

Winmostar™ チュートリアル  
GAMESS/Gaussian/NWChem  
基礎編  
V9.1.0

株式会社クロスアビリティ

2019年8月20日

# 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。
- 通常の研究では、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宜上UV-Visの算出のみHFではなくDFTを使用します。
- 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/manual\\_jp/installation/GAMESS\\_install\\_manual\\_jp\\_win.pdf](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。

- 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

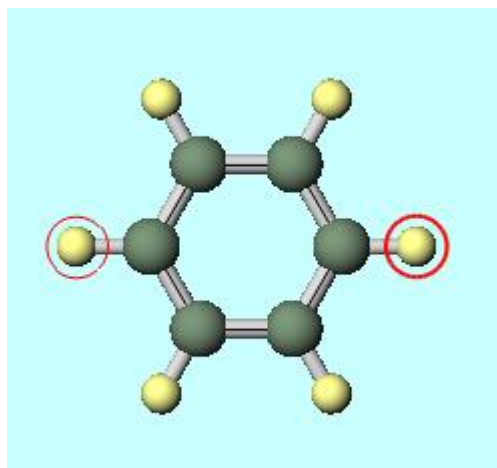
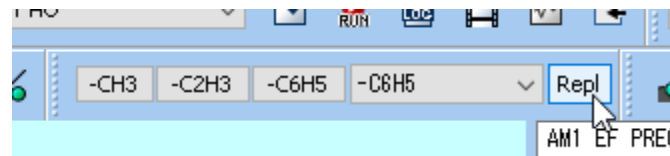
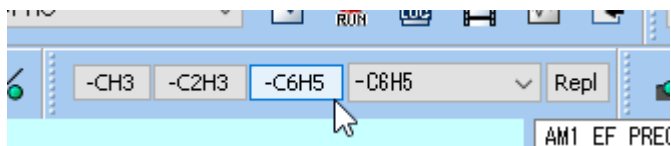
NWChemのインストールマニュアルページ

[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。

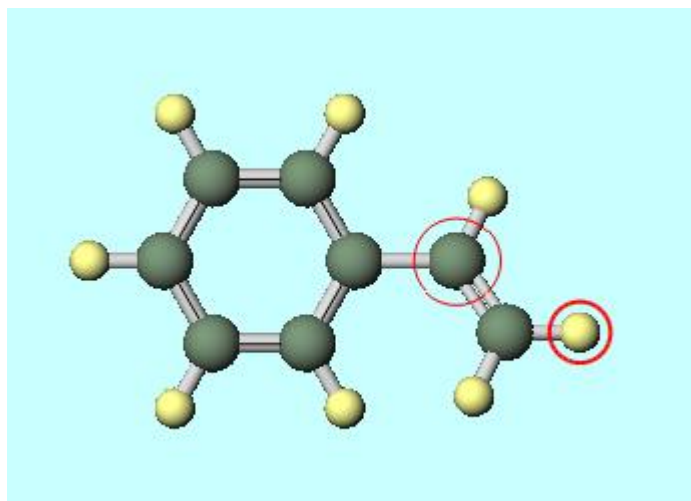
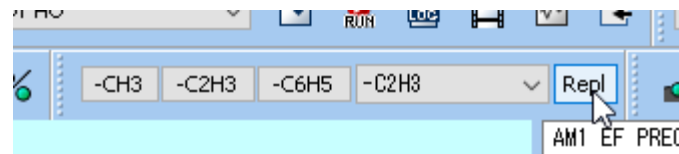
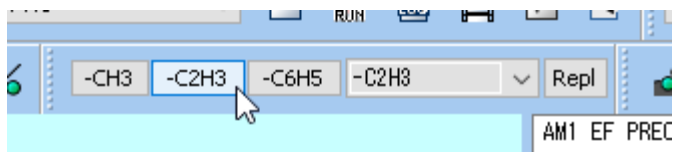
# I. モデルの作成

1. 画面上部の**-C6H5**ボタンをクリックする。
2. **Repl**ボタンをクリックするとベンゼン分子が作成される。



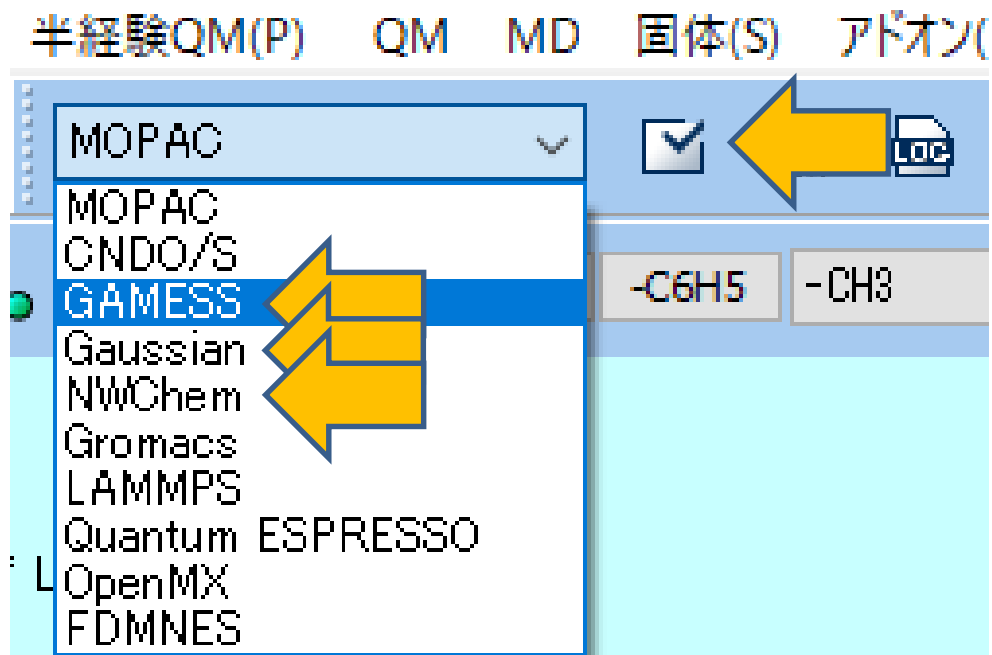
# I. モデルの作成

1. **-C2H3**ボタンをクリックする。
2. **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

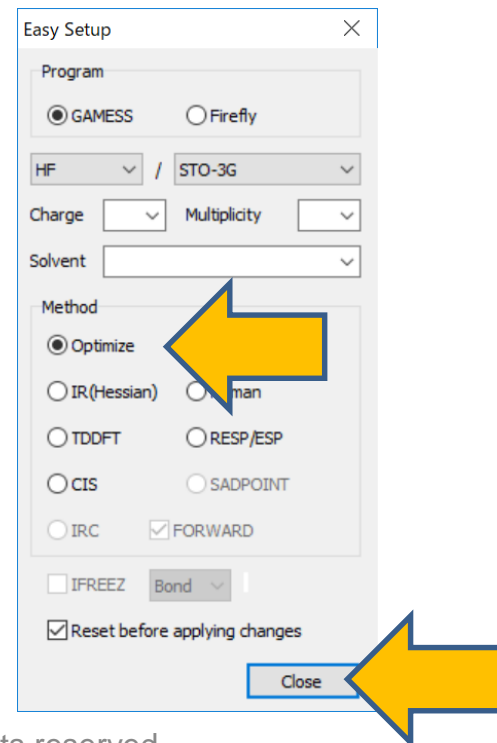
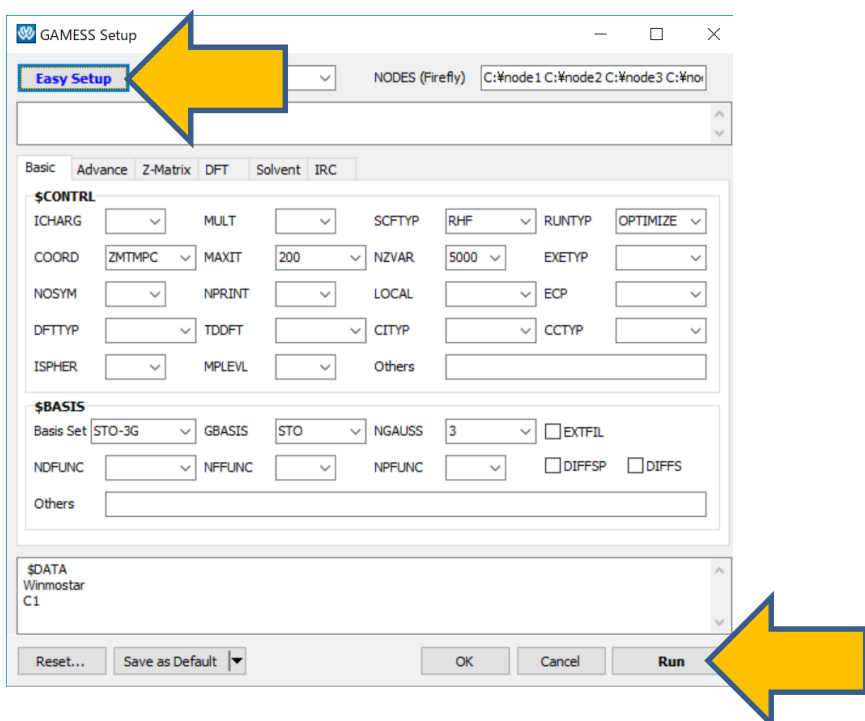
1. ソルバー一覧から**GAMESS**、**Gaussian**または**NWChem**のいずれかを選択する。
2.  (キーワード設定) をクリックする。



