

【実習 1：原子軌道の可視化】

1. **ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、**プロジェクト名**に「atomic_orbital」（必ず半角英字）と入力し**保存**をクリックします。
2. **編集 | 原子を削除**をクリックします。
3. 残った原子を右クリックし、**元素を選んで変更 | Zn 30**をクリックします。
 - 必ずしも Zn である必要はなく、見たい軌道およびエネルギー状態に応じて適宜元素を選択してください。
4. 上部ツールバーの**ソルバ**を「NWChem」に変更し**ワークフロー設定**をクリックします。
5. **Preset**を「Energy」に変更し**OK**をクリックします。
6. **ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。
7. メインウィンドウ左の**作業フォルダ**で **work1_NW_ENERGY** の状態が **END** に移行するまで待ちます。
8. メインウィンドウ左下の**アクション**から **MO & Charge** をクリックします。
9. **Energy Level Diagram** ウィンドウで各軌道のエネルギーを確認します。
 - Zn においてはエネルギーが $3d < 4s$ となります。
10. **Energy Level Diagram** ウィンドウで軌道を選択し **Surface Setup** ウィンドウで **Quantity** に「MO」を選択し、**Scale** に「3」、**Points** に「100」と入力し **Draw contour map** にチェックを入れ、**Draw** をクリックし、各軌道の可視化を行います。
 - **Winmostar Viewer** で **View | Representations** をクリックし、等値面を消したい場合は **Surface Style** を「SmoothSolid」から「(空白)」に、原子の表示を消したい時は **Atom** の値を「0.00」に、等高線の表示面の位置を変えたい場合は **Contour Map Position** の **X, Y, Z** およびその値を変更します。

【実習 2：水素 2 原子が形成する分子軌道の可視化】

1. **ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、**プロジェクト名**に「molecular_orbital」（必ず半角英字）と入力し**保存**をクリックします。
2. **ファイル | インポート | Samples ファイル | h2.xyz** をクリックし**破棄して読み込み**をクリックします。
3. **Ctrl+ドラッグ**で **x** が大きい方（初期のカメラアングルであれば右側）の原子をグループ選択します。

4. 分子表示エリア左上に「Group Selection: 1 Atoms (H)」と表示されるのを確認します。
5. ツール | 構造スキャンをクリックし、「変更を上書き保存しますか？」と聞かれたらはいをクリックします。
6. **Translate group along selected axis/vector** を選択し、**Interval** に「0.5」、**# of steps** に「3」と入力し、**OK** をクリックします。
 - 2原子間の距離が離れすぎると初期軌道の慎重な調整が必要なため、本実習ではこの程度の原子間距離に留めています。
7. 上部ツールバーのソルバを「NWChem」に変更しワークフロー設定をクリックします。

※GAMESS を使う場合はワークフロー設定をクリックする前にツール | ジョブマネージャをクリックし、**Max Cores** を「1」に変更します。
8. **Preset** を「Energy」に変更し、**Enable parameter/structure scan** にチェックを入れます。
9. **Config** をクリックし、**Target Variable** に「%WM_STRUCTURE%」を選択し、**OK** をクリックします。
10. **NWChem Workflow Setup** で **OK** をクリックします。
11. ジョブの設定ウィンドウで**実行**をクリックします。

※GAMESS を使う場合は**# of MPI Procs** を「1」にします。
12. メインウィンドウ左の**作業フォルダ**で work1~work3 の状態が **END** に移行するまで待ちます。
13. メインウィンドウ左の**作業フォルダ**で work1 をクリックし、アクションで **MO & Charge** をクリックします。
14. **Energy Level Diagram** ウィンドウにおいて、**HOMO-LUMO Gap** を確認します。
 - 原子間距離が離れているほど HOMO-LUMO Gap が小さくなることを確認します。
15. **Energy Level Diagram** ウィンドウにおいて HOMO を選択し、**Surface Setup** ウィンドウにおいて **Draw** をクリックします。
16. **Energy Level Diagram** ウィンドウにおいて LUMO を選択し、**Surface Setup** ウィンドウにおいて **Draw** をクリックします。
 - HOMO には同位相、LUMO には逆位相の 1s 軌道が関与していることがわかります。
17. work2, work3 についても work1 と同様に確認します。

