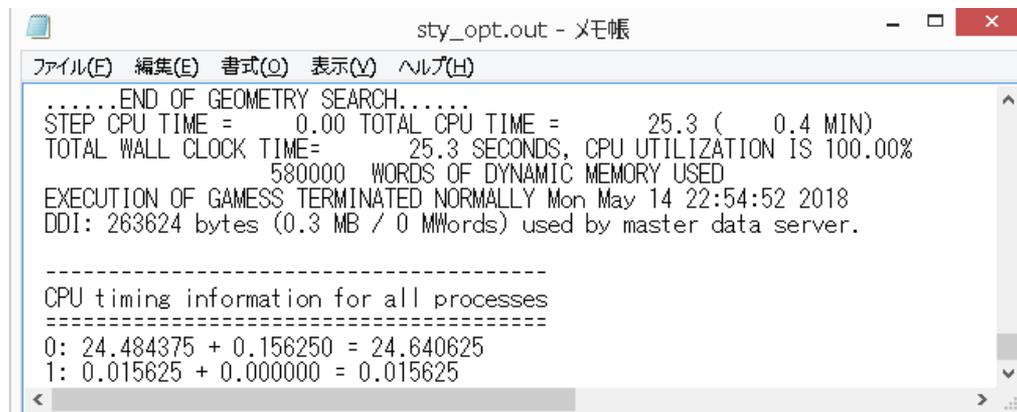
## II. 構造最適化計算

メインウインドウ上部の[計算実行]ボタンをクリックすると、ファイル保存ダイアログが開くので、ソルバーの入力ファイルの名前する。(例えば「sty\_opt」)  
[保存]ボタンをクリックすると、Winmostar Job Managerが起動し、コマンドプロンプトのウインドウが立ち上がって計算が開始される。



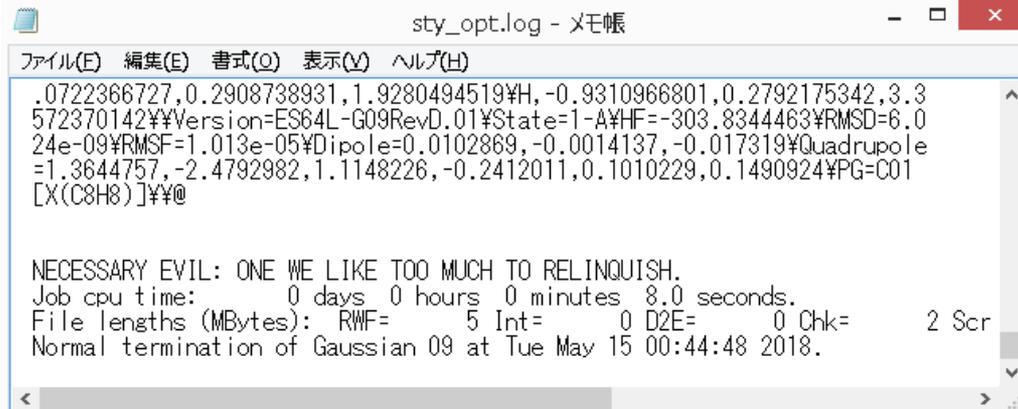
## II. 構造最適化計算

GAMESSの場合、計算終了後、メインウィンドウにて、[QM]-[GAMESS]-[out(log)ファイル編集]を選択し、[開く]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。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。



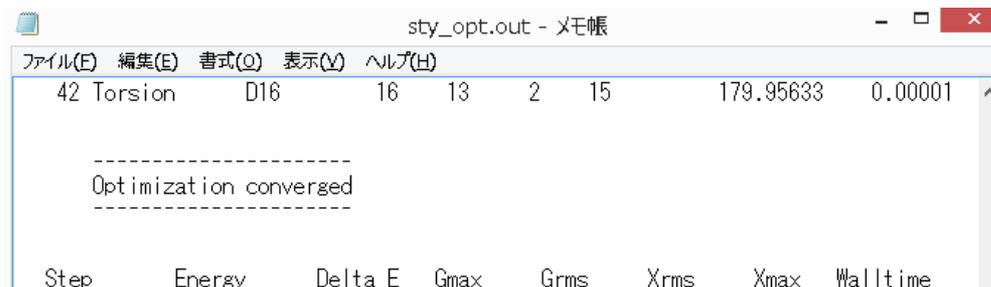
## II. 構造最適化計算

Gaussianの場合、計算終了後、メインウィンドウにて、[QM]-[Gaussian]-[log(out)ファイル編集]を選択し、[開く]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。ログファイルが開くので、「Normal termination of Gaussian 09...」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。



## II. 構造最適化計算

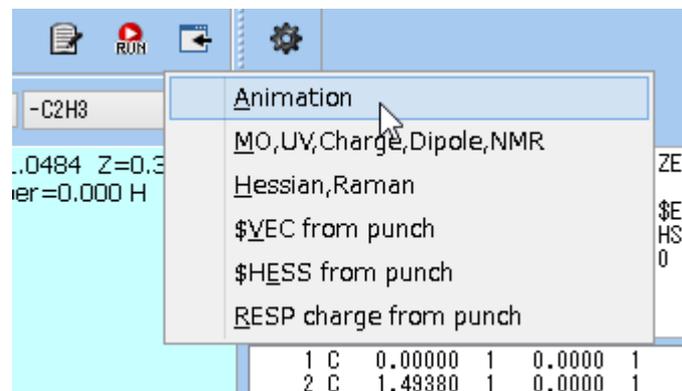
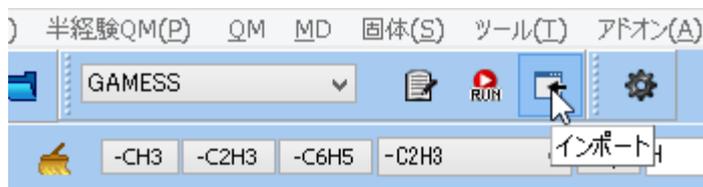
NWChemの場合、計算終了後、メインウィンドウにて、[QM]-[NWChem]-[outファイル編集]を選択し、[開く]ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開く。ログファイルが開くので、「Optimization converged」などの、計算が正常終了したことを示すメッセージがあることや、計算の異常終了を示すメッセージがないことを確認する。これは全ての計算の後に必ず行う。



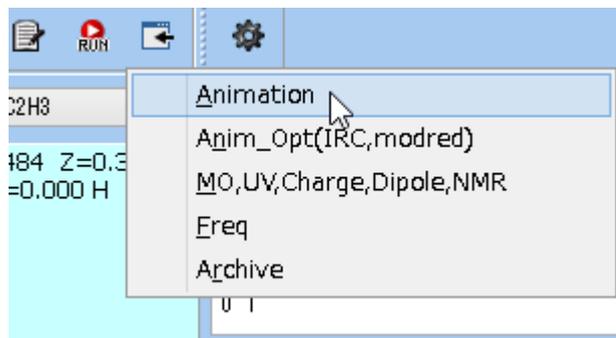
## II. 構造最適化計算

計算終了後、メインウィンドウ上部の[インポート]ボタンをクリックし、[Animation]をクリックする。[開く]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。

