

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

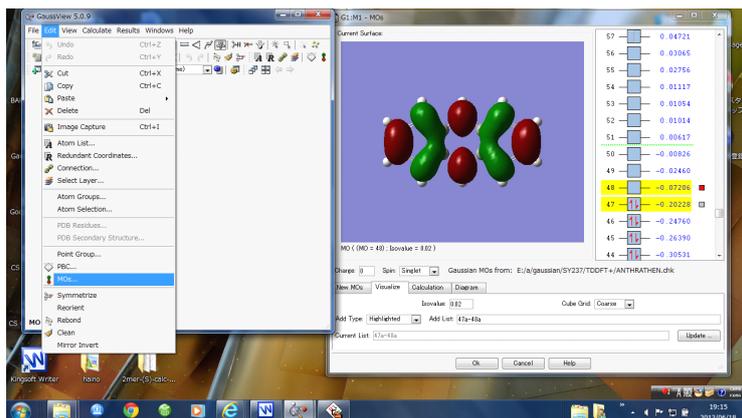
http://www.hulinks.co.jp/support/gaussian/tutorial_gv.htm

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。



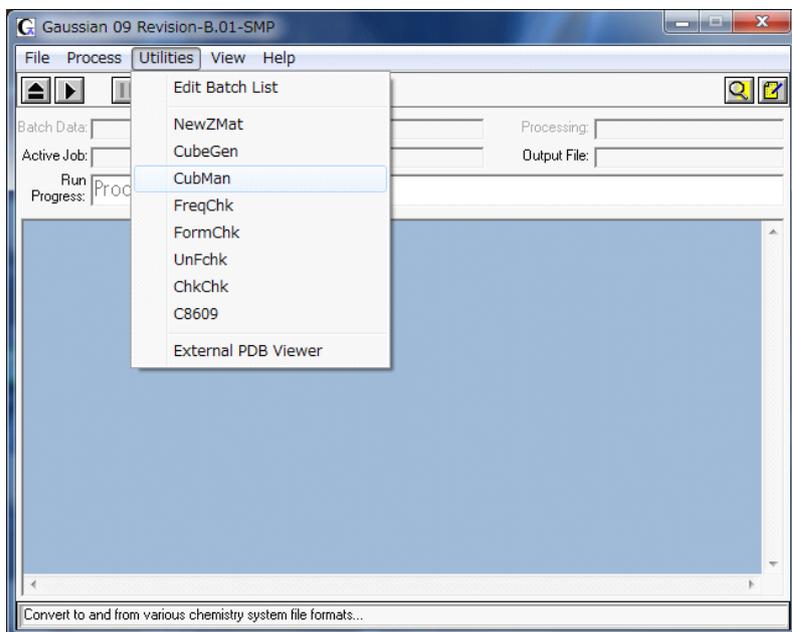
Results の surfaces/contours をクリック。

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

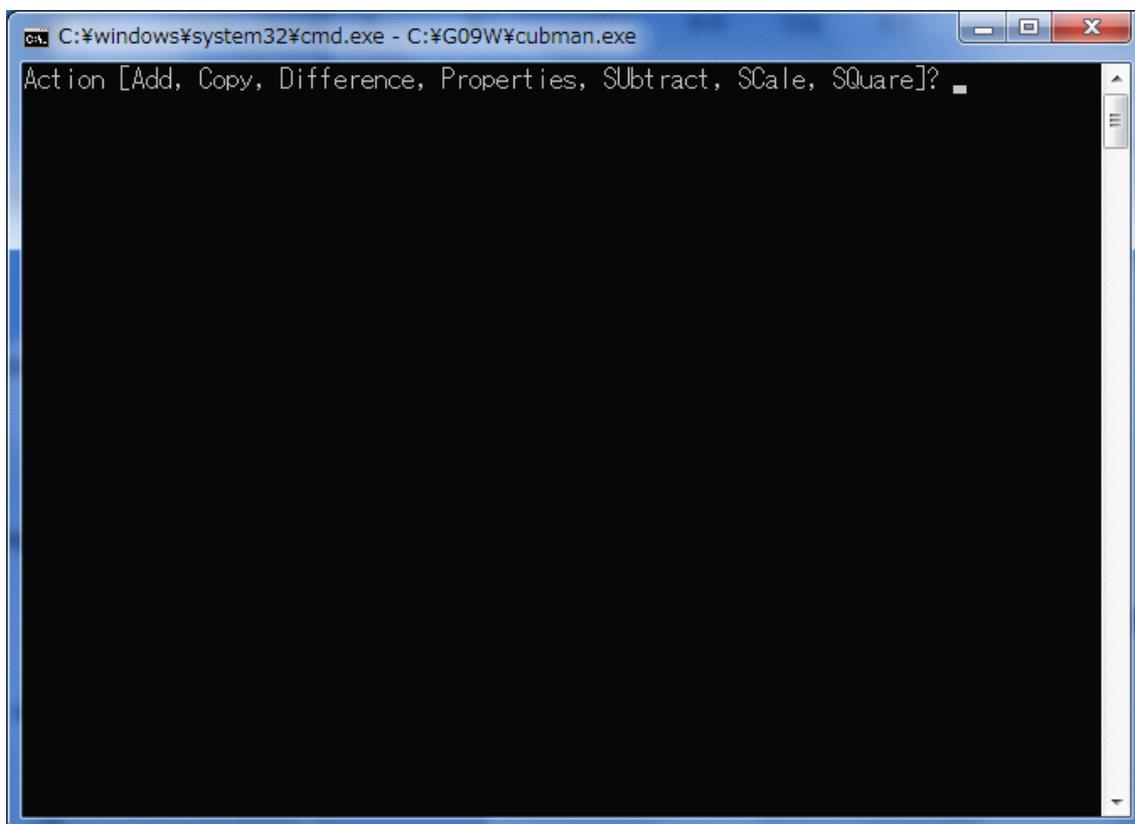


Gaussian 09W を開く。

Utilities の Cubman クリック。



↓こんな感じのが現れる。



SU 入力 enter

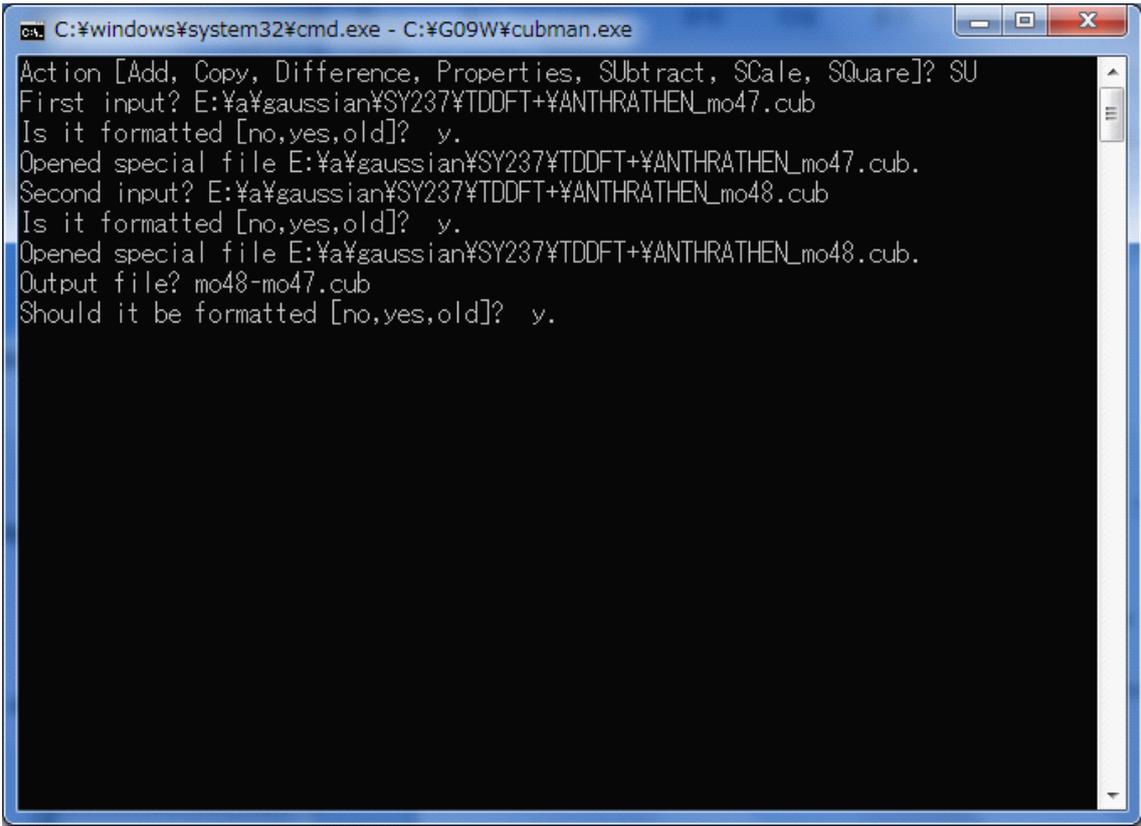
First input? とでるので先ほど保存した HOMO の cube ファイルを入力（ドラックでできる）。enter。

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。



```
C:\windows\system32\cmd.exe - C:\G09W\cubman.exe
Action [Add, Copy, Difference, Properties, Subtract, Scale, Square]? SU
First input? E:\a\gaussian\SY237\TDDFT+ANTHRATHEN_mo47.cub
Is it formatted [no, yes, old]? y.
Opened special file E:\a\gaussian\SY237\TDDFT+ANTHRATHEN_mo47.cub.
Second input? E:\a\gaussian\SY237\TDDFT+ANTHRATHEN_mo48.cub
Is it formatted [no, yes, old]? y.
Opened special file E:\a\gaussian\SY237\TDDFT+ANTHRATHEN_mo48.cub.
Output file? mo48-mo47.cub
Should it be formatted [no, yes, old]? y.
```

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 の surfaces/contours をクリック。

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。