## II. 構造最適化計算

ソルバー一覧で**GAMESS**を選択した場合

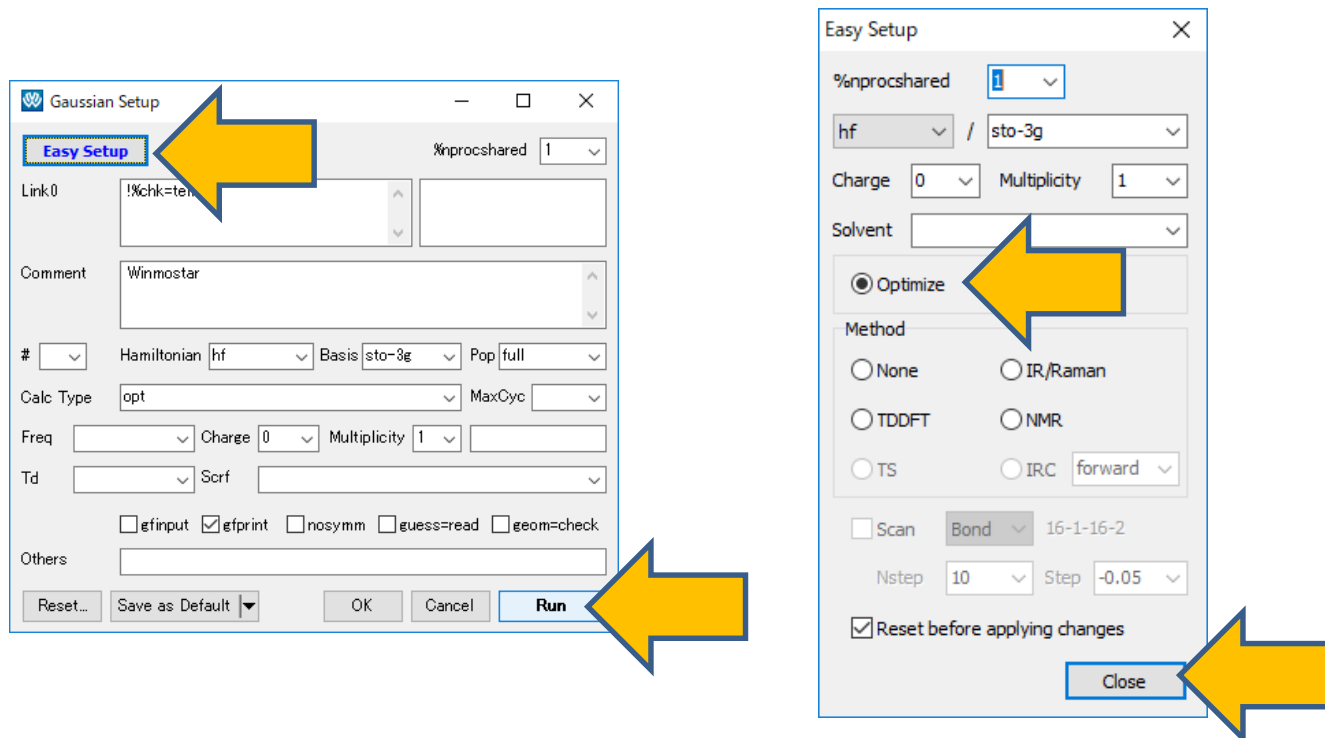
1. GAMESS Setupウインドウ上部の**EasySetup**をクリックする。
2. **Easy Setup**ウインドウで**Method**の**Optimize**を選択する。
3. その下の**Close**をクリックする。
4. その後、**GAMESS Setup**ウインドウ下部の**Run**をクリックする。



## 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** ウィンドウ上部の **Easy Setup** をクリックする。
2. **Easy Setup** ウィンドウで **Method** の **Optimize** を選択する。
3. その下の **Close** をクリックする。
4. その後、**Gaussian Setup** ウィンドウ下部の **Run** をクリックする。

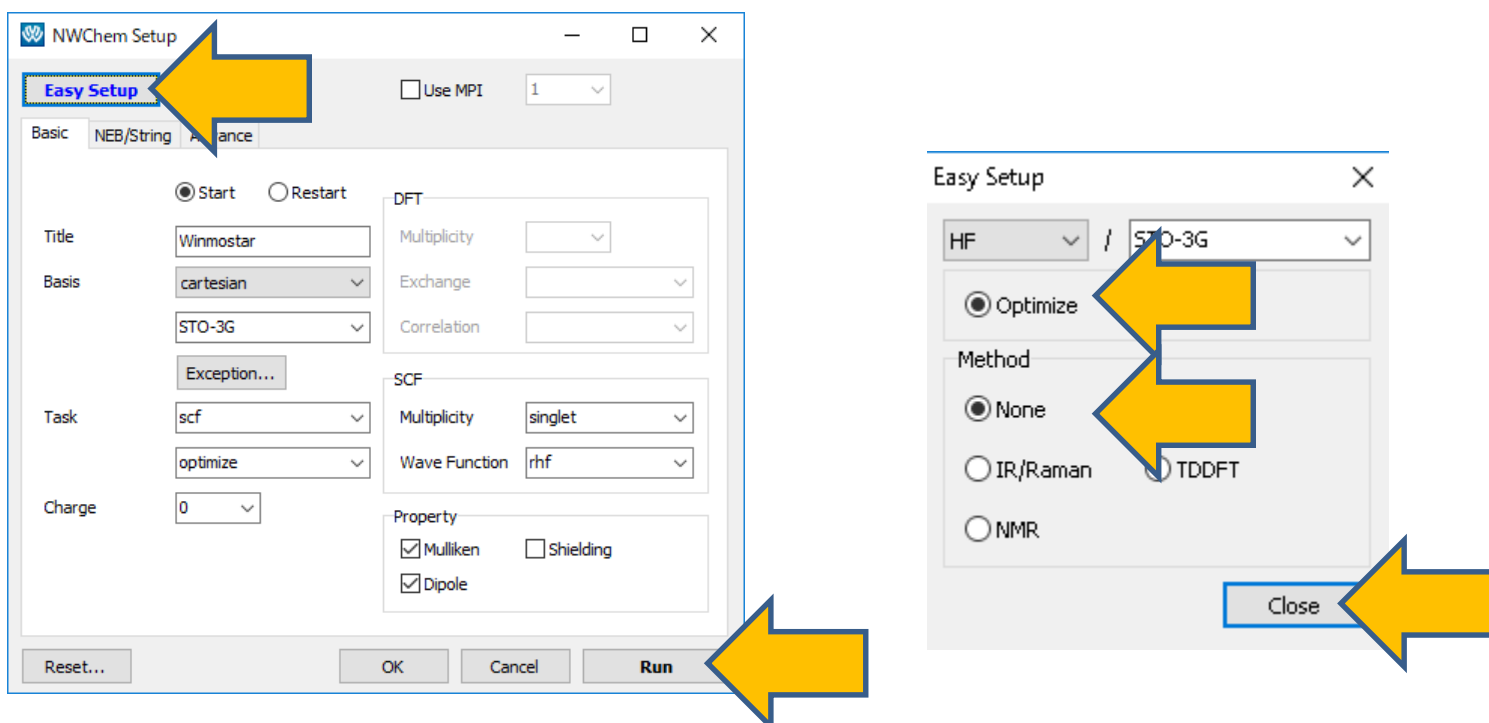




## II. 構造最適化計算

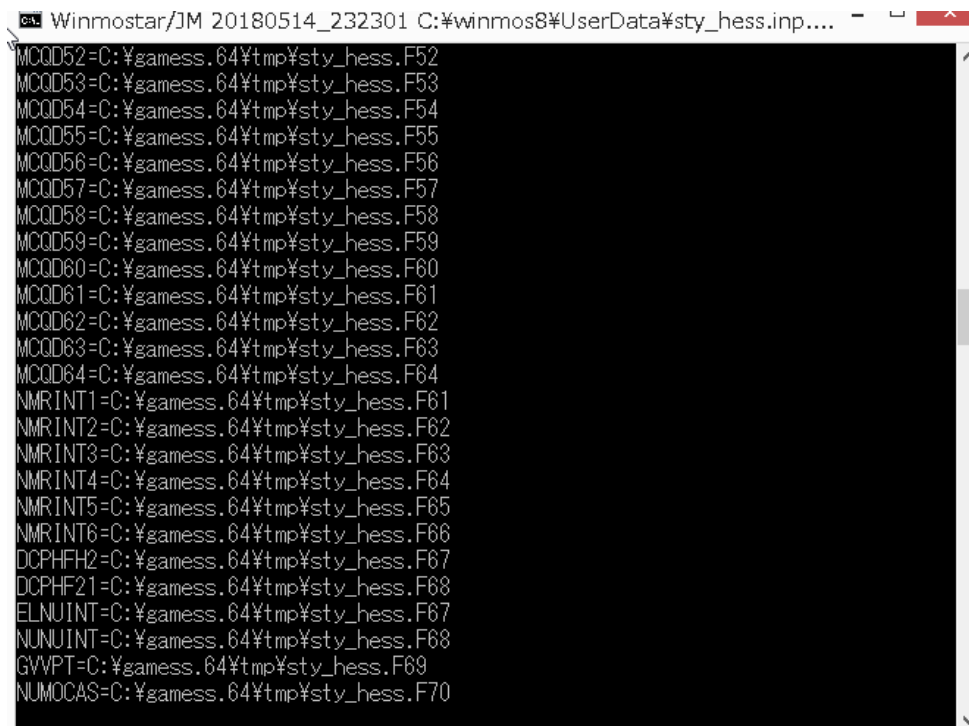
ソルバー一覧でNWChemを選択した場合

1. **NWChem Setup**ウインドウ上部の**EasySetup**をクリックする。
2. **Easy Setup**ウインドウで**Optimize**を選択し、**Method**から**None**を選択する。
3. その下の**Close**をクリックする。
4. その後、**NWChem Setup**ウインドウ下部の**Run**をクリックする。



