

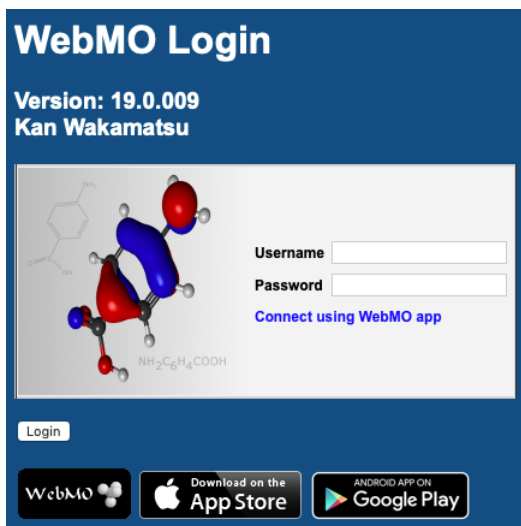
## Gaussian および WebMO による分子軌道計算

Gaussian は世界で最も広く使用されている量子化学計算プログラムである。ここでは、Gaussian の入力ファイルと出力ファイルの扱いを容易にするため、Web ベースの計算支援プログラム WebMO を併用して計算を行う方法を説明する。

- ※ Windows 用の市販プログラムである GaussView, Chem3D などと Windows 版 Gaussian の組み合わせでも同様のことができる。Gaussian の入力ファイルは ChemDraw で描いた構造式を Chem3D にコピーペーストすることで容易に作成できる。
- ※ Gaussian の入力ファイルは、分子中の原子の座標、分子全体の電荷、多重度、および計算内容を指定するキーワードから成る (原子間の結合関係を入力する必要なし、8 ページ参照)。入力ファイルを直接ワープロ等で作成することも可能である。

### 1. ログイン

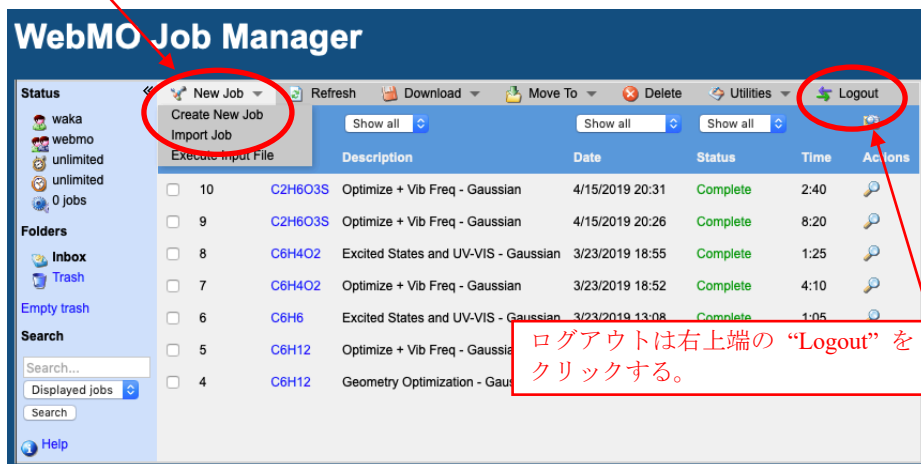
- (1) Web ブラウザに以下のアドレスを入力して、ログインページを表示する。  
<https://gaussian.chem.ous.ac.jp>
- (2) username と password を入力し、ログイン。



- (3) 最初に表示されるのは “WebMO Job Manager” (以前の計算の一覧が表示される)。

## II. 構造の入力

- (4) “New Job” メニューの “Create New Job” をクリックすると、分子編集用の Editor が現れる。



- ※ 予め作成しておいた入力ファイルを用いる場合は “Import Molecule” をクリック。  
Gaussian 入力ファイルのほかに Mopac 入力ファイル, PDB, MOL, XYZ 形式のファイルが利用できる。

以下に、例としてトルエンを作成するための手順を述べる。

- (5) “Build” メニューでこれから描画しようとする原子または原子団を指定する。  
まずベンゼン環を描くため、“Fragment” を選択する。

※ 画面の任意箇所をクリックすると、その箇所に指定した原子または原子団が描画される。

※ 既に描いている原子を起点としてドラッグすると結合ができる。

- (6) “Choose Fragment” ダイアログが現れるので、  
Category “Rings”  
Fragment “Benzene”  
を選択して OK。

## Build Molecule

Status

- waka
- webmo
- unlimited
- unlimited
- 0 jobs

Progress

- Job manager
- Build molecule**

Build a new molecule using the WebMO editor, or import an existing molecule from a file. Additionally, you can export the molecule to a variety of file formats.