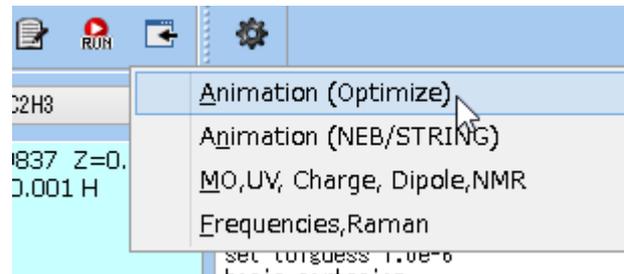
### GAMESSの場合



### Gaussianの場合:



### NWChemの場合:

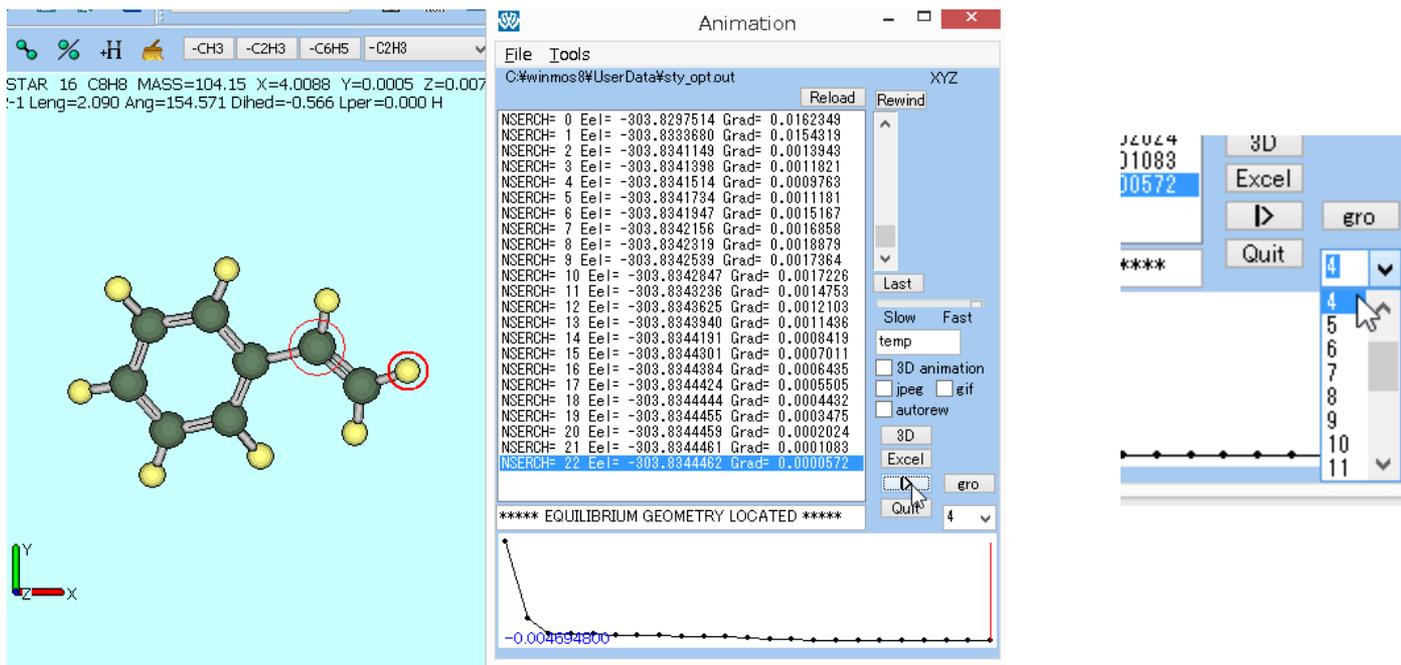


## II. 構造最適化計算

[Animation]ウインドウ右下の[▶]ボタンをクリックすると、メインウインドウ上で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)。

[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、右下のプルダウンで選んだカラムのデータのグラフが表示される。

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。



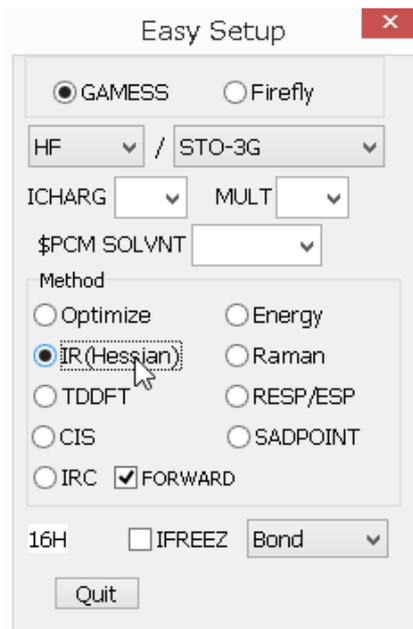
The screenshot shows two windows from a molecular modeling software. The main window displays a ball-and-stick model of a molecule with a red circle highlighting a specific part. The Animation window is open, showing a table of data for 22 steps (NSERCH= 0 to 22). The table columns are Eel and Grad. The data shows a rapid decrease in energy and gradient over the first few steps, reaching equilibrium by step 22. Below the table is a graph showing the energy (Eel) over time, with a value of -0.004694800 at the end. The Animation window also has a control panel with buttons for 3D, Excel, and Quit, and a dropdown menu for selecting data columns.

Step	Eel	Grad
NSERCH= 0	-303.8297514	0.0162349
NSERCH= 1	-303.8333680	0.0154319
NSERCH= 2	-303.8341149	0.0012343
NSERCH= 3	-303.8341398	0.0011821
NSERCH= 4	-303.8341514	0.0009763
NSERCH= 5	-303.8341734	0.0011181
NSERCH= 6	-303.8341947	0.0015167
NSERCH= 7	-303.8342156	0.0018858
NSERCH= 8	-303.8342319	0.0018879
NSERCH= 9	-303.8342539	0.0017364
NSERCH= 10	-303.8342847	0.0017226
NSERCH= 11	-303.8343236	0.0014753
NSERCH= 12	-303.8343625	0.0012103
NSERCH= 13	-303.8343940	0.0011436
NSERCH= 14	-303.8344191	0.0008419
NSERCH= 15	-303.8344301	0.0007011
NSERCH= 16	-303.8344384	0.0006435
NSERCH= 17	-303.8344424	0.0005505
NSERCH= 18	-303.8344444	0.0004432
NSERCH= 19	-303.8344455	0.0003475
NSERCH= 20	-303.8344459	0.0002024
NSERCH= 21	-303.8344461	0.0001083
NSERCH= 22	-303.8344462	0.0000572

### III. 振動スペクトルの計算

再びキーワード設定ウインドウの[EasySetup]を開く。  
 GAMESSの場合は、[IR(Hessian)]を選択し、[Quit]、[Set]をクリックしてウインドウを閉じる。  
 Gaussianの場合は、[Method]に[Energy]と[IR/Raman]を選択し、[Quit]、[Set]をクリックしてウインドウを閉じる。  
 NWChemの場合は、[Energy]と[Method]の[IR/Raman]を選択し、[Quit]、[Set]をクリックしてウインドウを閉じる。