【実習 3：異核二分子における分極、共有結合性・イオン結合性】

1. **ファイル | 新規プロジェクト** をクリックし、**プロジェクト名** に

- 「hetero_diatomic」(必ず半角英字)と入力し**保存**をクリックします。
2. 分子表示エリアの緑色の原子(炭素)を右クリックし、**元素を選んで変更 | F 9**をクリックします。
 3. 分子表示エリアの黄色の原子(水素)を右クリックし、**元素を選んで変更 | Li 3**をクリックします。
 4. 分子表示エリア左上に「N=2 LiF M=...」と表示されるのを確認します。
 - 比較的イオン結合的である LiF を計算します。
 5. 上部ツールバーのソルバを「NWChem」に変更し**ワークフロー設定**をクリックします。
 6. **Basis set**を「STO-3G」に変更し**OK**をクリックします。
 - 小さい基底関数を使うことで軌道の解釈を容易にできるようにします。
 7. **ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。
 8. メインウィンドウ左の**作業フォルダ**で **work1_NW_OPT** の状態が **END** に移行するまで待ちます。
 9. メインウィンドウ左下の**アクション**で **MO & Charge** をクリックします。
 - HOMO が 6 番目の軌道であることを確認します。
 10. **Surface Setup** ウィンドウにおいて **Quantity** に「MO」を選択し、**Draw** をクリックします。
 - HOMO が両原子の軌道の混合であることを確認します。
 11. メインウィンドウ左下の**アクション**で **Log** をクリックします。
 - 「DFT Final Molecular Orbital Analysis」の Vector 6 (HOMO) , および 7 (LUMO) において、係数の絶対値より、それぞれ F および Li の割合が多くイオン結合性が強いことを確認します。
 12. 分子表示エリア下部の **Dipole moment:** で分子の分極度合いを確認します。
 13. **編集 | 構造をリセット**をクリックします。
 14. 「出力可能なファイル形式に変更し編集を続行しますか?」と表示されたら**はい**をクリックします。
 15. 分子表示エリアの黄色の原子(水素)を右クリックし、**元素を選んで変更 | O 8**をクリックします。
 16. 分子表示エリア左上に「N=2 CO M=...」と表示されるのを確認します。
 - 比較的共有結合的である CO を計算します。
 17. 上部ツールバーの**ワークフロー設定**をクリックします。
 18. 「...継続ジョブを実行しますか?」と聞かれたら**いいえ**をクリックします。
 19. **OK**をクリックします。
 20. **ジョブの設定**ウィンドウで**実行**をクリックします。
 21. メインウィンドウ左の**作業フォルダ**で **work2_NW_OPT** の状態が **END** に移行す

るまで待ちます。

22. メインウィンドウ左下のアクションで **MO & Charge** をクリックします。
 - HOMO が 7 番目の軌道であることを確認します。
23. **Surface Setup** ウィンドウにおいて **Quantity** に「MO」を選択し、**Draw** をクリックします。
 - HOMO が両原子の軌道の混合であることを確認します。
24. メインウィンドウ左下のアクションで **Log** をクリックします。
 - 「DFT Final Molecular Orbital Analysis」の Vector 7 (HOMO) , 8 (LUMO) が C、O の割合が片方に極端に寄らず共有結合性が強いことを確認します。
25. 分子表示エリア下部の **Dipole moment:** で分子の分極度合いを確認します。

【実習 4 : ブタンの二面角スキャン計算】

別紙 [Winmostar チュートリアル MOPAC 二面角スキャン計算](#)を参照

【実習 5 : 配座探索と構造最適化】

1. ファイル | **新規プロジェクト** をクリックし、プロジェクト名に「local_minimum」(必ず半角英字) と入力し **保存** をクリックします。
2. ファイル | **インポート** | **Samples ファイル** | **butane.xyz** をクリックし **破棄して読み込み** をクリックします。
3. ツール | **配座探索 (Balloon)** をクリックし **Search** をクリックします。
4. **Select conformation** ウィンドウで、配座探索により複数の構造が得られたことを確認します。
5. 1, 2, 6, 9 または 10 番目の構造を選択し **OK** をクリックします。
6. 上部ツールバーのソルバを「NWChem」に変更し **ワークフロー設定** をクリックします。
7. 計算時間短縮のため、**Method** を「HF」、**Basis set** を「STO-3G」に変更します。
8. **OK** をクリックし **実行** をクリックします。
9. メインウィンドウ左下のアクションで **Animation** をクリックします。
10. メインウィンドウ右上の **アニメーション操作エリア** で再生ボタンをクリックします。
 - 初期構造と最終構造において構造がそこまでは大きく変わっておらず、構造最適化計算において初期構造から異なる配座には収束しないことを確認します。