- Job options
- Submit job
- Editor help

File Edit Tools **Build** Cleanup Calculate Lookup Help

C  
O  
N  
H  
Other...  
Fragment...

Build - C (click = add atom; drag = add bond; click & drag = add atom & bond; letter = change atom)

## Build Molecule

Status

- waka
- webmo
- unlimited
- unlimited
- 0 jobs

Progress

- Job manager
- Build molecule**

Build a new molecule using the WebMO editor, or import an existing molecule from a file. Additionally, you can export the molecule to a variety of file formats.

- Job options
- Submit job
- Editor help

File Edit Tools Build Cleanup Calculate Lookup Help

Add Fragment

Category Rings

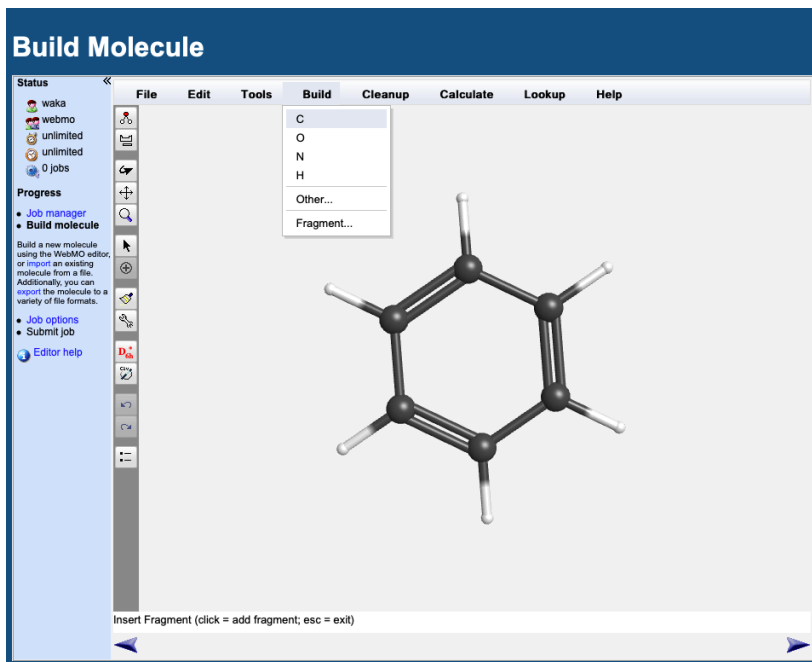
Fragment Benzene

OK Cancel

Build - C (click = add atom; drag = add bond; click & drag = add atom & bond; letter = change atom)

(7) 画面の中心付近をクリックするとベンゼン環が描画される。

(8) メチル基を追加するため、“Build”メニューの“C”をクリック。



(9) ベンゼン環の水素上でクリックすると、水素が炭素に置換される。

(10) 水素不足箇所適切な数の水素を追加するため、“Clean-up”メニューの“Add Hydrogen”をクリック（直ちに水素が付加される）。

## Build Molecule

Status

waka  
webmo  
unlimited  
unlimited  
0 jobs

Progress

- Job manager
- Build molecule**

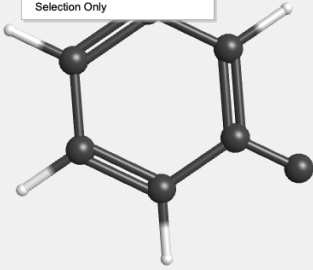
Build a new molecule using the WebMO editor, or import an existing molecule from a file. Additionally, you can export the molecule to a variety of file formats.