GAMESSの場合



Easy Setup

GAMESS  Firefly

HF / STO-3G

ICHARG / MULT

\$PCM SOLVNT

Method

Optimize  Energy

IR(Hessian)  Raman

TDDFT  RESP/ESP

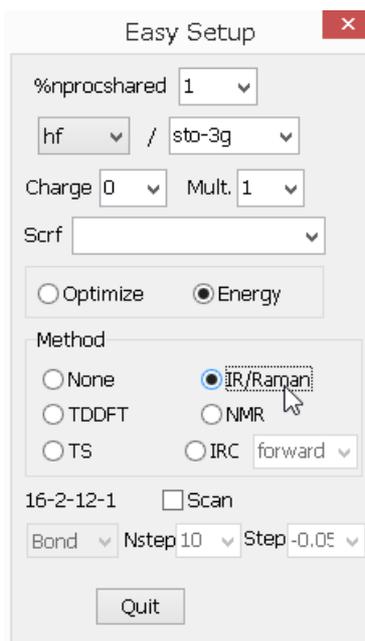
CIS  SADPOINT

IRC  FORWARD

16H  IFREEZ Bond

Quit

Gaussianの場合



Easy Setup

%nprocshared 1

hf / sto-3g

Charge 0 Mult. 1

Scrf

Optimize  Energy

Method

None  IR/Raman

TDDFT  NMR

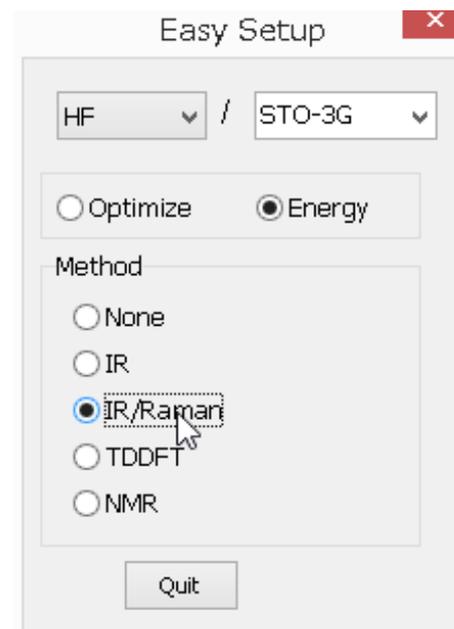
TS  IRC forward

16-2-12-1  Scan

Bond Nstep 10 Step -0.05

Quit

NWChemの場合



Easy Setup

HF / STO-3G

Optimize  Energy

Method

None

IR

IR/Raman

TDDFT

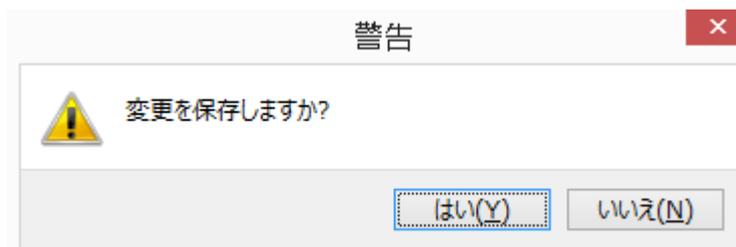
NMR

Quit

### III. 振動スペクトルの計算

再び[計算実行]ボタンをクリックし、「変更を保存しますか？」と聞かれたら[はい]ボタンをクリックする。保存ダイアログでは先ほどと異なる名前を入力し(例えば「sty\_hess」)、計算を開始する。

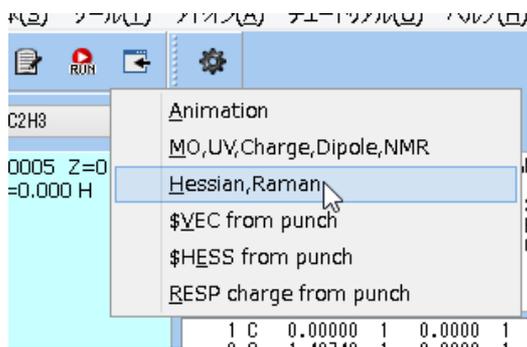
※NWChemの場合は30分程度時間が掛かることがある。



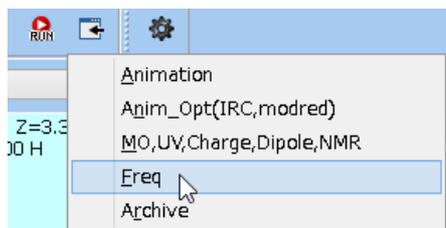
## III. 振動スペクトルの計算

計算終了後、[インポート]ボタンをクリックし、GAMESSの場合は[Hessian,Raman]、Gaussianの場合は[Freq]、NWChemの場合は[Frequencies,Raman]をクリックする。[開く]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]ウィンドウが出現する。Gaussian, NWChem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ルリング係数は[ScalF.]で選択する。

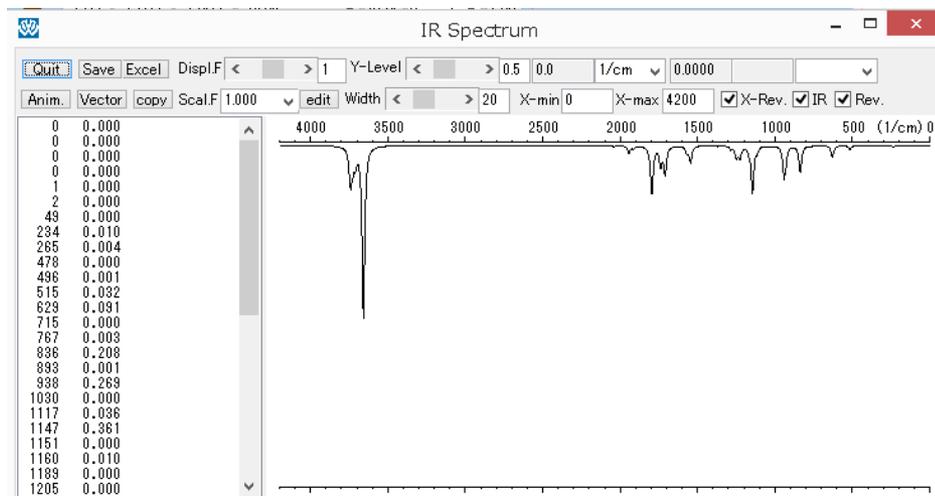
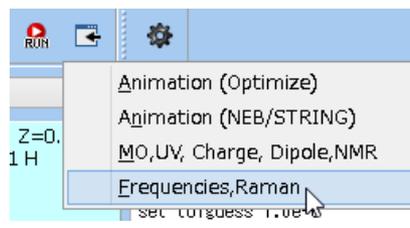
### GAMESSの場合