【実習 6 : 標準生成エンタルピー計算、分子構造、振動、静電ポテンシャル】

1. ファイル | **新規プロジェクト**をクリックし、プロジェクト名に「h2o_formation」(必ず半角英字)と入力し**保存**をクリックします。
2. ファイル | **インポート | Samples ファイル | h2o.xyz** をクリックし**破棄して読み込み**をクリックします。
3. 上部ツールバーのソルバを「GAMESS」に変更し**ワークフロー設定**をクリックします。
4. **Preset**を「Optimize+IR」に変更します。
 - 構造最適化計算の後に振動計算 (IR スペクトルの計算を含む) を実行する設定になります。
5. **Basis set**を「cc-pVDZ」に変更し**OK**をクリックします。
6. **実行**をクリックします。
 - 問題サイズが比較的小さく高並列数で効率よく計算できないのと、後で並列の効果を確認するため、ここでは並列数は1とします。
 - リモートジョブとして実行する場合はこの段階でリモートジョブの設定を行います。
7. **ワークフロー設定**をクリックします。
8. 「継続ジョブを実行しますか?」と聞かれたら**いいえ**をクリックします。
9. **Basis set**を「cc-pVTZ」に変更し**OK**をクリックします。
10. **実行**をクリックします。
 - 問題サイズが比較的小さく高並列数で効率よく計算できないのと、後で並列の効果を確認するため、ここでは並列数は1とします。
 - リモートジョブとして実行する場合はこの段階でリモートジョブの設定を行います。
11. **編集 | 構造をリセット**をクリックします。
12. ファイル | **インポート | Samples ファイル | h2.xyz** をクリックし**破棄して読み込み**をクリックします。
13. **ワークフロー設定**をクリックします。
14. 「継続ジョブを実行しますか?」と聞かれたら**いいえ**をクリックします。
15. **Basis set**を「cc-pVDZ」に変更し**OK**をクリックします。
16. **実行**をクリックします。
 - 問題サイズが比較的小さく高並列数で効率よく計算できないのと、後で並列の効果を確認するため、ここでは並列数は1とします。
 - リモートジョブとして実行する場合はこの段階でリモートジョブの設定を行います。
17. **ワークフロー設定**をクリックします。
18. 「継続ジョブを実行しますか?」と聞かれたら**いいえ**をクリックします。

19. **Basis set** を「cc-pVTZ」に変更し **OK** をクリックします。
20. **実行** をクリックします。
 - 問題サイズが比較的小さく高並列数で効率よく計算できないのと、後で並列の効果を確認するため、ここでは並列数は 1 とします。
 - リモートジョブとして実行する場合はこの段階でリモートジョブの設定を行います。
21. **編集 | 構造をリセット** をクリックします。
22. **ファイル | インポート | Samples ファイル | o2.xyz** をクリックし **破棄して読み込み** をクリックします。
23. 「継続ジョブを実行しますか？」と聞かれたら **いいえ** をクリックします。
24. **Multiplicity** を「3」に変更し、**Basis set** を「cc-pVDZ」に変更し **OK** をクリックします。
 - 酸素分子は三重項となるため **Multiplicity** を変更します。
25. **実行** をクリックします。
 - 問題サイズが比較的小さく高並列数で効率よく計算できないのと、後で並列の効果を確認するため、ここでは並列数は 1 とします。
 - リモートジョブとして実行する場合はこの段階でリモートジョブの設定を行います。
26. **ワークフロー設定** をクリックします。
27. 「継続ジョブを実行しますか？」と聞かれたら **いいえ** をクリックします。
28. **Basis set** を「cc-pVTZ」に変更し **OK** をクリックします。
29. **実行** をクリックします。
 - 問題サイズが比較的小さく高並列数で効率よく計算できないのと、後で並列の効果を確認するため、ここでは並列数は 1 とします。
 - リモートジョブとして実行する場合はこの段階でリモートジョブの設定を行います。
30. **ワークフロー設定** をクリックします。
31. 「継続ジョブを実行しますか？」と聞かれたら **いいえ** をクリックします。
32. **OK** をクリックします。
33. **並列数** を変更し **実行** をクリックします。
 - 問題サイズが比較的小さく高並列数で効率よく計算できないため、並列数は 2 ~4 程度とします。
34. メインウィンドウ左の **作業フォルダ** で work1 から 6 までをそれぞれクリックしてから **アクションの Log (Extracted)** をクリックし、表示される一番最後の「FINAL R=B3LYPV1R ENERGY IS」と「H TOTAL (kJ/mol)」の値を記録し、生成熱を計算します。