## 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「**sty\_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ウィンドウが  
起動して計算が開始される。

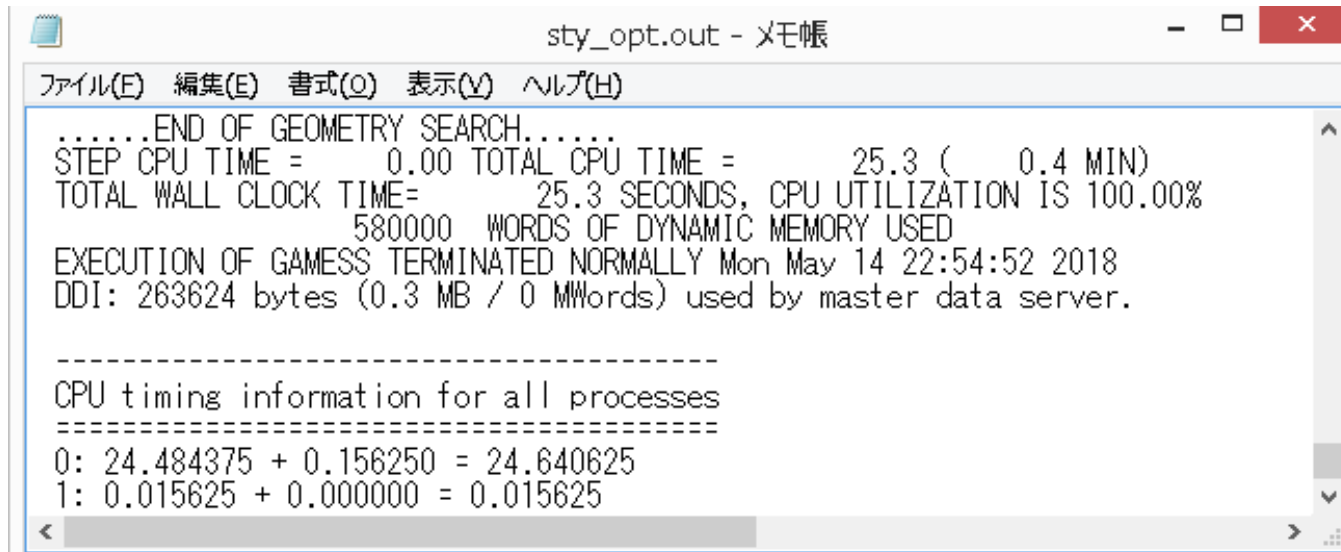


```
Winmostar/JM 20180514_232301 C:\winmos8\UserData\sty_hess.inp....
MCQD52=C:\games.64\tmp\sty_hess.F52
MCQD53=C:\games.64\tmp\sty_hess.F53
MCQD54=C:\games.64\tmp\sty_hess.F54
MCQD55=C:\games.64\tmp\sty_hess.F55
MCQD56=C:\games.64\tmp\sty_hess.F56
MCQD57=C:\games.64\tmp\sty_hess.F57
MCQD58=C:\games.64\tmp\sty_hess.F58
MCQD59=C:\games.64\tmp\sty_hess.F59
MCQD60=C:\games.64\tmp\sty_hess.F60
MCQD61=C:\games.64\tmp\sty_hess.F61
MCQD62=C:\games.64\tmp\sty_hess.F62
MCQD63=C:\games.64\tmp\sty_hess.F63
MCQD64=C:\games.64\tmp\sty_hess.F64
NMRINT1=C:\games.64\tmp\sty_hess.F61
NMRINT2=C:\games.64\tmp\sty_hess.F62
NMRINT3=C:\games.64\tmp\sty_hess.F63
NMRINT4=C:\games.64\tmp\sty_hess.F64
NMRINT5=C:\games.64\tmp\sty_hess.F65
NMRINT6=C:\games.64\tmp\sty_hess.F66
DCPHF2=C:\games.64\tmp\sty_hess.F67
DCPHF21=C:\games.64\tmp\sty_hess.F68
ELNUIINT=C:\games.64\tmp\sty_hess.F67
NUNUIINT=C:\games.64\tmp\sty_hess.F68
GVVPT=C:\games.64\tmp\sty_hess.F69
NUMOCAS=C:\games.64\tmp\sty_hess.F70
```

## II. 構造最適化計算

### ソルバー一覧で**GAMESS**を選択した場合

1. 計算終了後、メインウィンドウにて、 (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。




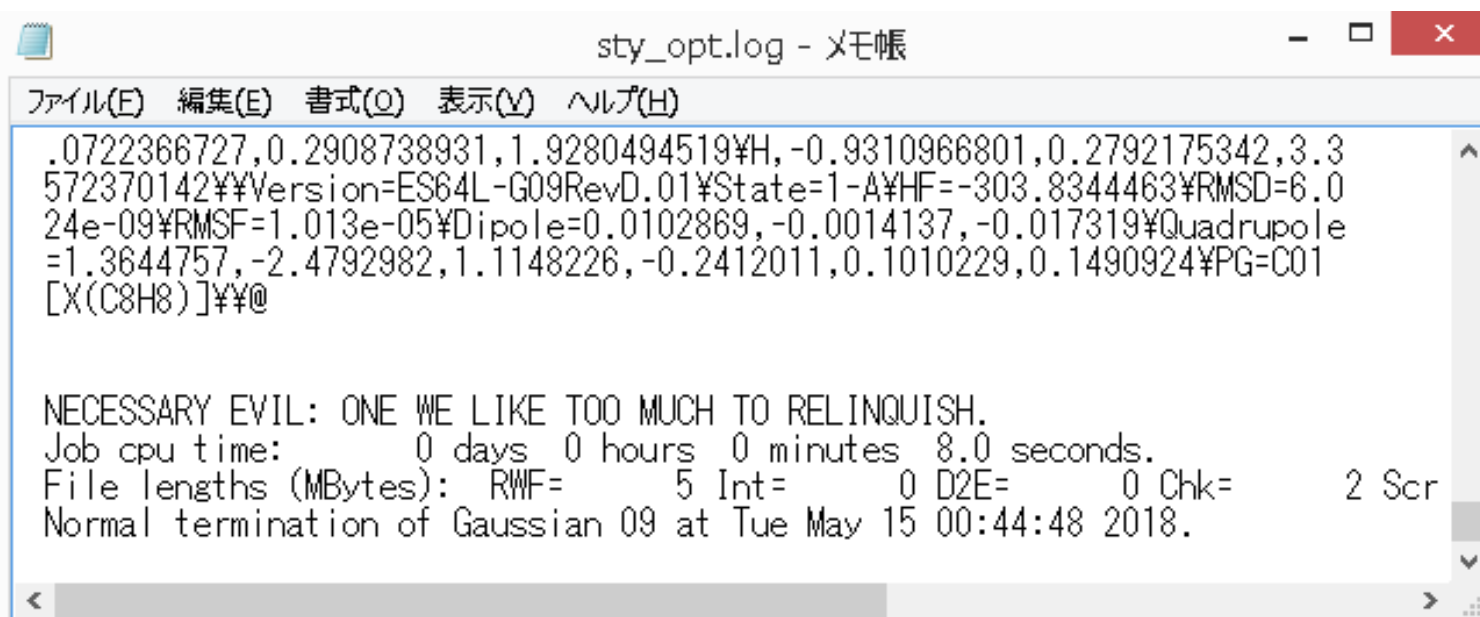
```
sty_opt.out - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
.....END OF GEOMETRY SEARCH.....
STEP CPU TIME =    0.00 TOTAL CPU TIME =    25.3 (    0.4 MIN)
TOTAL WALL CLOCK TIME=    25.3 SECONDS, CPU UTILIZATION IS 100.00%
                    580000 WORDS OF DYNAMIC MEMORY USED
EXECUTION OF GAMESS TERMINATED NORMALLY Mon May 14 22:54:52 2018
DDI: 263624 bytes (0.3 MB / 0 MWords) used by master data server.

-----
CPU timing information for all processes
-----
0: 24.484375 + 0.156250 = 24.640625
1: 0.015625 + 0.000000 = 0.015625
```

## 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、メインウィンドウにて、 (ログを表示)
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 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。