### Gaussianの場合

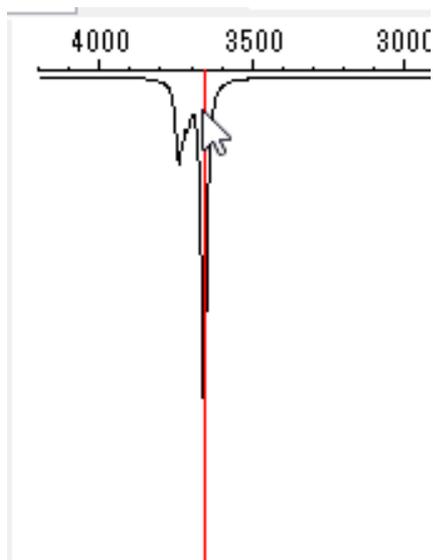


### NWChemの場合

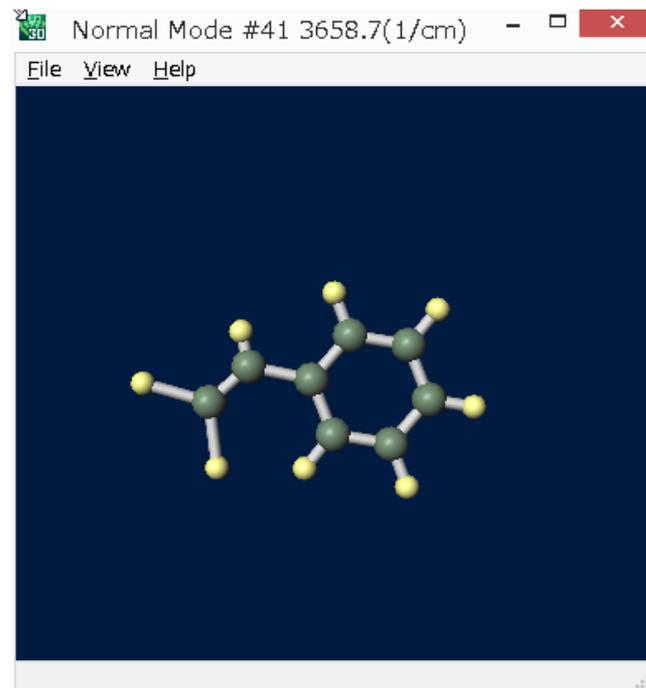


### III. 振動スペクトルの計算

[IR Spectrum]ウインドウ上で、 $3650\text{ cm}^{-1}$ 付近をクリックすると、赤線でスペクトルが選択される。その後[Anim.]ボタンをクリックすると、Winmostar 3Dが起動し、 $3650\text{ cm}^{-1}$ 付近のスペクトル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。

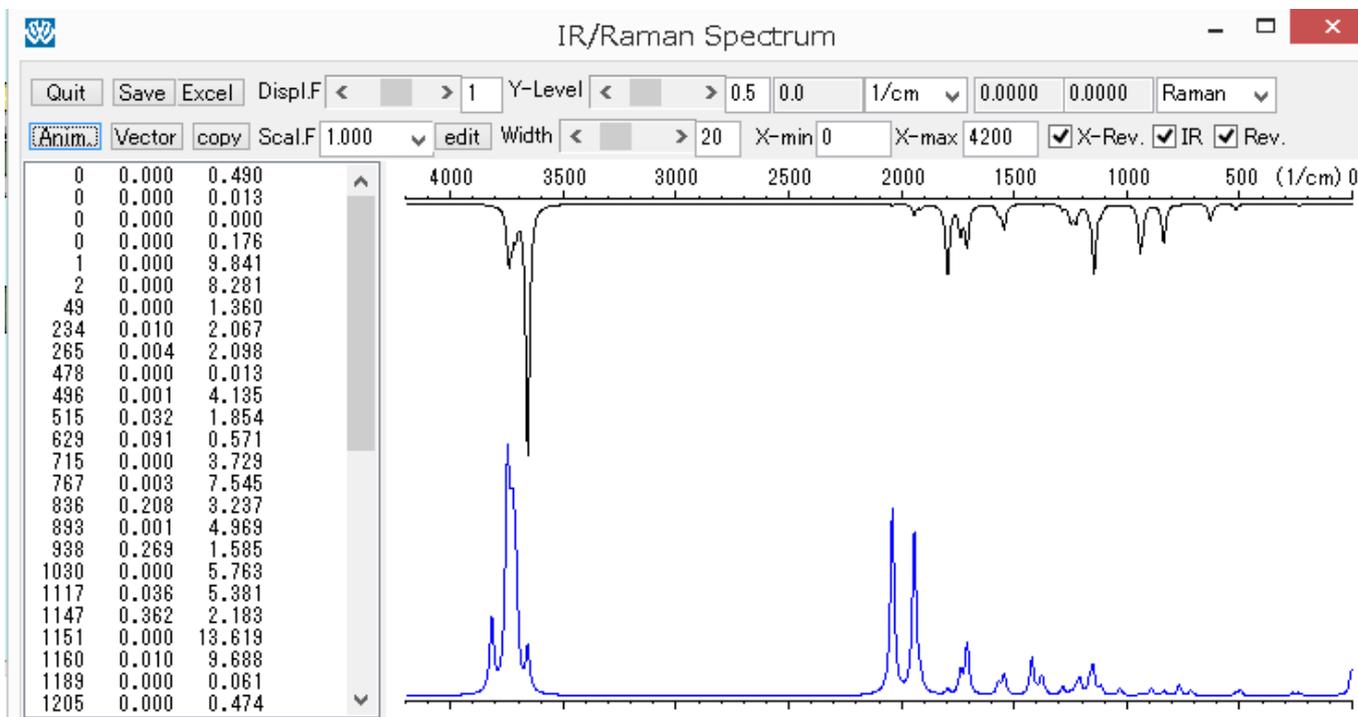


Quit	Save	Excel	D
Anim.	Vector	copy	S
1147	0.361		
1151	0.000		
1160	0.010		



### III. 振動スペクトルの計算

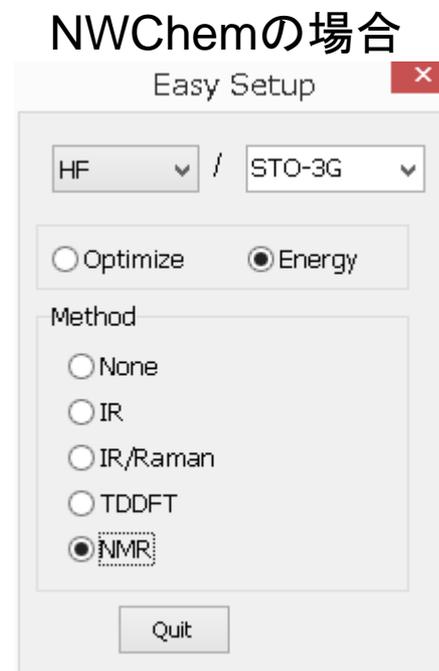
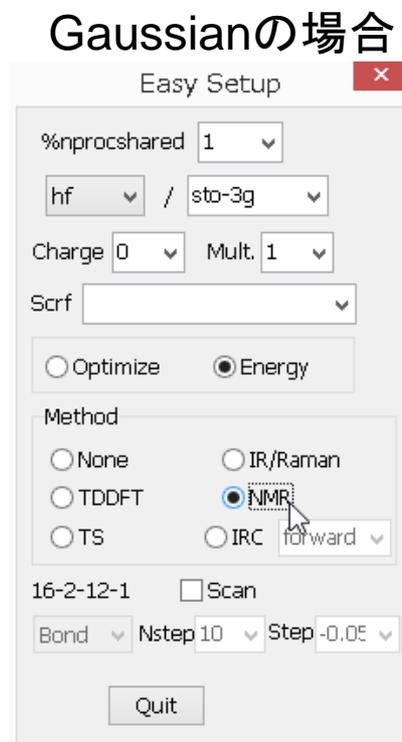
GAMESSでラマンスペクトルも計算する場合は、[IR Spectrum]ウィンドウを閉じずに、[キーワード設定ウィンドウ]-[EasySetup]で[Raman]を選択しキーワードを設定し、計算をする(ファイル名は[IR(Hessian)]を選択した時と違うものにする)。計算終了後、[インポート]-[Hessian,Raman]をクリックし、再びデフォルトで選択されるファイルを開くと、IR・ラマンスペクトル両方が描画されたウィンドウが出現する。