- Job options
- Submit job

Editor help

File Edit Tools Build Cleanup Calculate Lookup Help

Generate Bonds  
Add Hydrogens  
Hybridization  
Geometry  
Mechanics Optimize  
Comprehensive - Idealized  
Comprehensive - Mechanics  
Selection Only



Build - C (click = add atom; drag = add bond; click & drag = add atom & bond; letter = change atom)

## Build Molecule

Status

waka  
webmo  
unlimited  
unlimited  
0 jobs

Progress

- Job manager
- Build molecule**

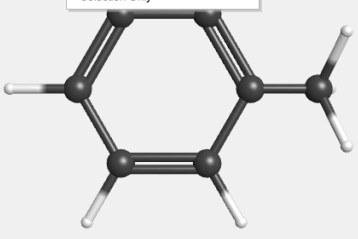
Build a new molecule using the WebMO editor, or import an existing molecule from a file. Additionally, you can export the molecule to a variety of file formats.

- Job options
- Submit job

Editor help

File Edit Tools Build Cleanup Calculate Lookup Help

Generate Bonds  
Add Hydrogens  
Hybridization  
Geometry  
Mechanics Optimize  
Comprehensive - Idealized  
Comprehensive - Mechanics  
Selection Only



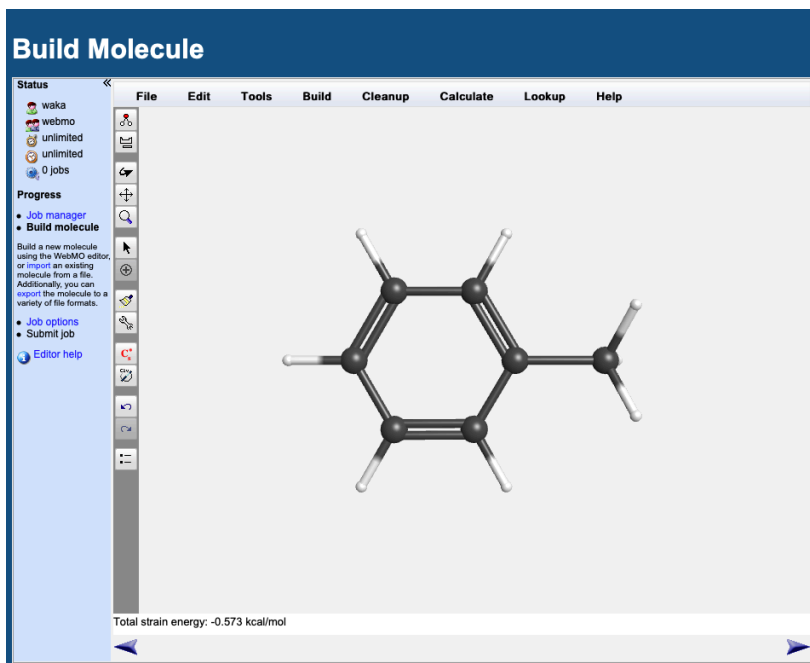
Build - C (click = add atom; drag = add bond; click & drag = add atom & bond; letter = change atom)

- (11) この段階ではメチル基とベンゼン環の結合距離が短すぎるので、Gaussian の計算を始める前にできるだけ正確な分子の形に整えておく。

ここでは、分子力場法 (Molecular Mechanics) で最適化する。

“Clean-up”メニューの“Mechanics Optimize”をクリック。

最適化は一瞬で終了し、適切な結合距離になっているはずである。



- (12) 対称な分子は入力座標を厳密に対称化しておくで計算時間の節約になる。  
“Calculate”メニューの“Symmetry — Symmetrize”をクリック。
- (13) 点群の候補が示されるので、良ければ“Symmetrize”をクリックし、OK。

## Build Molecule

Status

- waka
- webmo
- unlimited
- unlimited
- 0 jobs

Progress

- Job manager
- Build molecule

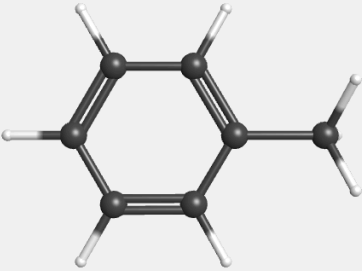
Build a new molecule using the WebMO editor, or import an existing molecule from a file. Additionally, you can export the molecule to a variety of file formats.