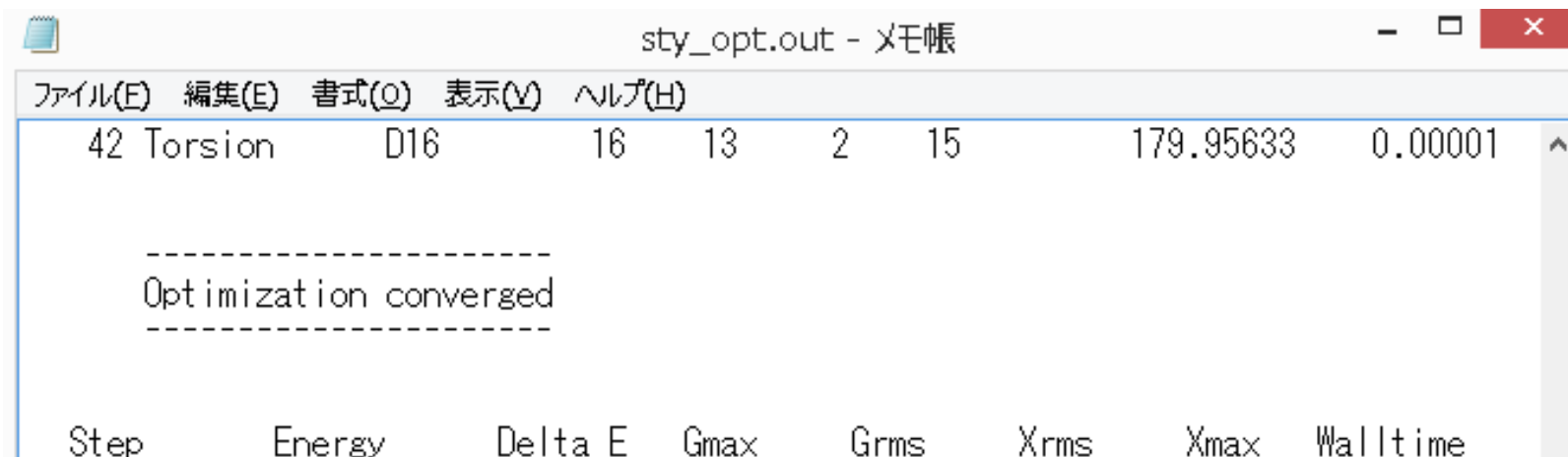
```
sty_opt.log - メモ帳
ファイル(E) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
.0722366727,0.2908738931,1.9280494519¥H,-0.9310966801,0.2792175342,3.3
572370142¥¥Version=ES64L-G09RevD.01¥State=1-A¥HF=-303.8344463¥RMSD=6.0
24e-09¥RMSF=1.013e-05¥Dipole=0.0102869,-0.0014137,-0.017319¥Quadrupole
=1.3644757,-2.4792982,1.1148226,-0.2412011,0.1010229,0.1490924¥PG=C01
[X(C8H8)]¥¥@

NECESSARY EVIL: ONE WE LIKE TOO MUCH TO RELINQUISH.
Job cpu time:      0 days 0 hours 0 minutes 8.0 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=      5 Int=      0 D2E=      0 Chk=      2 Scr
Normal termination of Gaussian 09 at Tue May 15 00:44:48 2018.
```

## II. 構造最適化計算

### ソルバー一覧でNWChemを選択した場合

1. 計算終了後、メインウィンドウにて、 (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。




sty\_opt.out - メモ帳

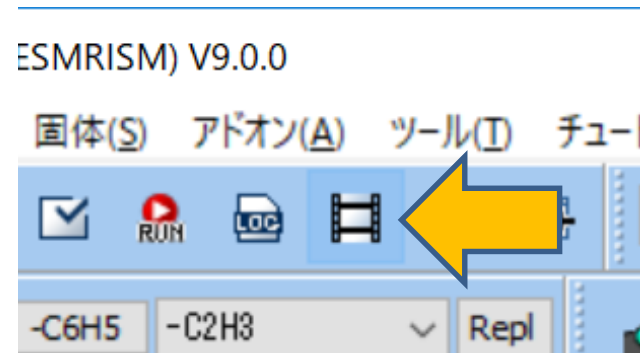
ファイル(E) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

Step	Energy	Delta E	Gmax	Grms	Xrms	Xmax	Walltime
42	Torsion	D16	16	13	2	15	179.95633 0.00001


-----  
 Optimization converged  
 -----

## II. 構造最適化計算

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。
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。

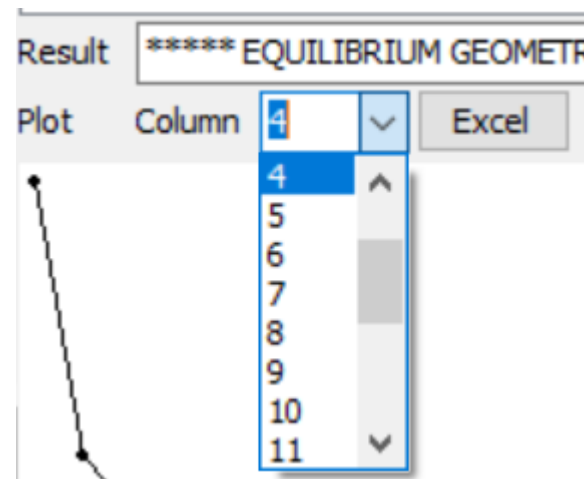
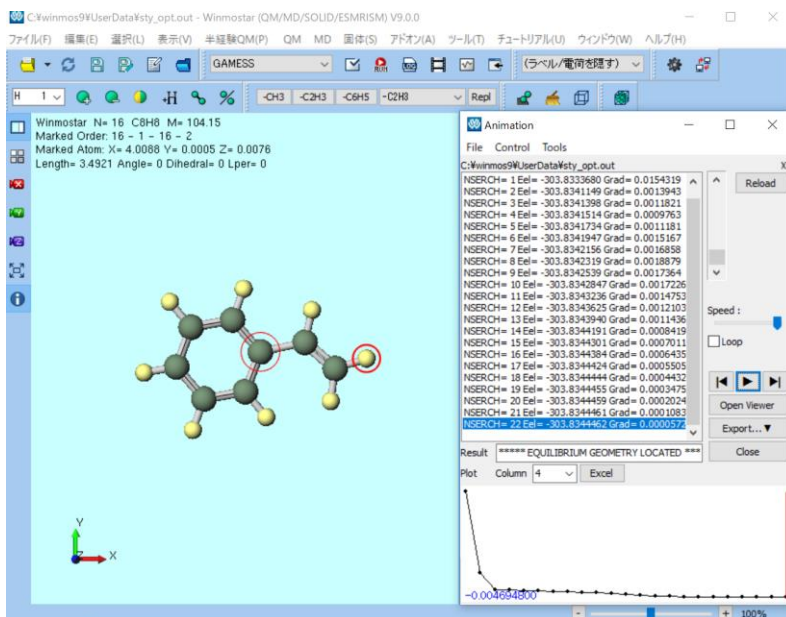


## II. 構造最適化計算

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)。

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。

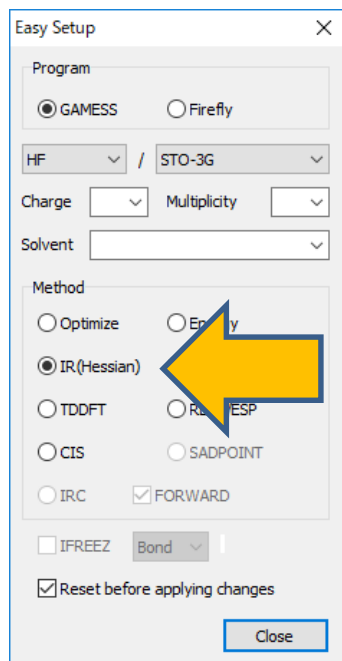
ここでは最後に、そのまま最終フレームの構造が選択・表示された状態で、Animationウインドウを閉じる。



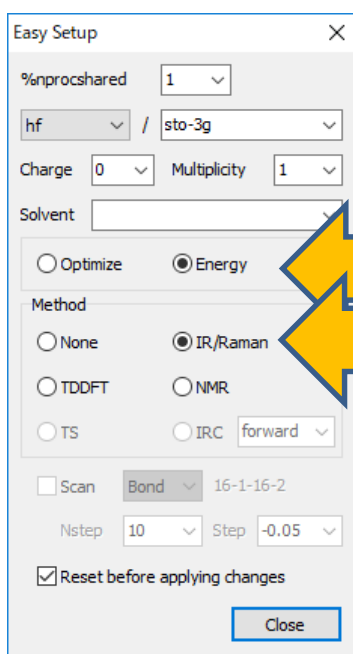
### III. 振動スペクトルの計算

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(Hessian)**を選択し、**Close**の後**Run**をクリックする。  
**Gaussian**の場合は、**Energy**と**IR/Raman**を選択し、**Close**の後**Run**をクリックする。  
**NWChem**の場合は、**Energy**と**IR/Raman**を選択し、**Close**の後**Run**をクリックする。
3. **sty\_hess**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。