## IV. NMRスペクトルの計算

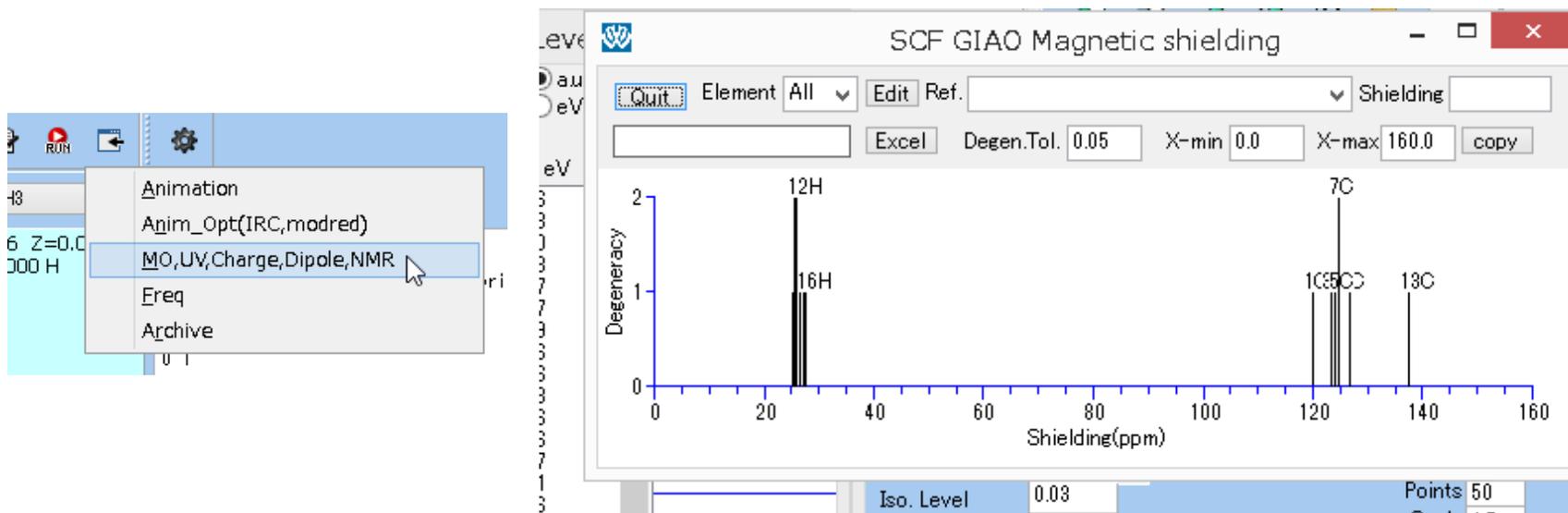
(GAMESSの場合は「V. UV-Visスペクトルの計算」に進む。)

[IR Spectrum]ウィンドウは閉じる。再び[キーワード設定]-[EasySetup]を開き、[Energy]と[NMR]を選択し、[Quit]し[Set]する。再度[計算実行]を選択し、ファイル名を指定し(例えば「sty\_nmr」)計算を開始する。



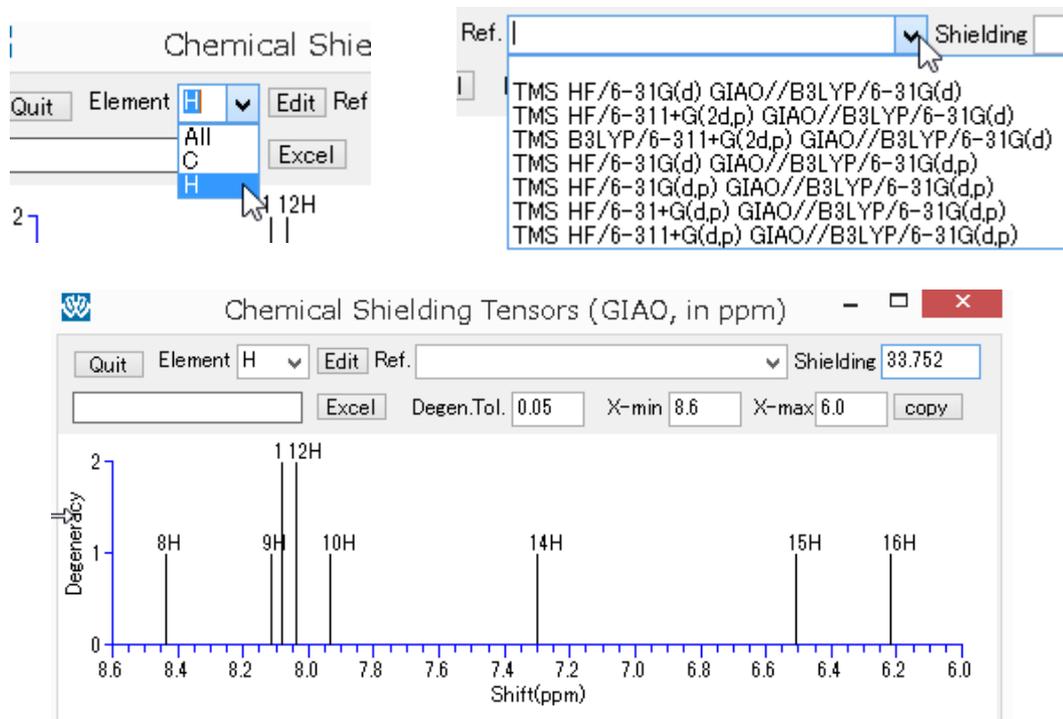
## IV. NMRスペクトルの計算

計算終了後、[インポート]ボタンから[MO,UV,Charge,Dipole,NMR]を選択する。[開く]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と、他のウィンドウと一緒に[SCF GIAO Magnetic shielding]ウィンドウが開き、NMRスペクトルが描画される。



## IV. NMRスペクトルの計算

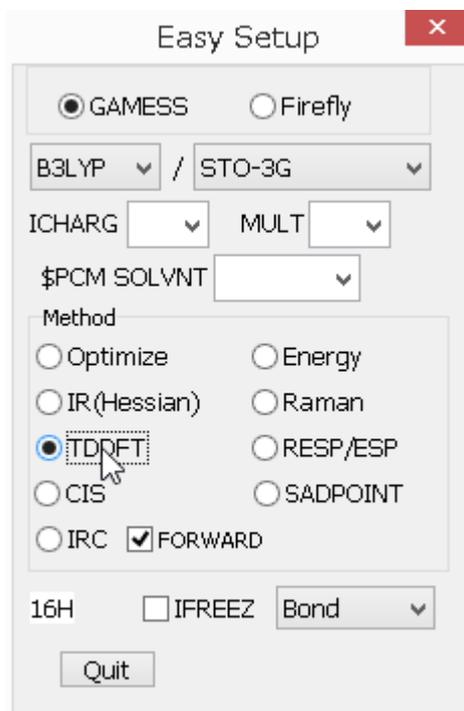
元素ごとに表示する場合は[Element]で元素を選択する。[Ref.]で参照データを選択するか、[Shielding]に遮蔽定数を入力すると、横軸が変化し化学シフトが表示される。参照データを追加する方法は、本チュートリアルでの補足に示す。確認後、同ウィンドウと[MO Plot]ウィンドウを閉じる。



## V. UV-Visスペクトルの計算

再び[キーワード設定]-[EasySetup]を開く。GAMESSの場合は[TDDFT]、Gaussian, NWChemの場合は[Energy]と[TDDFT]を選択し、[Quit]し[Set]する。再度[計算実行]を選択し、ファイル名を指定し(例えば「sty\_uvvis」)計算を開始する。

