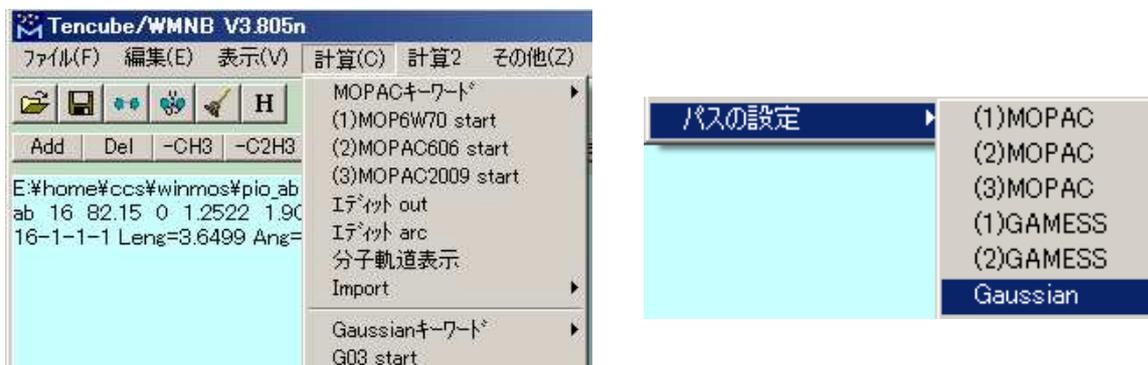


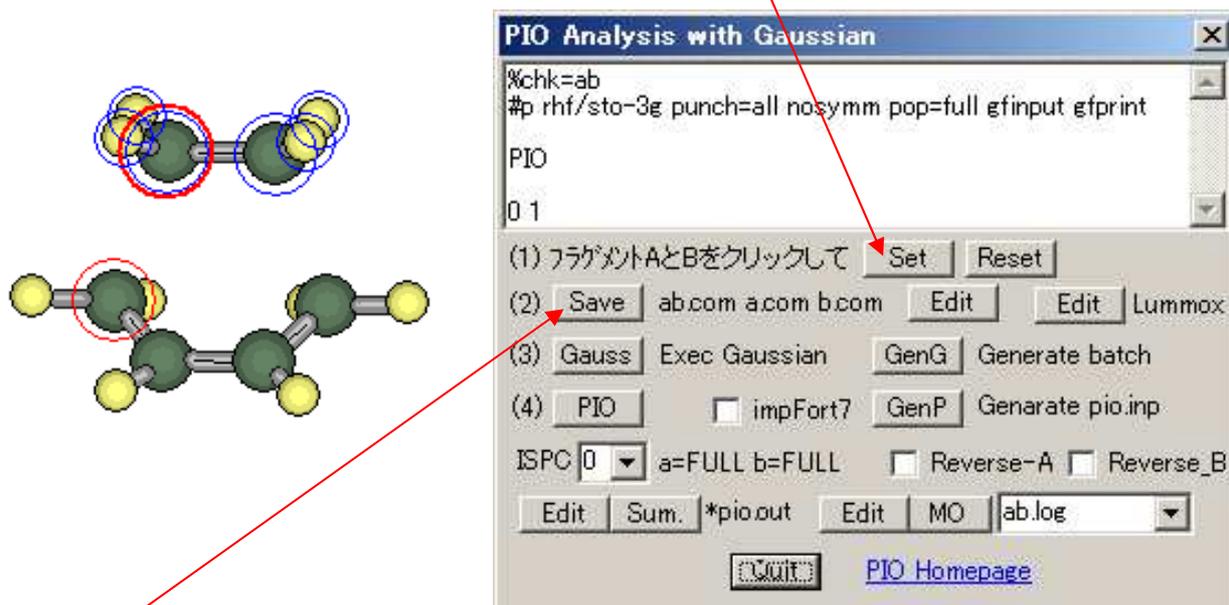
WinmostarとGaussianによるPIO解析例

<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. G03WまたはG09Wが使用できることを確認する。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 Gaussian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. [Gauss]で、Gaussian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Gaussianを実行する場合は[Gauss]を押す代わりに、a.com、b.com、ab.com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。

	EIGENVALUE	E. POP	O. POP
1	0.5254	2.2731	0.1850
2	0.4763	2.1173	0.2416
3	0.0262	3.7270	-0.0319
4	0.0164	3.8025	-0.0170
5	0.0118	3.9698	-0.0111
6	0.0088	3.9403	-0.0081
7	0.0067	3.9384	-0.0064
8	0.0002	2.0921	0.0007
9	0.0000	2.1166	0.0000
10	0.0000	1.7080	0.0000
11	0.0000	2.1046	0.0000
12	0.0000	2.1290	0.0000

8. ISPCを指定して、[Edit]*pio.log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.log-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。

File(E)
E:\home\ccs\winmos\0pio.log-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