- Job options
- Submit job
- Editor help

File Edit Tools Build Cleanup Calculate Lookup Help

Strain Energy  
Symmetry

- Symmetrize...
- Display Symmetry Elements
- Select Symmetry Elements...



Total strain energy: -0.573 kcal/mol

## Build Molecule

Status

- waka
- webmo
- unlimited
- unlimited
- 0 jobs

Progress

- Job manager
- Build molecule

Build a new molecule using the WebMO editor, or import an existing molecule from a file. Additionally, you can export the molecule to a variety of file formats.

- Job options
- Submit job
- Editor help

File Edit Tools Build Cleanup Calculate Lookup Help

Symmetrize Molecule

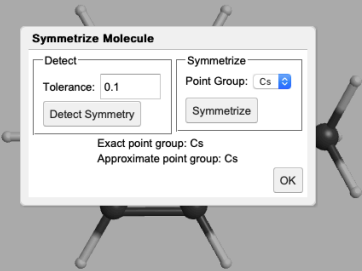
Detect Symmetrize

Tolerance: 0.1 Point Group: Cs

Detect Symmetry Symmetrize

Exact point group: Cs  
Approximate point group: Cs

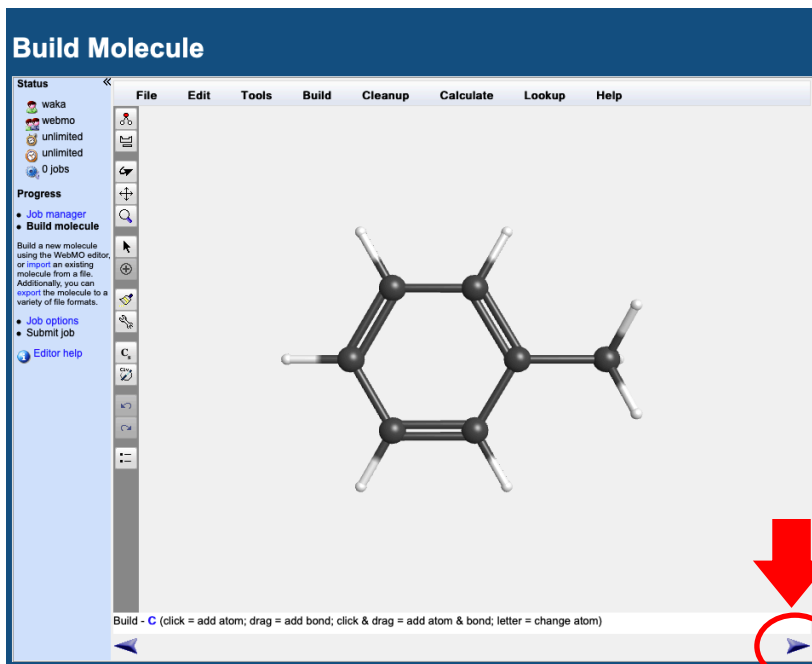
OK



Total strain energy: -0.573 kcal/mol

## III. 計算の実行

(14) “Build Molecule” ウィンドウの右下の矢印をクリック。



(15) Gaussian の計算オプションを選択・入力する。

**Configure Gaussian Job Options**

Status << **Job Options** Advanced Preview

waka  
webmo  
unlimited  
unlimited  
0 jobs

Progress

- Job manager
- Build molecule
- Job options

Configure options for the selected job and computational engine.