### GAMESSの場合



Easy Setup

GAMESS  Firefly

B3LYP / STO-3G

ICHARG  MULT

\$PCM SOLVNT

Method

Optimize  Energy

IR (Hessian)  Raman

TDDFT  RESP/ESP

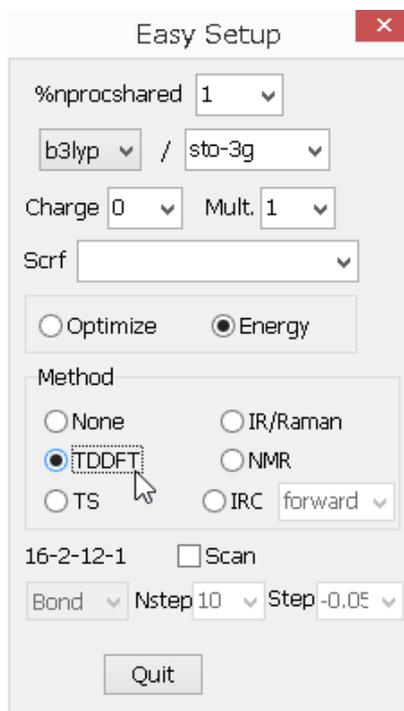
CIS  SADPOINT

IRC  FORWARD

16H  IFREEZ Bond

Quit

### Gaussianの場合



Easy Setup

%nprocshared 1

b3lyp / sto-3g

Charge 0 Mult. 1

Scrf

Optimize  Energy

Method

None  IR/Raman

TDDFT  NMR

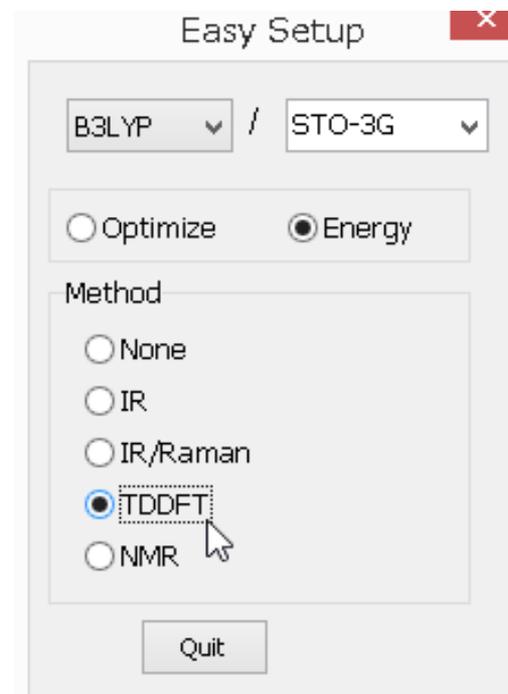
TS  IRC forward

16-2-12-1  Scan

Bond  Nstep 10 Step -0.05

Quit

### NWChemの場合



Easy Setup

B3LYP / STO-3G

Optimize  Energy

Method

None

IR

IR/Raman

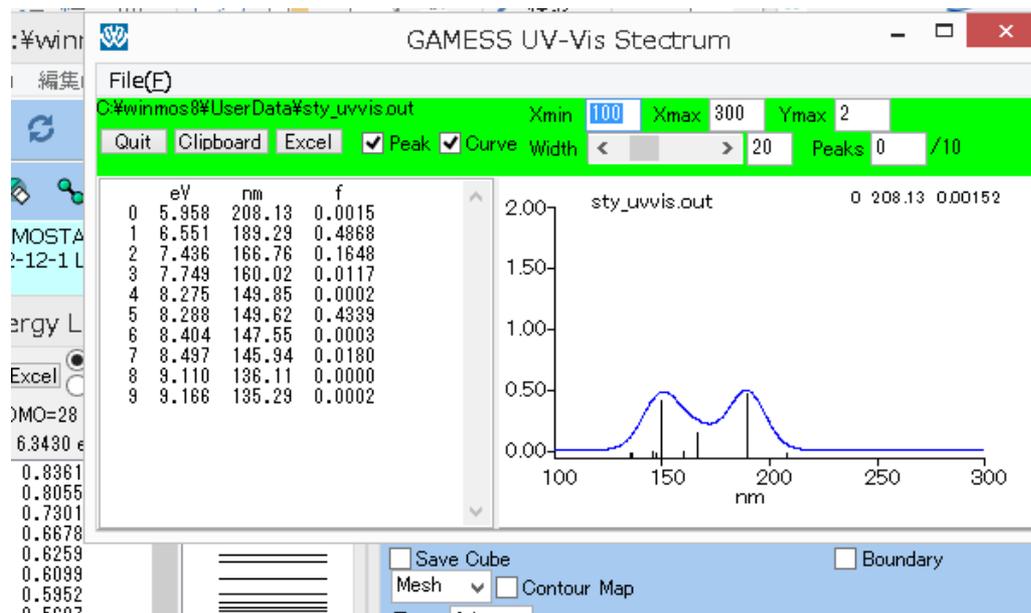
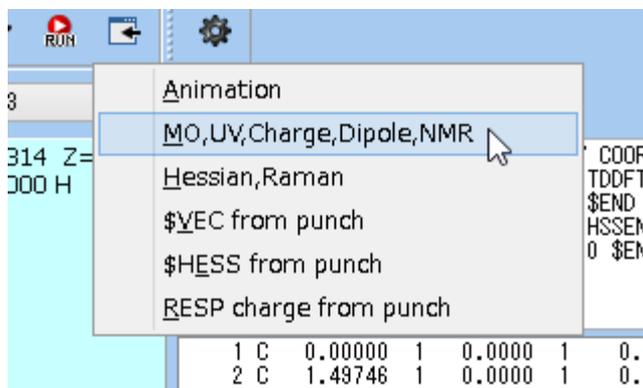
TDDFT