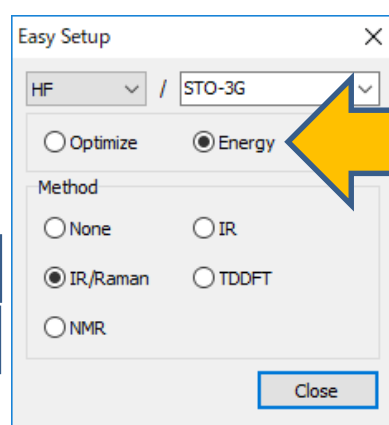
GAMESSの場合



Gaussianの場合




NWChemの場合

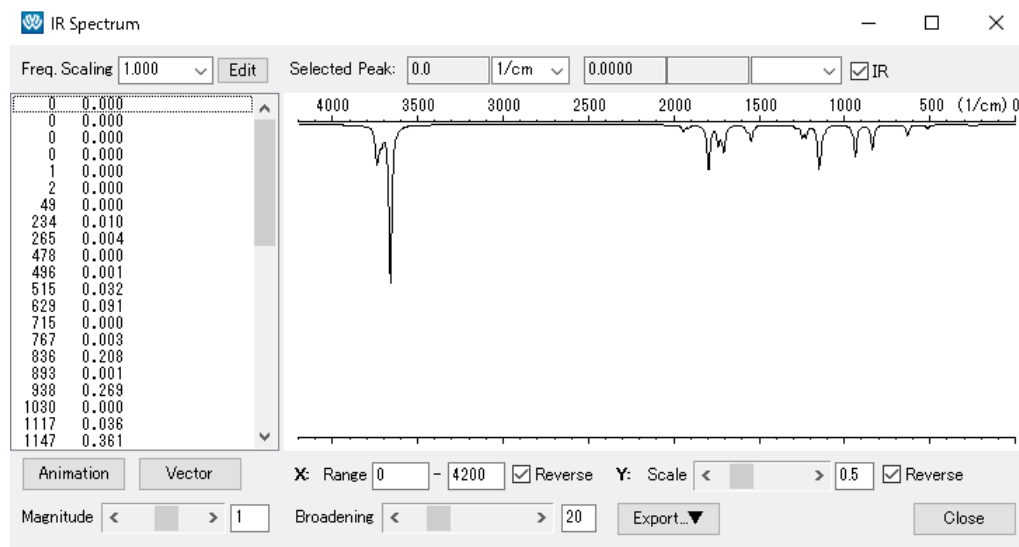
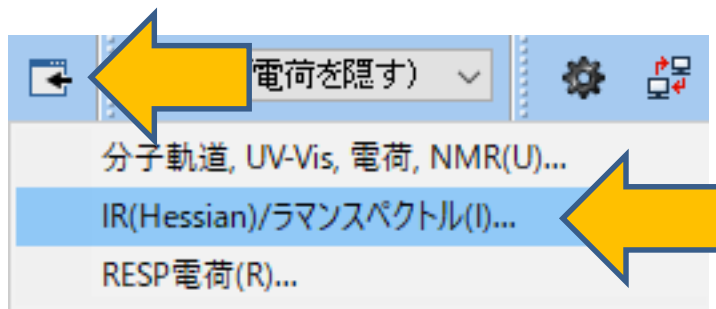


※NWChemの場合は、この計算に30分程度時間が掛かることがある。



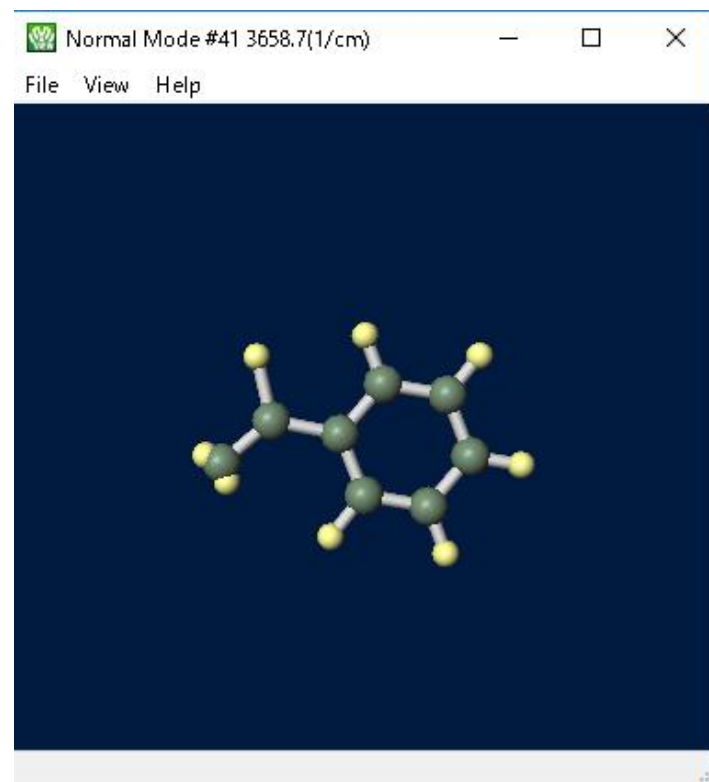
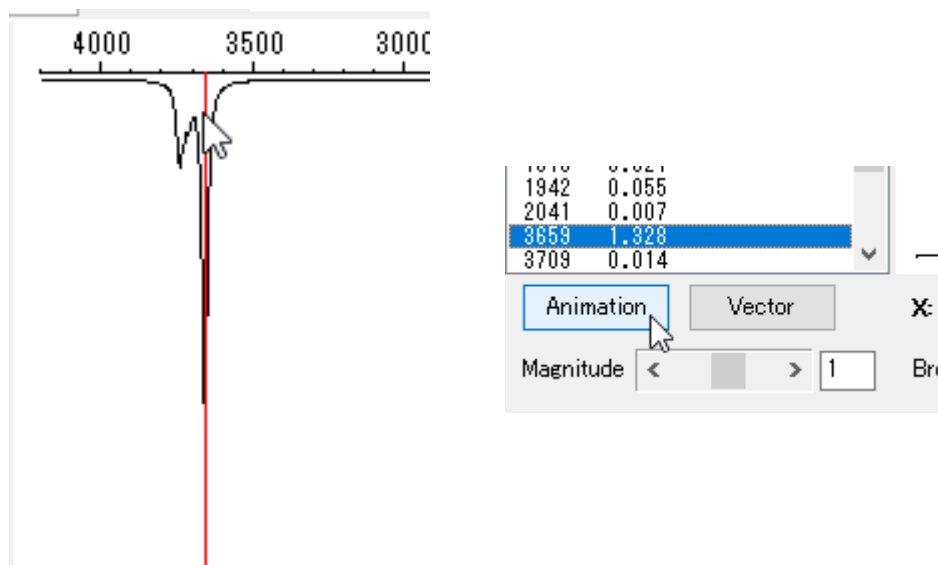
### III. 振動スペクトルの計算

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。
3. 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**Freq Scaling**で選択する。




## III. 振動スペクトルの計算

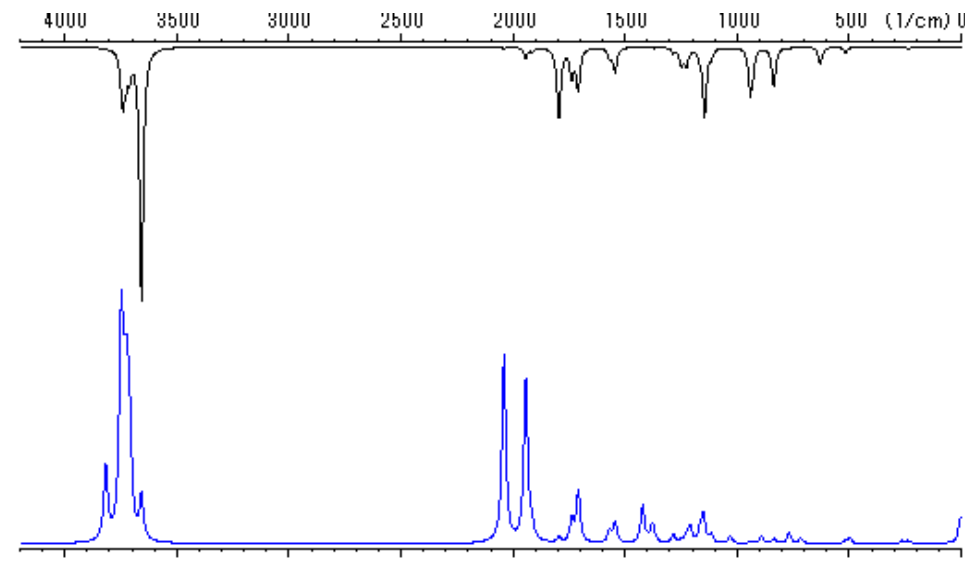
1. **IR Spectrum**ウインドウ上で、 $3650\text{ cm}^{-1}$ 付近をクリックすると、赤線でスペクトルが選択される。
2. その後**Animation**ボタンをクリックすると、**Winmostar Viewer**が起動し、 $3650\text{ cm}^{-1}$ 付近のスペクトルの振動方向に原子を動かしたアニメーションが出現する。



## 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

1. IR Spectrumウィンドウを閉じずに、キーワード設定ウィンドウのEasySetupでRamanを選択し、Close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sty\_ramanなどIR(Hessian)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) | IR (Hessian)/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。

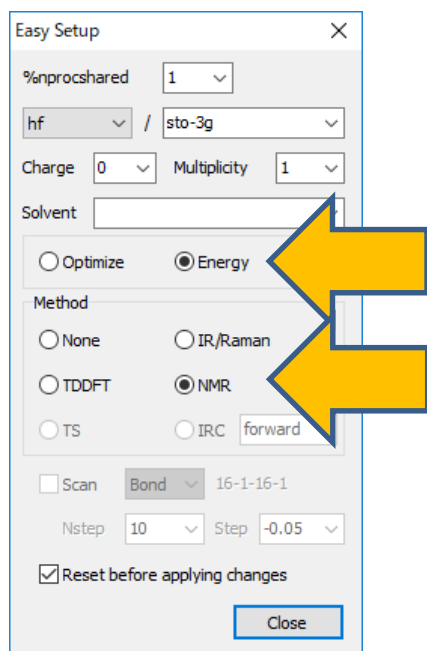


## IV. NMRスペクトルの計算

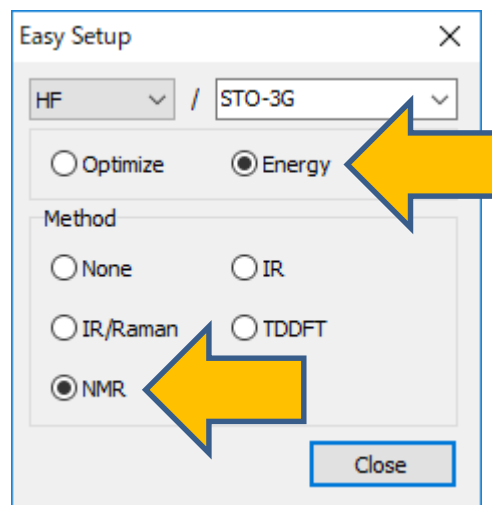
(GAMESSの場合は「V. UV-Visスペクトルの計算」に進む。)