- Submit job
- Help

Job Name: C7H8

Calculation: Geometry Optimization

Theory: B3LYP

Basis Set: Routine: 6-31G(d)

Charge: 0

Multiplicity: Singlet

<Job Options タグ>

Job Name

分子式が入力されている  
が適当に変えてよい

Calculation

“Geometry Optimization”  
(構造最適化)

Theory

ここでは “B3LYP”

Basis Set

ここでは “6-31G(d)”

Charge は分子全体の電荷  
Multiplicity は “Singlet”

**Configure Gaussian Job Options**

Status << Job Options **Advanced** Preview

waka  
webmo  
unlimited  
unlimited  
0 jobs

Progress

- Job manager
- Build molecule
- Job options

Configure options for the selected job and computational engine.

- Submit job
- Help

Output Mode: Normal

Empirical Dispersion: None

Solvent: None

Calculate Force Constants: Default

Use Checkpoint File: None

Save Checkpoint File:

Basis Set Type: default

Cartesian Coordinates:

Include Connectivity:

Density Fitting:

Disable Symmetry:

Additional Keywords: gfp rint pop=full

<Advanced タグ>

Save Checkpoint File,

Cartesian Coordinates に  
チェックを入れておく

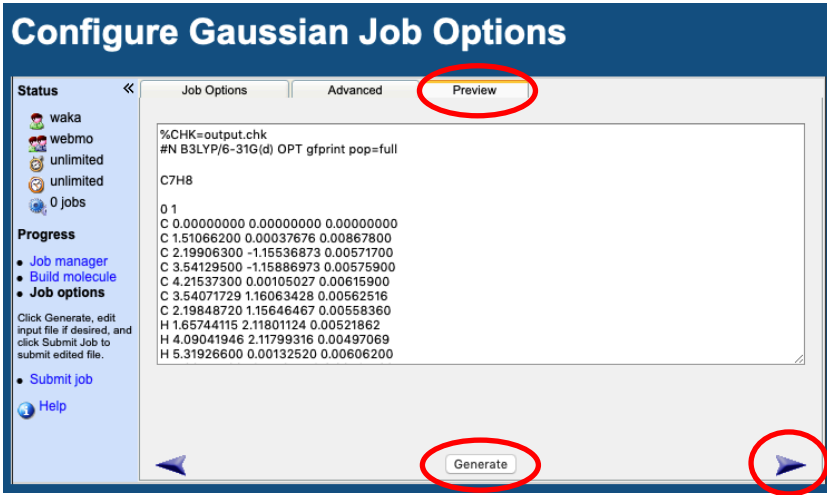
Additional Keywords に

“gfp rint pop=full”

と入力しておく、後で  
Jmol を使って分子軌道を  
図示できる

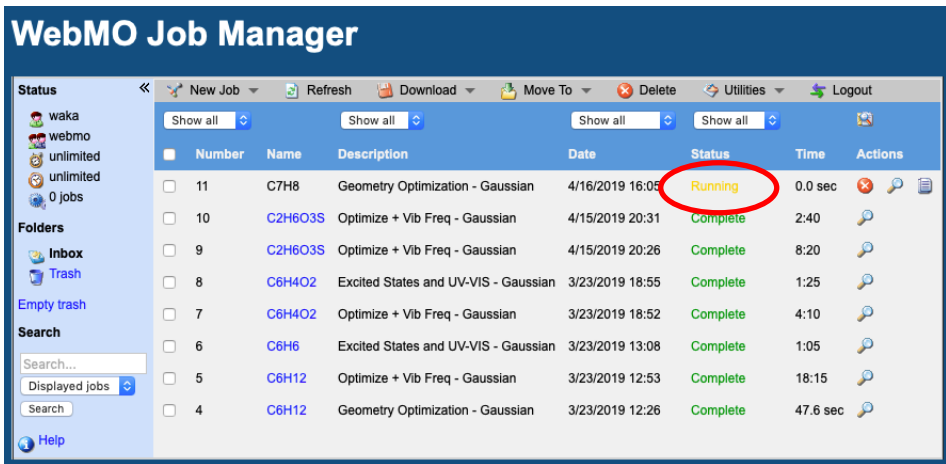
<Preview タグ>

“Generate” ボタンを押すと Gaussian の入力ファイルがテキストの形で確認できる  
“OPT” (optimization) キーワードがあることを確認