NMR

Quit

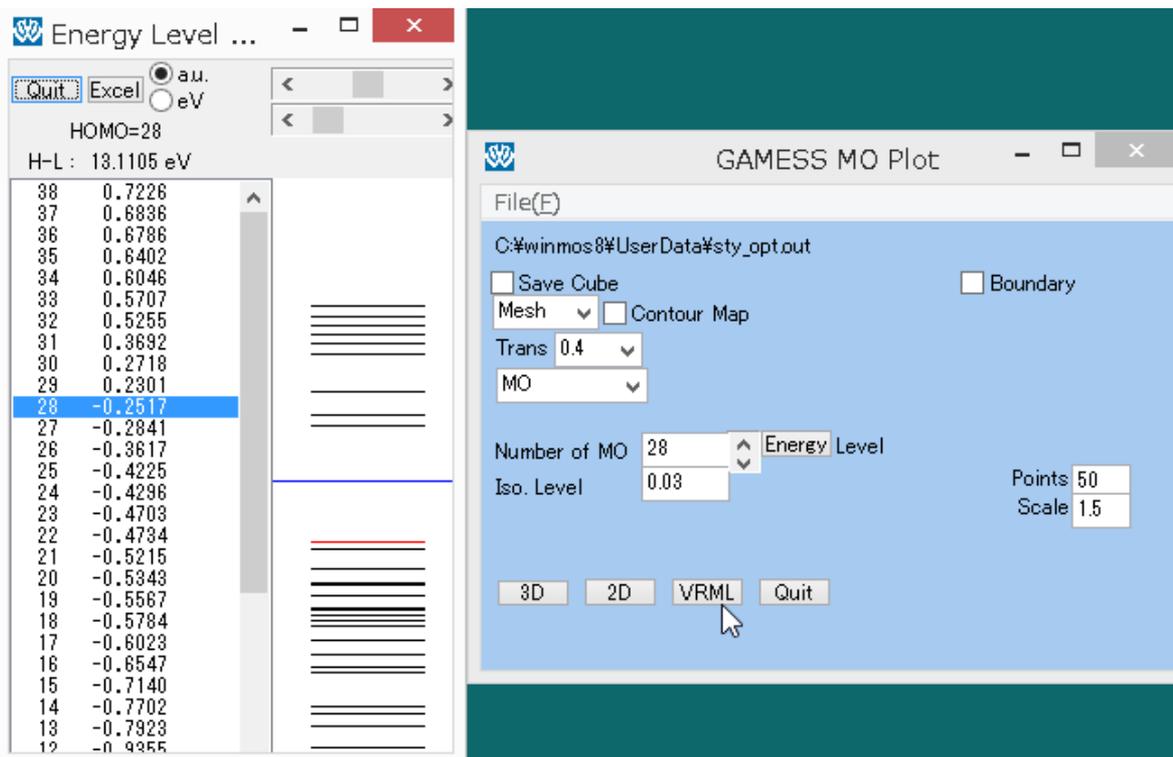
## V. UV-Visスペクトルの計算

計算終了後、[インポート]ボタンから[MO,UV,Charge,Dipole,NMR]を選択する。[開く]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と、他のウィンドウと一緒に[UV-Vis Spectrum]ウィンドウが開き、UV-Visスペクトルが描画される。



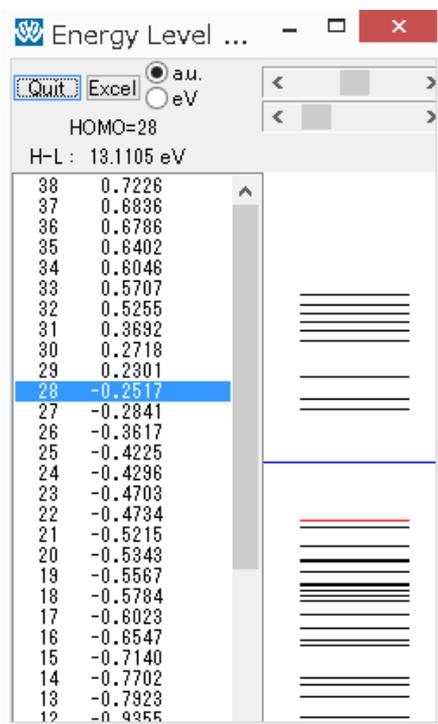
## VI. 分子軌道の表示

[インポート]ボタンから[MO,UV,Charge,Dipole,NMR]を選択する。[開く]ダイアログにて構造最適化計算のログファイル(sty\_opt.outまたはsty\_opt.log)を開く。[Energy Level Diagram]ウィンドウ(縦長のウィンドウ)と[GAMESS(Gaussian) MO Plot]ウィンドウが開く。



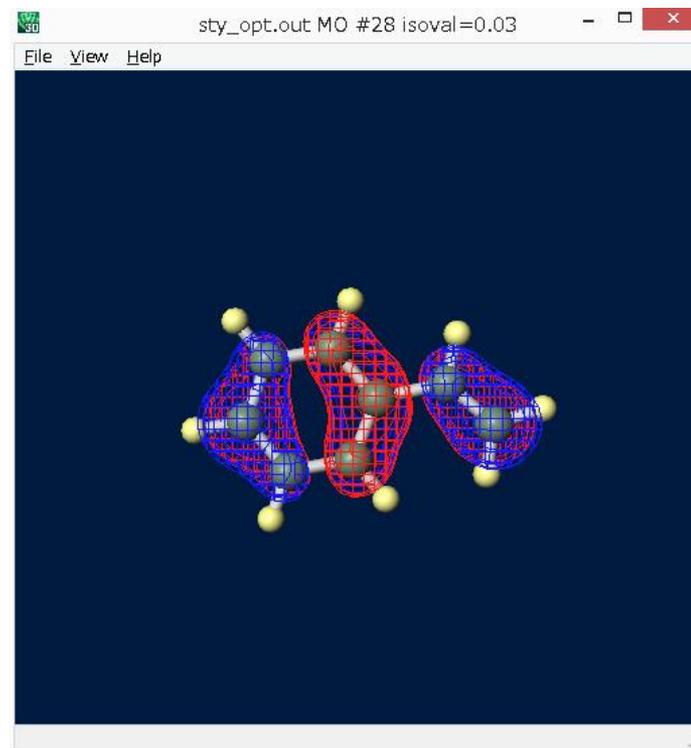
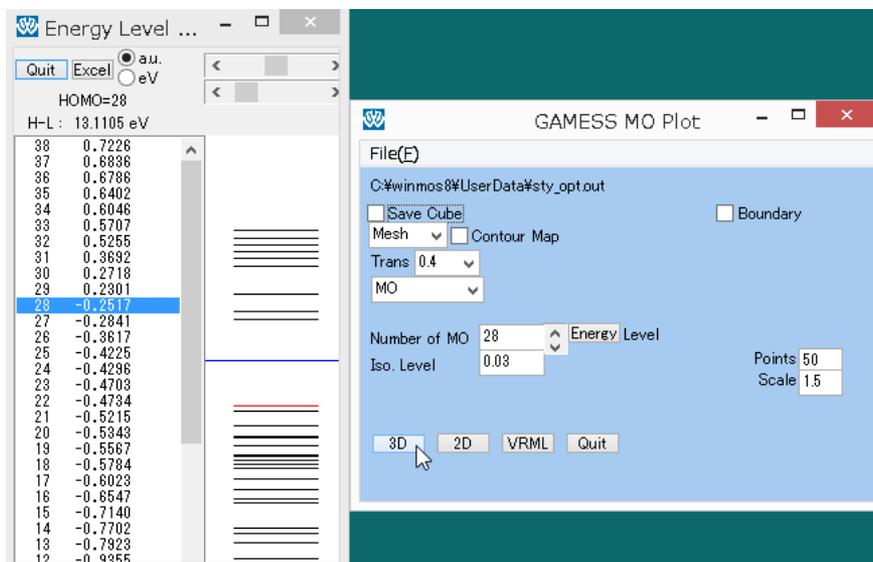
## VI. 分子軌道の表示

[Energy Level Diagram]ウィンドウには、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HOMOの軌道が選択される(図の例では28番目の軌道)。ウィンドウ上部の「HOMO=...」にはHOMOの軌道の番号、「H-L:...」にはHOMO-LUMOギャップが表示される。HOMO-LUMOギャップの単位はeV、エネルギーのリストのデフォルトの単位はa.u.であることに注意すること。