35. メインウィンドウ左の**作業フォルダ**で **work1** をクリックし、下の**アクション**で **Coordinate (Final), Charge & Dipole** をクリックします。
36. **分子表示エリア**で水素→酸素→残りの水素と続けてクリックします。
37. **分子表示エリア**左上の **Length, Angle** で H-O 間距離と H-O-H 間角度を確認します。
38. メインウィンドウ左下の**アクション**で **IR/Raman** をクリックします。
39. **IR Spectrum** ウィンドウ左のリストで 1700 cm⁻¹ 付近の行をクリックし、振動数を確認します。
40. **Animation** をクリックし、変角振動であることを確認します。
41. **IR Spectrum** ウィンドウ左のリストで 3800 cm⁻¹ 付近の行をクリックし、振動数を確認します。
42. **Animation** をクリックし、対称伸縮振動であることを確認します。
43. **IR Spectrum** ウィンドウ左のリストで 3900 cm⁻¹ 付近の行をクリックし、振動数を確認します。
44. **Animation** をクリックし、逆対称伸縮振動であることを確認します。
45. メインウィンドウ左下の**アクション**で **MO & Charge** をクリックします。
46. **Surface Setup** ウィンドウの **Quantity** を「ESP(Population Charge)/Surface」に変更し **Generate Cube** をクリックします。
47. **Cube Plot** ウィンドウで **Draw** をクリックし、分子表面上での静電ポテンシャル分布から分極の様子を確認します。
48. メインウィンドウ左の**作業フォルダ**で **work6** をクリックし、下の**アクション**で **Log (Extracted)** をクリックし、計算に要した時間を算出します。
49. メインウィンドウ左の**作業フォルダ**で **work7** をクリックし、下の**アクション**で **Log (Extracted)** をクリックし、計算に要した時間を算出します。
 - work6 と work7 の計算に要した時間から高速化の効果を確認します。

【実習 7：遷移状態探索】

別紙 [Winmostar チュートリアル MOPAC 化学反応解析 \(遷移状態・IRC 計算\)](#) を参照

【実習 8：様々な結晶の電子構造】

1. **ファイル | 新規プロジェクト** をクリックし、**プロジェクト名**に「band_structure」(必ず半角英字) と入力し**保存** をクリックします。
2. **ファイル | インポート | Samples ファイル | na.cif** をクリックし、**破棄して読み込み** をクリックします。
3. 上部ツールバーの**ソルバ**を「Quantum ESPRESSO」に変更し**ワークフロー設定** をクリックします。

4. 「...変換しますか？」と聞かれたらはいをクリックします。
5. **Properties** の **DOS, PDOS/Lowdin charge, Charge Density** にチェックを入れ、**Metal** にチェックを入れます。
6. **Details** をクリックし、**Basic** タブの **# of bands** を「Specify nbnd」に変更し **nbnd** の値を「10」に変更し **OK** をクリックします。
 - ある程度伝導帯のバンド構造も出力するために計算するバンド数を増やします。
7. **OK** をクリックし **実行** をクリックします。
8. メインウィンドウ左の **作業フォルダ** で work1 の状態が **END** になったら、**アクション** から **Projected Density of States** をクリックします。
9. **Projected Density of States** ウィンドウ右の **Band** で **Total** のチェックを外し、**Draw** をクリックします。
10. グラフ左下の **Show Setting** をクリックし、**X Axis, Y Axis** の **Autoscale** のチェックを外し適宜 **Min, Max** の値を調整します。
11. 状態密度の各軌道の寄与を確認後 **Close** をクリックします。
12. **ファイル | インポート | Samples ファイル | cu.cif** をクリックし、**破棄して読み込み** をクリックします。
13. 上部ツールバーの **ワークフロー設定** をクリックします。
14. 「継続ジョブを実行しますか？」と聞かれたらいいえをクリックします。
15. 「...変換しますか？」と聞かれたらはいをクリックします。
16. **OK** をクリックし、**実行** をクリックします。
17. Na と同様に結果解析を行います。
18. **ファイル | インポート | Samples ファイル | si.cif** をクリックし、**破棄して読み込み** をクリックします。
19. 上部ツールバーの **ワークフロー設定** をクリックします。
20. 「継続ジョブを実行しますか？」と聞かれたらいいえをクリックします。
21. 「...変換しますか？」と聞かれたらはいをクリックします。
22. **Metal** のチェックを外します。
23. 「...続行しますか？」と聞かれたらはいをクリックします。
24. **# of bands** を「100 % more」に変更します。
25. **OK** をクリックし、**実行** をクリックします。
26. Na と同様に結果解析を行います。

【実習 9：表面再構成】

別紙 [Winmostar チュートリアル Quantum ESPRESSO 表面再構成](#) を参照

- スラブ、低精度構造最適化計算を s001h_032c_1ec の 32 並列で実行した場

合 6 分程かかります。

- スラブ、高精度構造最適化計算を s001h_032c_1ec の 32 並列で実行した場合 7 分程かかります。

以上