

WinmostarとGAMESSによるPIO解析例

<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/pio/usage.html> のDiels-Alder反応の遷移状態を例にして示します。

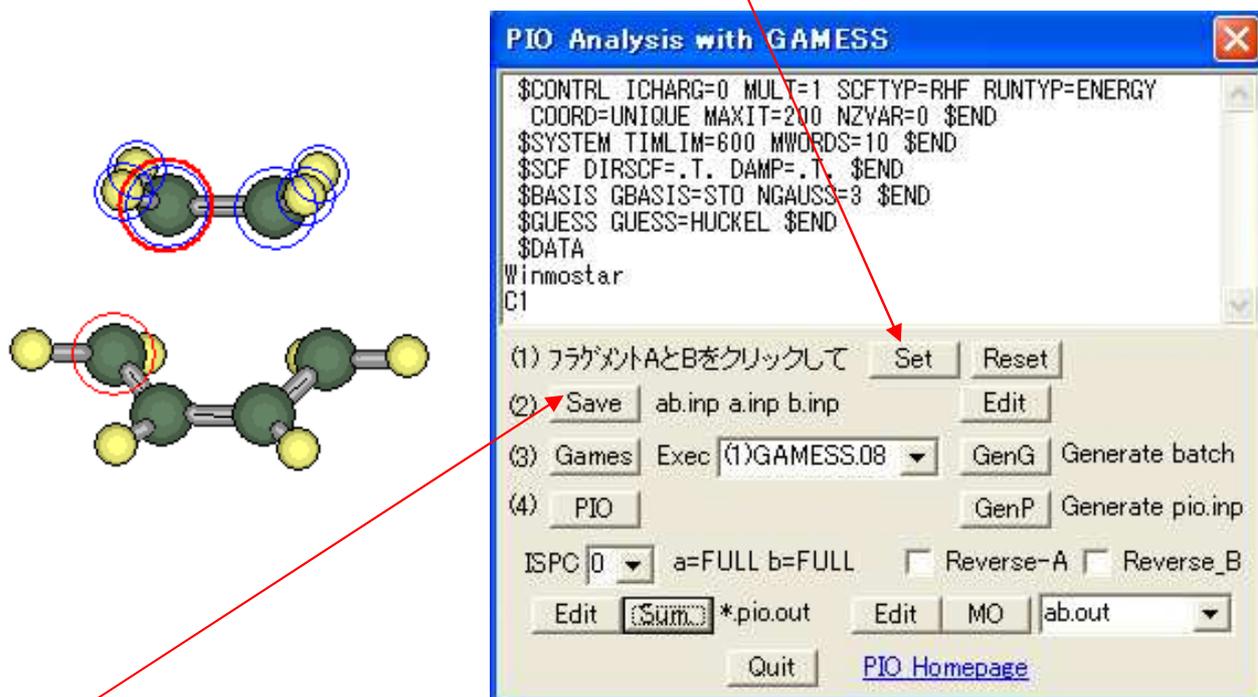
1. WinGAMESSまたはPC GAMESSが使用できることを確認する。GAMESSがインストール済であれば、パスを設定することで、Winmostarから起動できるようになる。



2. ファイル／開くで、ファイルの種類をGaussian(*.gjf,*.com)にして、PIO_AB.COMを開く。
計算はカレントディレクトリで実行されるので、ディレクトリ毎に実行結果が保存される。
分子の配向は、編集／初期配向／再設定で変更できる。

3. その他／PIO／with GAMESSで、PIO解析画面を開く。
デフォルトはSTO-3Gになっているので、必要であれば修正する。

4. フラグメントAとフラグメントBの1原子ずつをクリックして[Set]を押し、フラグメントBの原子に青丸が付くことを確認する。



5. [Save]で、合体系とフラグメントAとフラグメントBのデータが保存されて、エディターが立ち上がるので、内容を確認して、必要であれば電荷等を修正する。

6. [Games]で、GAMESSを実行する。実行結果は下部右側の[Edit]と[MO]で確認できる。
- 6'. リモートジョブ投入機能でGAMESSを実行する場合は[Games]を押す代わりに、a.inp、b.inp、ab.inpをジョブ投入して結果を[get]する。

7. [PIO]でPIO解析の計算を行う。

PIO Summary ISPC=2

MO A: 26, B: 14
OCC A: 15, B: 8

	EIGENVALUE	E.POP	O.POP
1	0.4507	1.9769	0.2548
2	0.0002	1.9735	0.0004
3	0.0002	1.9999	0.0008
4	0.0001	1.9998	0.0002
5	0.0000	1.9991	0.0001
6	0.0000	1.9989	0.0000

Quit

PIO Analysis with GAMESS

```

$CONTROL ICHARG=0 MULT=1 SCFTYP=RHF RUNTYP=ENERGY
COORD=UNIQUE MAXIT=200 NZVAR=0 $END
$SYSTEM TIMLIM=600 MWORDS=10 $END
$SCF DIRSCF=.T. DAMP=.T. $END
$BASIS GBASIS=STO NGAUSS=8 $END
$GUESS GUESS=HUCKEL $END
$DATA
Winmostar
C1
  
```

(1) フラグメントAとBをクリックして Set Reset

(2) Save ab.inp a.inp b.inp Edit

(3) Games Exec (1)GAMESS.08 GenG Generate batch

(4) PIO GenP Generate pio.inp

ISPC 0 a=FULL b=FULL Reverse-A Reverse_B

Edit (Sum) *pio.out Edit MO ab.out

Quit PIO Homepage

8. ISPCを指定して、[Edit]*pio.outで計算結果を表示する。[Sum.]で要約が表示される。軌道を図示するには、*pio.out-ab等と指定して、[MO]を押すとMO Plot画面が立ち上がるので、Number of MOとIso Levelを指定して[3D]を押すと軌道が表示される。ホームページと図が異なるのは、ブタジエンとエチレンの距離が違うためである。距離を離して再度実行(4. から)すると、ホームページと同じ図が得られる。O.POPから得られる(反)結合性と位相を合わすには、Reverse-AまたはReverse-Bをチェックして[MO]を押し、軌道を再表示する。

GAMESS MO Plot

File(E)

E:\home\ccs\winmos\0pio.out-ab
HOMO=23(alpha),23(beta) NBASIS=40

Mesh Contour Map

透明 0.0

MO

Number of MO 1 Energy Level

Iso. Level 0.03

Points 50
Scale 1.5

3D 2D VRML Quit Jmol