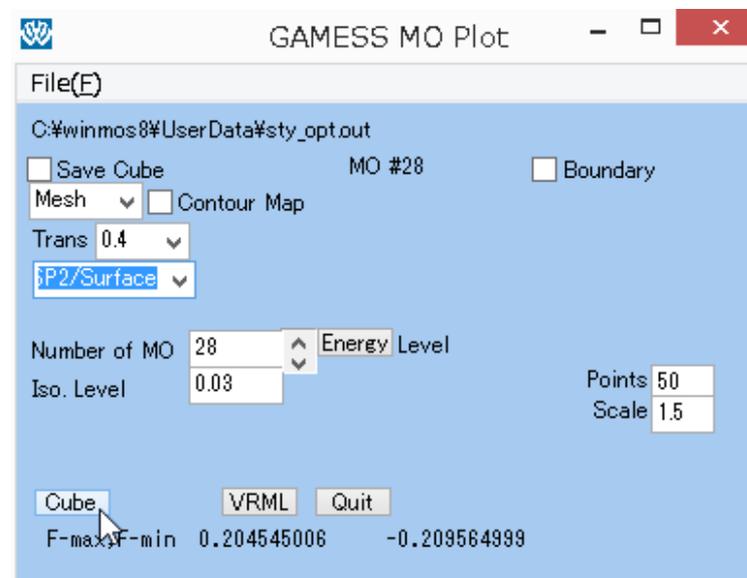
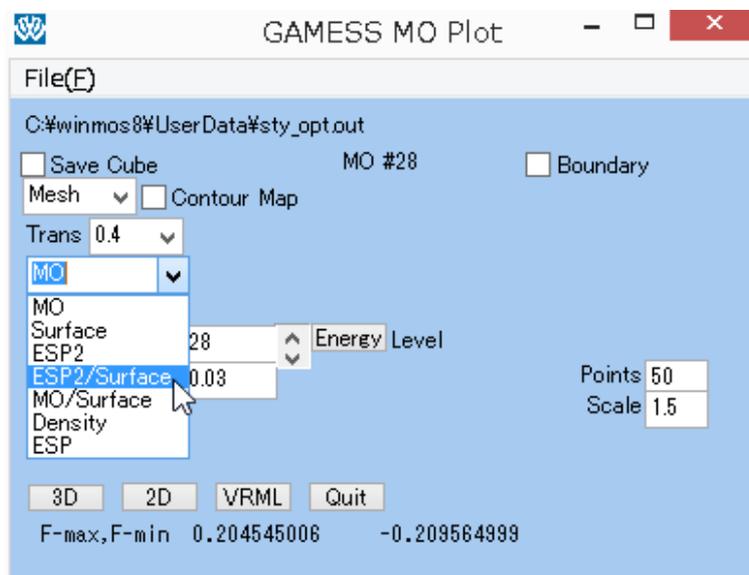
## VI. 分子軌道の表示

[MO Plot]ウインドウの左下の[3D]ボタンをクリックすると、ビューワ (winmosgl.exe) が起動し、[Energy Level Diagram]ウインドウのリストで選択された軌道(図の例では28番目)が表示される。



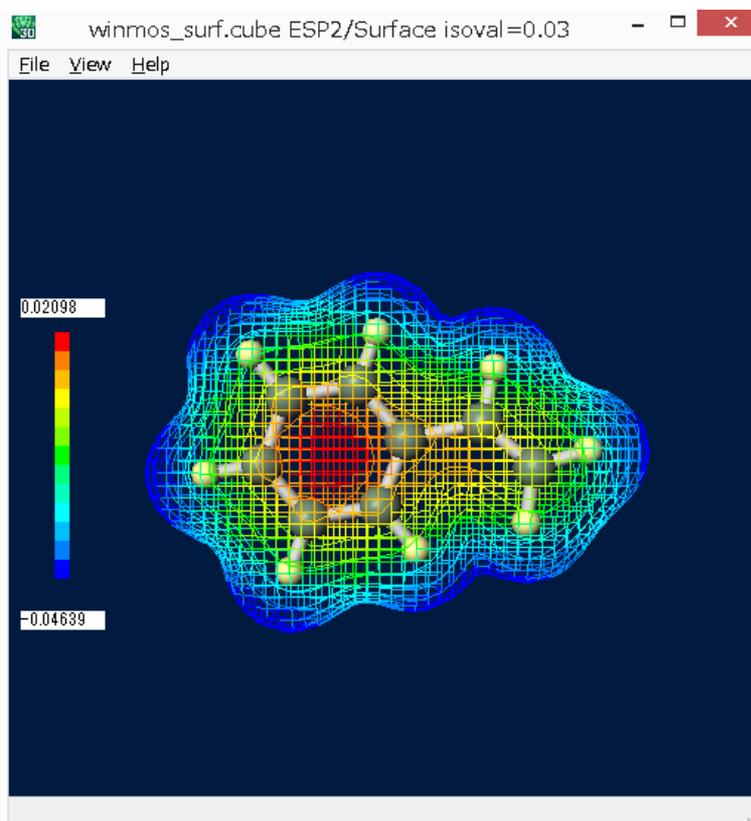
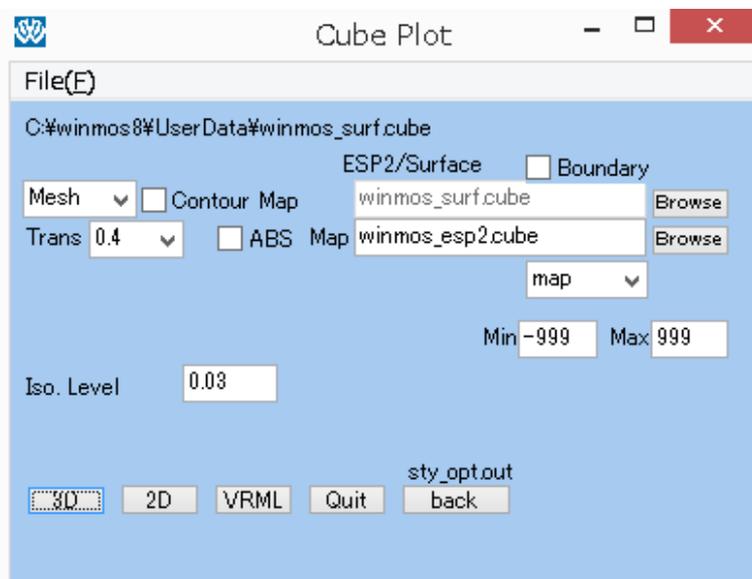
## VII. 静電ポテンシャルの表示

[MO Plot]ウインドウ中段のプルダウンで[ESP2/Surface]を選択し、左下の[Cube]ボタンを押す。



## VII. 静電ポテンシャルの表示

[Cube Plot]ウインドウが出現し、左下の[3D]ボタンを押すと、ビューワが起動し、分子表面にContourでPopulation解析をした後の点電荷から計算された静電ポテンシャルを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)



# 補足 NMR参照データの追加方法

TMSなどの分子で構造最適化、NMRスペクトルの取得を行い、Chemical Shielding Tensorsウィンドウで、参照元にしたいスペクトルを左クリックする。すると、その左上に、「13H 33.7549 ppm」などとそのスペクトルの遮蔽定数が表示される(下図参照)。そして、WinmostarインストールディレクトリのUserPref¥wm\_nmr.refを開き、「(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、Winmostarの[Ref.]でその遮蔽定数を選択できるようになる。

The screenshot shows the Chemical Shielding Tensors window on the left, displaying a peak at 33.7 ppm for 13H. The file explorer on the right shows the UserPref directory with the file 'wm\_nmr.ref' selected. The table on the right shows the contents of the 'wm\_nmr.ref' file, which lists NMR shielding data for various atoms and molecules.

ID	Element	Shielding (ppm)	Reference
1	#		NMR Shielding
2	C	200.003	"TMS HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
3	C	192.618	"TMS HF/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
4	C	182.502	"TMS B3LYP/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
5	C	199.049	"CH4 HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
6	#		
7	H	32.597	"TMS HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
8	H	32.073	"TMS HF/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
9	H	31.822	"TMS B3LYP/6-311+G(2d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d)"
0	H	32.637	"TMS HF/6-31G(d) GIAO//B3LYP/6-31G(d,p)"
1	H	32.057	"TMS HF/6-31G(d,p) GIAO//B3LYP/6-31G(d,p)"

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...](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!