(16) 計算オプション入力後，右下の矢印をクリックすると，計算が開始する。

計算中の“WebMO Job Manager” (Number 11 の Status が “Running” になっている)



- ※ ここでログアウト (右上端の “Logout” をクリック) しても計算は継続している。再度ログインすると現在の状況が確認できる。
- ※ 途中で止めたい場合は Actions の × をクリック。

(17) 計算終了すると Status が “Complete” になる (Number 11 の計算時間は 1 分 17 秒)。

- ※ 何らかの理由で計算が失敗した場合は “Failed” と表示される。

**WebMO Job Manager**

Status << New Job Refresh Download Move To Delete Utilities Logout

Number	Name	Description	Date	Status	Time	Actions	
<input type="checkbox"/>	11	C7H8	Geometry Optimization - Gaussian	4/16/2019 16:05	Complete	1:17	
<input type="checkbox"/>	10	C2H6O3S	Optimize + Vib Freq - Gaussian	4/15/2019 20:31	Complete	2:40	
<input type="checkbox"/>	9	C2H6O3S	Optimize + Vib Freq - Gaussian	4/15/2019 20:26	Complete	8:20	
<input type="checkbox"/>	8	C6H4O2	Excited States and UV-VIS - Gaussian	3/23/2019 18:55	Complete	1:25	
<input type="checkbox"/>	7	C6H4O2	Optimize + Vib Freq - Gaussian	3/23/2019 18:52	Complete	4:10	
<input type="checkbox"/>	6	C6H6	Excited States and UV-VIS - Gaussian	3/23/2019 13:08	Complete	1:05	
<input type="checkbox"/>	5	C6H12	Optimize + Vib Freq - Gaussian	3/23/2019 12:53	Complete	18:15	
<input type="checkbox"/>	4	C6H12	Geometry Optimization - Gaussian	3/23/2019 12:26	Complete	47.6 sec	

#### IV. 計算結果の表示

(18) “WebMO Job Manager” の Actions の虫メガネアイコンをクリックすると計算結果が表示される（最適化された構造，エネルギー，双極子モーメント，Mulliken ポピュレーション解析による電荷など）。

- ※ 電荷は Partial Charges の欄に表示される（虫メガネアイコンをクリックすると，分子の絵の上に図示される）。
- ※ Gaussian の生の出力ファイル（テキストファイル）を見る場合は，画面左側の Actions の “Raw output” をクリック。

(19) Job 結果のダウンロード，削除，ログアウト

- ※ 計算結果を自分のパソコンにダウンロードしたい場合は，左端のチェックボックスにチェックを入れて，“Download” をクリックする。計算に関するファイルをまとめて zip アーカイブ形式で保存する。zip 形式ファイルは Windows や macOS ではそのままダブルクリックして開くことができる。
- ※ Job を削除したい場合は，左端のチェックボックスにチェックを入れてから “Delete” をクリックする。
- ※ 終了する場合は，“View Job” 画面左側の Actions の “Job Manager” をクリックして Job Manager に戻り，“Logout” をクリック。

## View Job 11: C7H8, Geometry Optimization - Gaussian

Status

waka  
webmo  
unlimited  
unlimited  
0 jobs

Summary

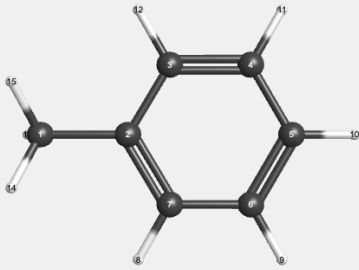
- C7H8
- Job # 11
- 4/16/2019
- 77.0 sec

Autons

- Job Manager
- Raw output
- Help

Molecule Viewer      Data Viewer

File   Edit   View   Cleanup   Calculate   Lookup   Help



View - Rotate (drag = rotate XY; alt-drag = rotate Z)