1. IR Spectrumウインドウを閉じる。
2. 再びキーワード設定 | EasySetupを開き、EnergyとNMRを選択し、Closeの後Runをクリックする。sty\_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

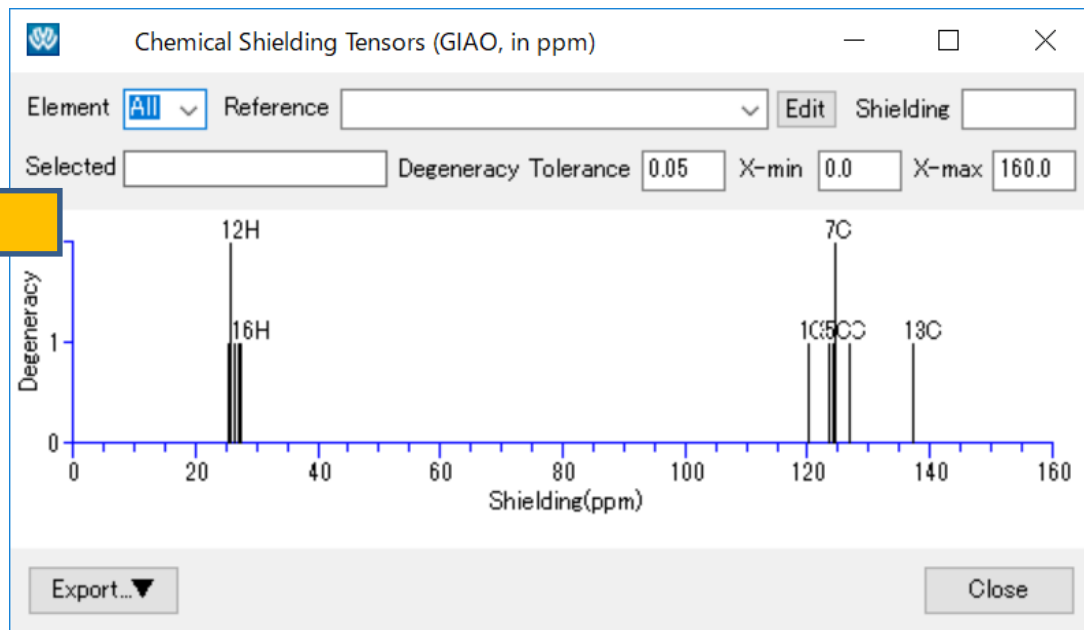
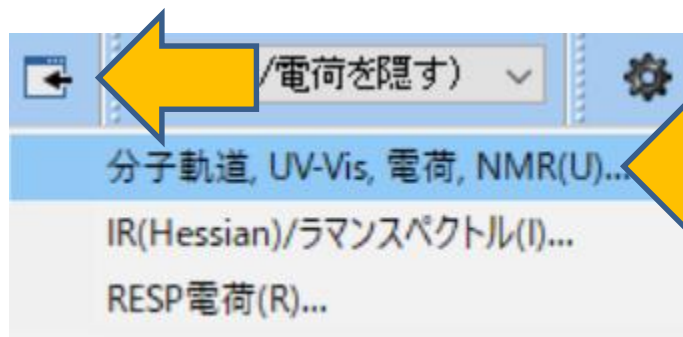


NWChemの場合



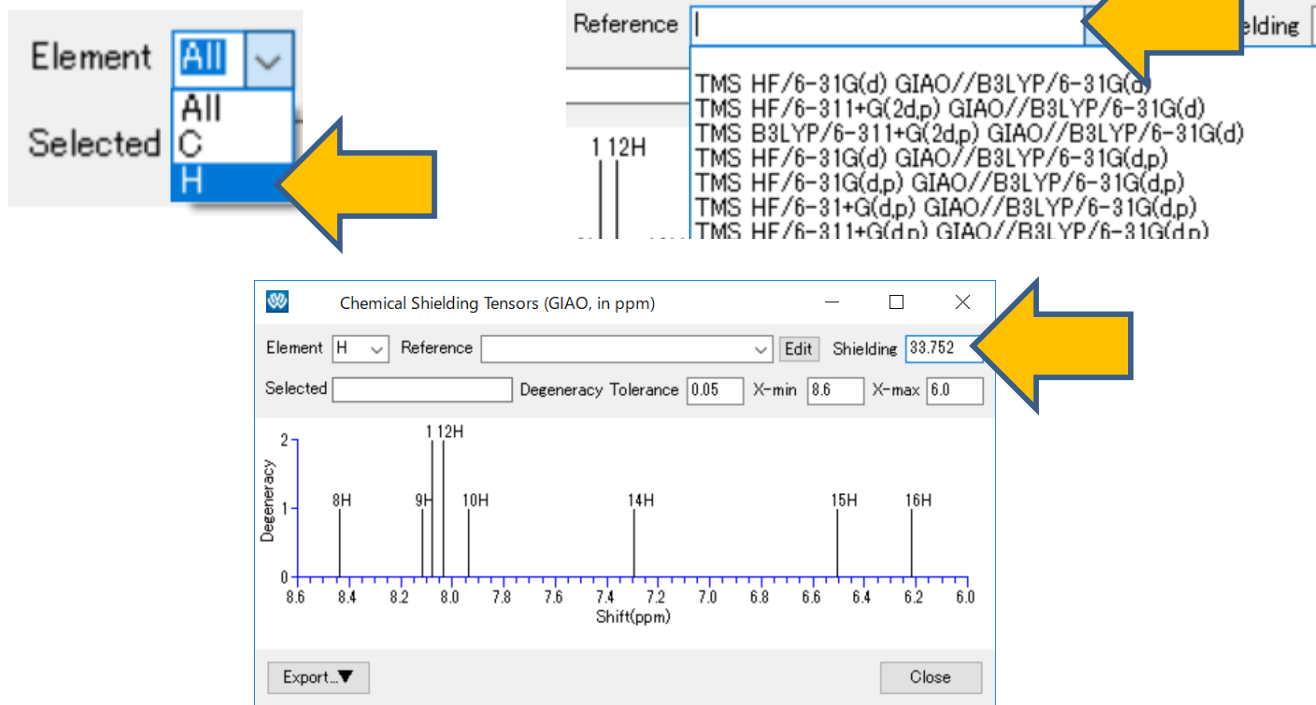
## IV. NMRスペクトルの計算

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。  
他のウィンドウと一緒に**Chemical Shielding Tensors** 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

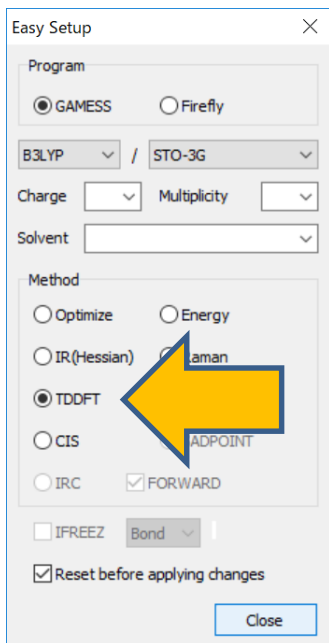
1. 元素ごとに表示する場合は**Element**で元素を選択する。
2. **Reference**で参照データを選択するか、**Shielding**に遮蔽定数を入力すると、横軸が変化し化学シフトが表示される。  
参照データを追加する方法は、本チュートリアル<sup>1</sup>の補足に示す。  
確認後、同ウィンドウと**MO Plot**ウィンドウを閉じる。



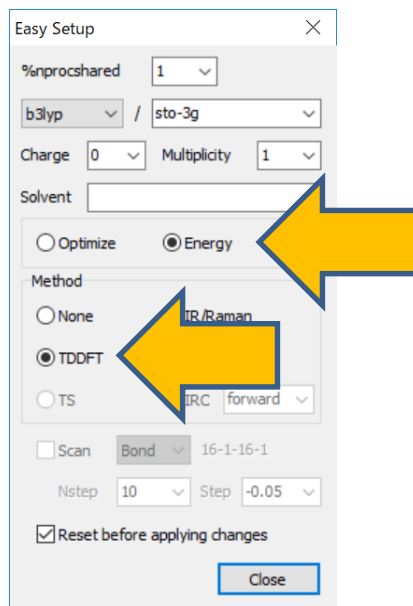
## V. UV-Visスペクトルの計算

1. 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**を選択する。
2. **Close**の後**Run**をクリックする。
3. ファイル名を**sty\_uvvis**指定し計算を開始する。

