Gaussian; 差分密度の可視化

文責 Shoki Yoshichika

参考; Gaussian 可視化のためのチュートリアル

http://www.hulinks.co.jp/support/gaussian/tutorial_gv.htm

電子遷移モーメントは基底状態の電子分布と励起状態の電子分布の差をとったものである。 そのため、以下の手順で差分密度を求めることにより、電子遷移モーメントの向きを推察 することができる。ここではアントラセンの HOMO と LUMO とで計算している。

TD-DFT を用いて励起エネルギーの計算を行う。(UV や CD を計算せずに差分密度を求め るだけなら TD-DFT でなくても OK...)

計算後の chk. ファイルを開く。

Edit の MOs をクリック。 Visualize の Update で選択したものの軌道を可視化。



Results \mathcal{O} surfaces/contours $\mathcal{E} \mathcal{O} \cup \mathcal{O}_{\circ}$

先ほど Update した軌道があるので、これを Cube Actions の Save Cube で保存。

G1:M1:V1 - Surfaces and Contours	×	
Cubes Available:	Cube Actions 👻	
MO (mo = 47 ; npts = 82,56,40 ; res (A) = 0.176392,0.176392,0.176392) MO (mo = 48 ; npts = 82,56,40 ; res (A) = 0.176392,0.176392,0.176392)		
Surfaces Available:	Surface Actions•	
MO ((MO = 47) ; Isovalue = 0.02) MO ((MO = 48) ; Isovalue = 0.02)		
Isovalue for new surfaces: MO = 0.020000 Density = 0.000400		
Contours Available:	Contour Actions•	
Add views for new surfaces/contours		
<u>C</u> lose <u>H</u> elp		

Gaussian 09W を開く。

Utilities の Cubman クリック。

G Gaussian 09 Revision-B.01-SMP			
File Process Utilities View Help			
	Edit Batch List	<u>Q</u>	
Batch Data: Active Job: Bun Proc	NewZMat CubeGen CubMan	Processing: Output File:	
Progress: proceeding	FreqChk FormChk UnFchk ChkChk C8609	*	
	External PDB Viewer		
•			
Convert to and from various chemistry system file formats			

↓こんな感じのが現れる。



SU 入力 enter

First input? とでるので先ほど保存した HOMO の cube ファイルを入力 (ドラックでできる)。 enter。

Is it formatted [no, yes, old]? y. 入力。 enter

second input? とでるので先ほど保存した LUMO の cube ファイルを入力。enter。y.入力。 Output file? とでるので ファイル名.cub と入力。enter。y.入力。

↓こんな感じ。



この後 enter で計算してくれる。

計算後のファイルはCドライブのG09Wの Scratch ファイルの中に保存されている。

保存したファイルを Gauss view で開く。

Results \mathcal{O} surfaces/contours $\mathcal{E} \mathcal{O} \cup \mathcal{O}_{\circ}$

Surface Action で可視化できる。後は MO と Density の値を変えて適当な大きさに。