Reset Viewer    New Job Using This Geometry

**Partial Charges**

Atom	Symbol	Charge
1	C	-0.528940
2	C	0.176564
3	C	-0.178860
4	C	-0.126696
5	C	-0.133015
6	C	-0.126696
7	C	-0.178860
8	H	0.119975
9	H	0.126655
10	H	0.126109
11	H	0.126655
12	H	0.119975
13	H	0.165055
14	H	0.155990
15	H	0.155990

Quote We're simply so accustomed to the marvels of everyday thought that we never wonder about it. — Marvin Minsky in "Why people think computers are smart"

- (20) 分子軌道 (HOMO, LUMO など) の係数を読み取るためには Gaussian の生の出力ファイルを開く (“Raw output” をクリックすると別ウィンドウに表示される)。

まず, “Optimized Parameters” の出力が現れるまでスクロール。

```

Item                Value      Threshold  Converged?
Maximum Force       0.000010   0.000450   YES
RMS Force           0.000003   0.000300   YES
Maximum Displacement 0.000300   0.001800   YES
RMS Displacement    0.000057   0.001200   YES
Predicted change in Energy=-2.611109D-09
Optimization completed.
  -- Stationary point found.

```

```

-----
! Optimized Parameters !
! (Angstroms and Degrees) !
-----
! Name Definition                Value      Derivative Info.      !
-----
! R1  R(1, 2)                    1.5116     -DE/DX = 0.0          !
! R2  R(1, 13)                   1.0985     -DE/DX = 0.0          !
! R3  R(1, 14)                   1.0953     -DE/DX = 0.0          !

```

分子構造パラメータの出力の後, 分子軌道関連の出力が現れる。

\*\*\*\*\*

Population analysis using the SCF density.

\*\*\*\*\*

Orbital symmetries:

```

Occupied (A') (A') (A'') (A') (A'') (A') (A') (A') (A') (A'')
(A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A'')
(A') (A') (A'') (A'') (A')
Virtual (A'') (A') (A') (A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A'')
(A') (A') (A'') (A') (A') (A'') (A'') (A') (A') (A'')
(A') (A'') (A') (A') (A') (A'') (A') (A'') (A') (A'')
(A') (A') (A'') (A') (A'') (A') (A'') (A') (A'') (A')
(A'') (A') (A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A'') (A')
(A'') (A') (A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A'') (A')
(A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A'')
(A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A')
(A'') (A') (A') (A'') (A') (A') (A'') (A') (A'') (A')

```

軌道の対称性

The electronic state is 1-A'.

```

Alpha occ. eigenvalues -- -10.19279 -10.18454 -10.18446 -10.18278 -10.18193
Alpha occ. eigenvalues -- 0.43013 0.41304 0.41329 -0.40219 -0.38106
Alpha occ. eigenvalues -- -0.34742 -0.33594 -0.33329 -0.24359 -0.23534
Alpha virt. eigenvalues -- 0.00535 0.00645 0.09574 0.12186 0.13817
Alpha virt. eigenvalues -- 0.14611 0.16526 0.17425 0.18878 0.19064
Alpha virt. eigenvalues -- 0.20750 0.24002 0.31126 0.32082 0.33505