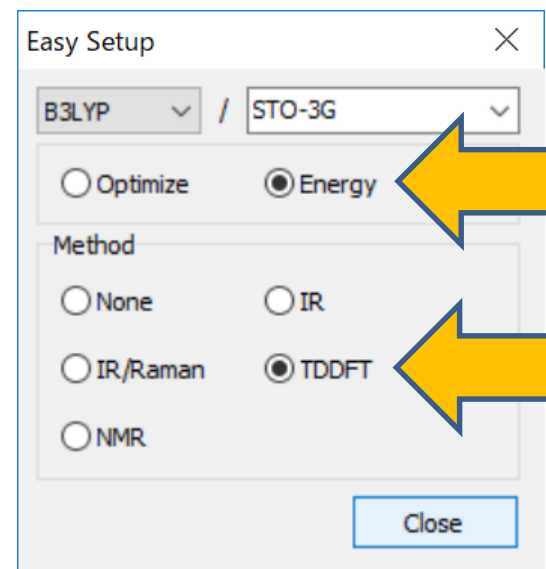
GAMESSの場合




Gaussianの場合

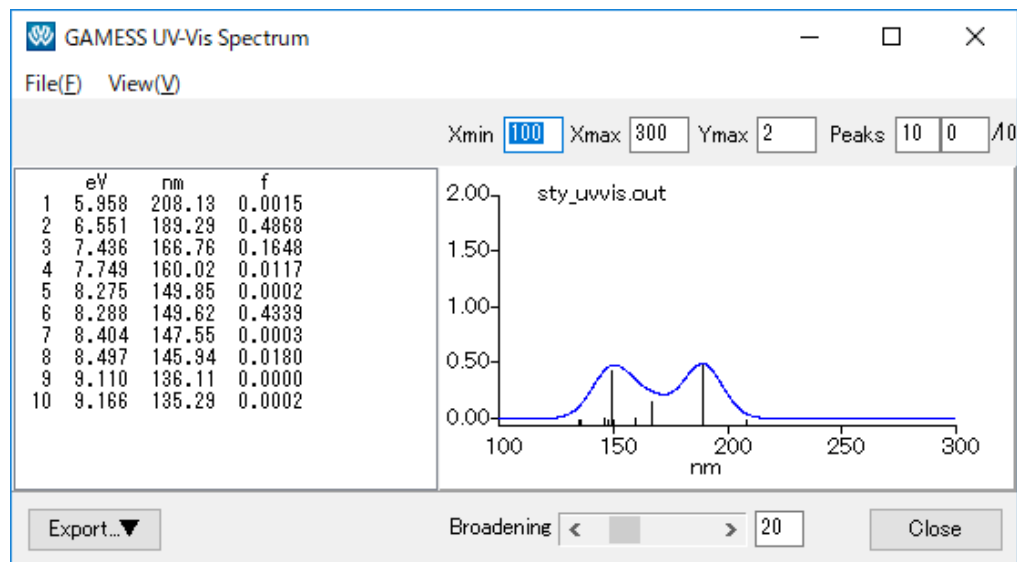
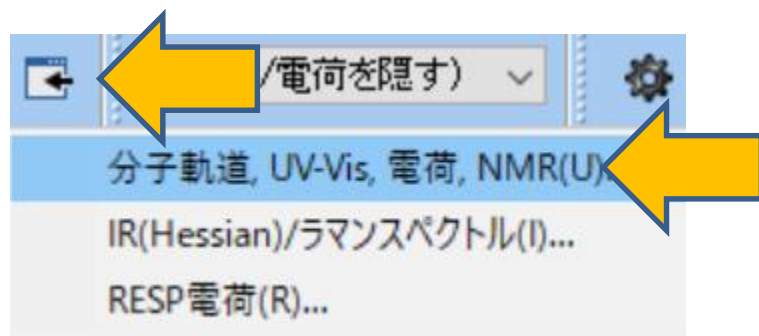


NWChemの場合




## V. UV-Visスペクトルの計算

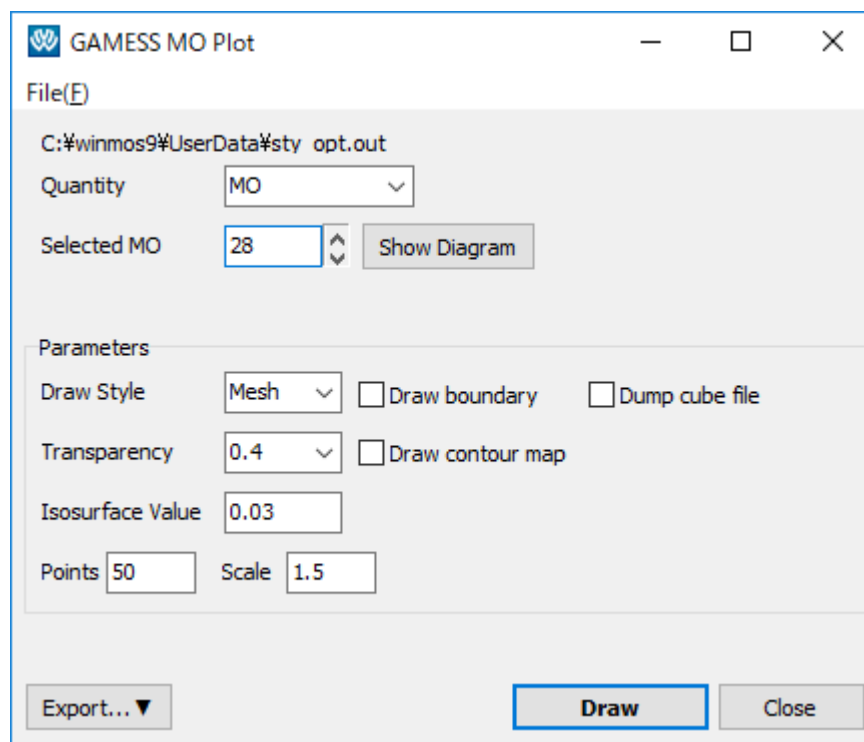
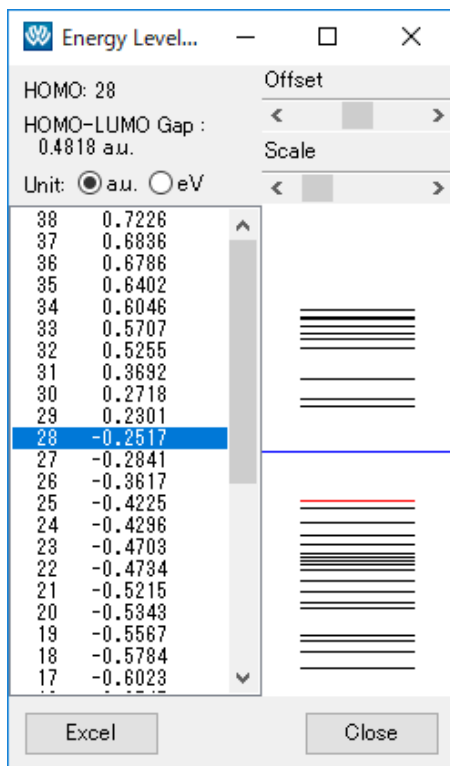
1. 計算終了後、 (結果解析)ボタンから分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMRを選択する。
2. ダイアログにてデフォルトで選択されるファイルを開く。  
他のウィンドウと一緒にUV-Vis Spectrumウィンドウが開き、UV-Visスペクトルが描画される。





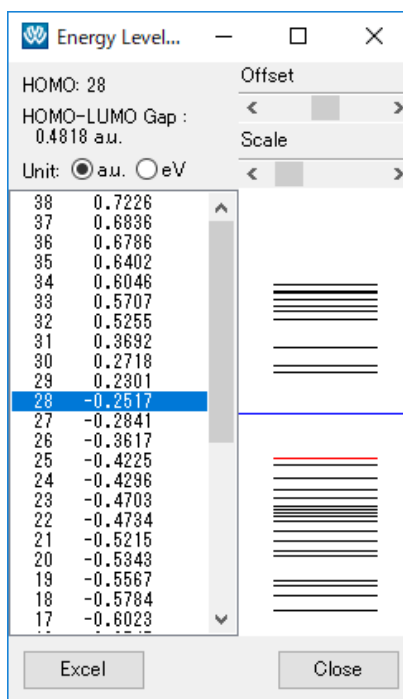
## VI. 分子軌道の表示

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(sty\_opt.outまたはsty\_opt.log)を開く。
3. **Energy Level Diagram**ウインドウ(縦長のウインドウ)と**GAMESS(Gaussian) MO Plot**ウインドウが開く。



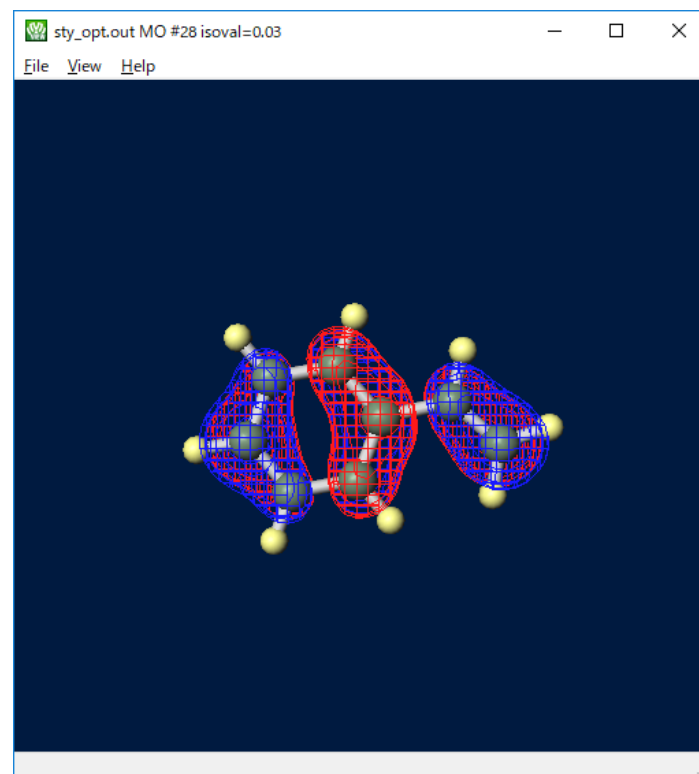
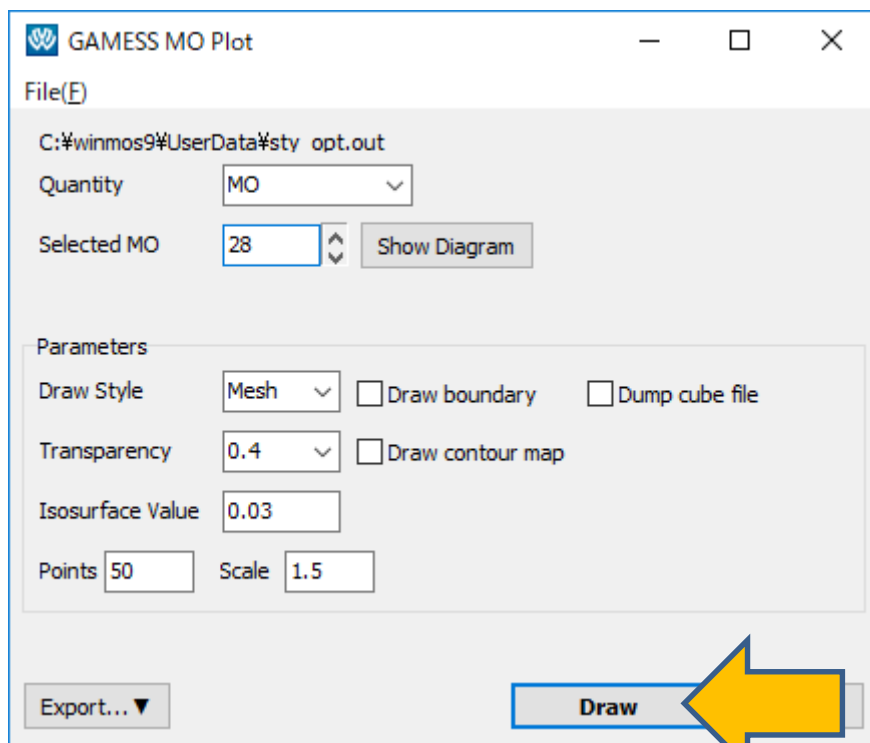
## VI. 分子軌道の表示