```

軌道エネルギー

被占軌道(O)で  
エネルギー最大  
=HOMO

空軌道(V)で  
エネルギー最小=LUMO

		Molecular Orbital Coefficients:					軌道係数
		1	2	3	4	5	
		0	0	0	0	0	
Eigenvalues	--	-10.19279	-10.18454	-10.18446	-10.18278	-10.18193	← 軌道エネルギー
1	1 C 1S	0.01058	-0.00048	0.00000	0.00069	0.00000	
2	2S	0.00044	-0.00015	0.00000	0.00004	0.00000	
3	2PX	0.00008	-0.00001	0.00000	0.00000	0.00000	
4	2PY	0.00030	0.00003	0.00000	-0.00005	0.00000	
5	2PZ	0.00000	0.00000	-0.00001	0.00000	-0.00002	
6	3S	0.00213	0.00002	0.00000	0.00098	0.00000	
7	3PX	-0.00045	0.00008	0.00000	-0.00006	0.00000	
8	3PY	-0.00136	-0.00011	0.00000	-0.00033	0.00000	
9	3PZ	0.00000	0.00000	0.00024	0.00000	-0.00031	
10	4XX	-0.00013	-0.00004	0.00000	0.00001	0.00000	
11	4YY	-0.00060	0.00001	0.00000	-0.00000	0.00000	
12	4ZZ	-0.00022	-0.00003	0.00000	0.00001	0.00000	
13	4XY	-0.00002	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	
14	4XZ	0.00000	0.00000	-0.00002	0.00000	0.00001	
15	4YZ	0.00000	0.00000	-0.00004	0.00000	0.00002	
16	2 C 1S	0.99221	-0.00444	0.00000	0.00293	0.00000	
17	2S	0.04954	-0.00017	0.00000	-0.00009	0.00000	
18	2PX	0.00001	0.00000	0.00000	-0.00000	0.00000	
19	2PY	-0.00003	0.00007	0.00000	0.00004	0.00000	
20	2PZ	0.00000	0.00000	-0.00006	0.00000	-0.00041	
21	3S	-0.01902	-0.00393	0.00000	0.00441	0.00000	
22	3PX	0.00006	-0.00002	0.00000	-0.00001	0.00000	
23	3PY	0.00260	0.00208	0.00000	-0.00325	0.00000	
24	3PZ	0.00000	0.00000	-0.00033	0.00000	0.00304	
25	4XX	-0.00936	0.00006	0.00000	-0.00011	0.00000	
26	4YY	-0.00915	0.00006	0.00000	-0.00003	0.00000	
27	4ZZ	-0.00899	0.00006	0.00000	0.00003	0.00000	
28	4XY	0.00002	-0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	
29	4XZ	0.00000	0.00000	-0.00000	0.00000	0.00000	
30	4YZ	0.00000	0.00000	-0.00002	0.00000	0.00009	
31	3 C 1S	0.02401	0.07081	0.07765	-0.04986	0.69770	

## <参考 分子軌道の表示方法>

Web ブラウザ上の無料版 WebMO 単独では分子軌道を図として表示することができない。しかし、次に示すいくつかの方法で図示することができる。

### A. Jmol を使う

“Additional Keywords” に “**gfprint pop=full**” と入力しておくとし、raw output ファイルを無料の Jmol (<http://jmol.sourceforge.net>) で読み込み、構造や分子軌道を表示することができる。

### B. GaussView や Chem3D を使う

GaussView や Chem3D があれば、以下の (a) ~ (c) または (a') ~ (d') の方法で作成した formatted checkpoint ファイル (拡張子 fch または fchk) をこれらのプログラムに読み込めることで表示できる。

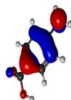
- (a) 上記手順(15)において、“Advanced” タブの “Additional Keywords” に “**formcheck**” を追加する。
- (b) 計算終了後、“WebMO Job Manager” の “Download” をクリックして計算結果を zip 形式で保存する (手順(19)参照)。
- (c) zip ファイルを解凍すると、“test.fchk” という名前の テキストファイルがあるので、これを GaussView などで読み込む。

または、

- (a') 上記手順(15)において、“Advanced” タブをクリックし、“Save Checkpoint File” にチェックを入れる。
- (b') 計算終了後、“WebMO Job Manager” の “Download” をクリックして計算結果を zip 形式で保存する (手順(19)参照)。
- (c') zip ファイルを解凍すると、“output.chk” という名前の バイナリファイルが確認できるが、このままでは Chem3D などで読めない。
- (d') Gaussian を実行したのと同じ OS (今回の場合は 64bit Linux) 上のプログラム “formchk” を用いて、chk 形式ファイルを fchk 形式に変換する。

### C. スマートフォン版の WebMO アプリを使う

WebMO Molecule Editor (無料) を使うと、スマートフォンやタブレット上で構造の組み立てから Gaussian を使った計算、さらに分子軌道を含む計算結果の表示ができる。



※ スマートフォンで計算を行っているわけではなく、Web ブラウザ上の WebMO と同じように端末として動作している。