**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)。ウィンドウ上部には**HOMOの軌道の番号**、**HOMO-LUMO Gap**が表示される。



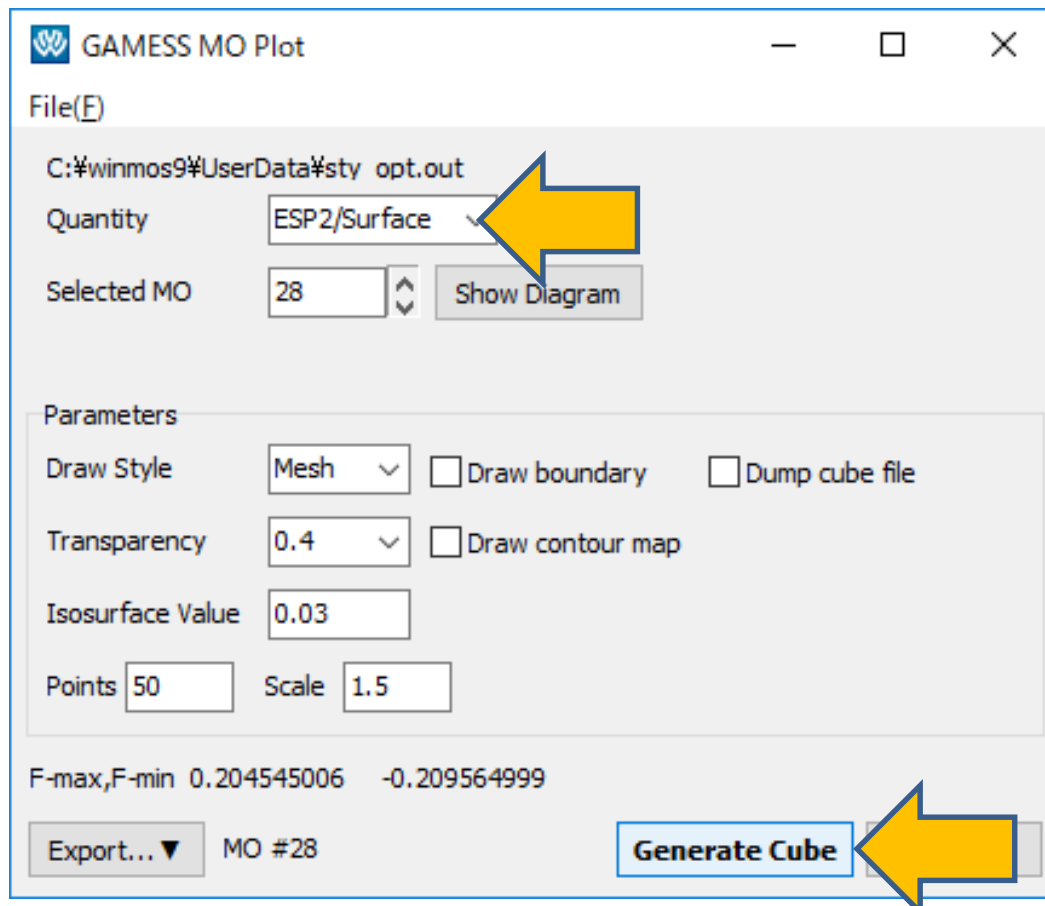
## VI. 分子軌道の表示

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、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。



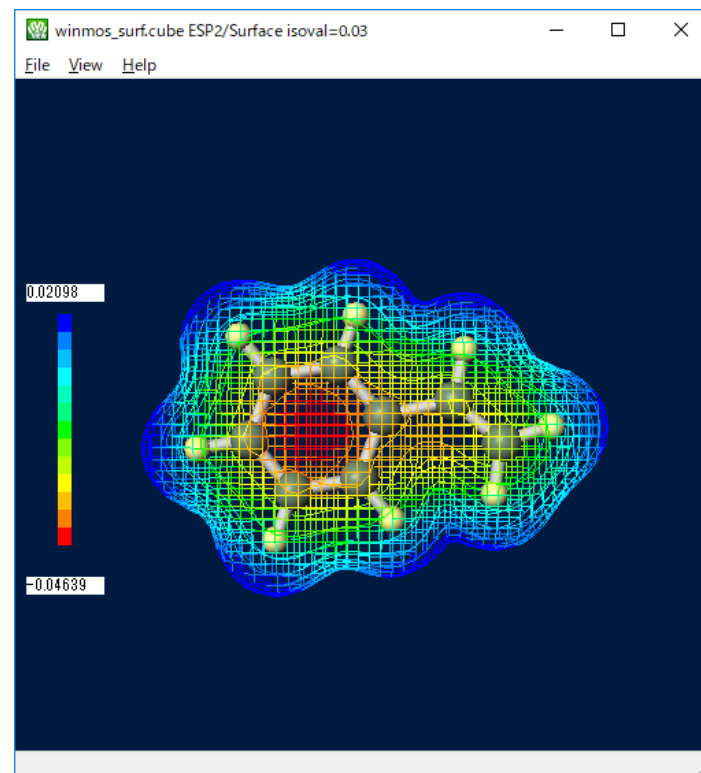
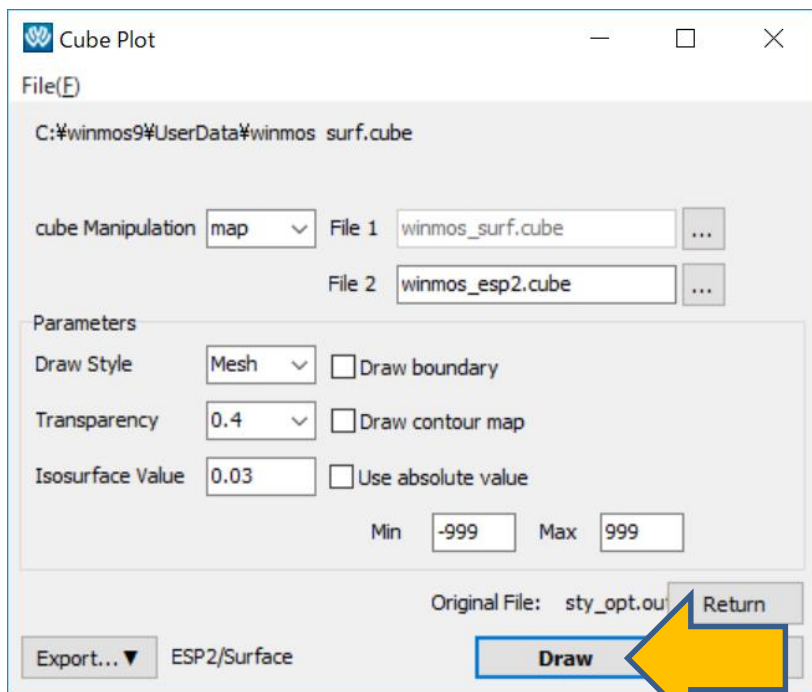
## VII. 静電ポテンシャルの表示

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**Generate 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**Draw**ボタンを押すと、Winmostar Viewer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

1. TMSなどの分子で構造最適化、NMRスペクトルの取得を行う。
2. **Chemical Shielding Tensors**ウィンドウを開く。
3. 参照元にしたいスペクトルを左クリックする。  
すると、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)。
4. **Edit**をクリックすると**UserPref**以下の**wm\_nmr.ref**を開く。
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、Winmostar™の**Reference**でその遮蔽定数を選択できるようになる。

Chemical Shielding Tensors (GIAO, in ppm)

Reference

Degeneracy Tolerance  X-min

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

<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友

アカウント登録 ログイン

**X-Ability**  
クロスアビリティ

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

山口 達明

X-Ability Co.,Ltd.  
11月14日 20:30 · 公開

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\\_au\\_detailpage\\_o00\\_s00...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_au_detailpage_o00_s00...)

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 · 公開