

1. 各種設定ファイルの移行方法

V8以前のユーザは、V9以降ガイドを参考に設定ファイルをV10向けに移行してください。

V9のユーザは、Winmostar V9のインストールフォルダ(デフォルトではC:\winmos9\)の下のUserPrefフォルダの中身を、Winmostar V10のインストールフォルダ(デフォルトではC:\winmos10\)の下のUserPrefフォルダにコピーしてください。

2. 各種メニュー、ウインドウの変更点 ※操作方法が大きく変わる部分を赤字で記載しています

Winmostar V9	Winmostar V10
<p>ライセンス・製品ラインナップ関係</p> <p>民間企業・官公庁各種ライセンスの使用権</p> <p>アドオンの使用権</p> <p>旧(メジャー)バージョンからのアップグレード</p> <p>シングルライセンス</p> <p>フルパック</p> <p>QM, MD, Solidパック</p> <p>サポートパック エコノミー</p> <p>サポートパック ベーシック</p> <p>サポートパック スタンダード</p> <p>サポートパック プレミアム</p>	<p>永久使用権から年間使用権に変更 また、全ての製品ラインナップに有償サポートが付属</p> <p>永久使用権から年間使用権に変更</p> <p>割引でのアップグレードは廃止</p> <p>V9以前のユーザも基本的に新規利用者と同じものを購入 ただし、V10無料移行キャンペーン期間中はこちらの利用を推奨</p> <p>特定ユーザライセンスに変更</p> <p>プレミアムに変更</p> <p>廃止</p> <p>代わりに、特定ユーザライセンスではエコノミーというラインナップ追加 また、V9のサイトライセンスのユーザのみ、V9と同じQM, MD, Solidパックと同等の分類、価格、契約内容でV10を使用可能</p> <p>別売りは廃止し、Winmostar V10製品本体に付属するレギュラーサポートに変更</p> <p>別売りは廃止し、Winmostar V10製品本体に付属するブロンズサポートに変更</p> <p>別売りは廃止し、Winmostar V10製品本体に付属するプラチナサポートに変更</p> <p>別売りは廃止し、Winmostar V10製品本体に付属するダイヤモンドサポートに変更</p>
<p>メインウインドウ</p> <p>左側ツールバーの[座標系を表示]ボタン</p> <p>上側ツールバーの[編集操作で適用される元素を選択]プルダウンメニュー</p> <p>上側ツールバーの[アニメーション]ボタン</p> <p>上側ツールバーの[エネルギー表示]ボタン</p> <p>上側ツールバーの[結果解析]ボタン</p>	<p>メインメニューの[表示]-[表示項目]-[座標系]に統合</p> <p>[編集操作向けの元素を選択]に名称変更</p> <p>以下のソルバでは[アニメーション]ボタンを押すとプルダウンメニューが出現し、以下の項目を選択</p> <ul style="list-style-type: none"> ・MOPAC → [構造最適化] ・Gaussian → [構造最適化] ・NWChem → [構造最適化] ・Quantum ESPRESSO → [構造最適化/BOMD] <p>以下のソルバでは[エネルギー表示]ボタンを押すとプルダウンメニューが出現し、以下の項目を選択</p> <ul style="list-style-type: none"> ・Quantum ESPRESSO → [SCFエネルギー変化] <p>以下のソルバでは[結果解析]ボタンを押して出現するプルダウンメニューの一部項目が、[アニメーション]または[エネルギー変化]ボタンのプルダウンメニューに移動</p> <ul style="list-style-type: none"> ・MOPACの[アニメーション(IRC, STEP)] → [アニメーション]ボタン ・Gaussianの[アニメーション(IRC/modred)] → [アニメーション]ボタン
<p>[ファイル]メニュー</p> <p>[ファイル]-[名前を付けて保存]でxyzファイルを保存</p>	<p>V10のデフォルトでは、ファイルフォーマットを以下のように変更したため、</p> <ul style="list-style-type: none"> ・1行目: 原子数 ・2行目: コメント ・3行目以降: 原子座標 <p>V9以前のフォーマットで保存したい場合は、[ツール]-[環境設定]の[xyzファイルの保存に旧式(V9以前)のフォーマットを使用]をチェック</p>
<p>[半経験QM]、[QM]、[MD]、[固体]共通</p> <p>メインメニューの各種結果解析関連の項目</p>	<p>各ソルバの[結果解析]サブメニューに集約</p>
<p>[半経験QM]、[QM]メニュー</p> <p>[Easy Setup]ウインドウの[Close]ボタン</p> <p>[Easy Setup]ウインドウの[Reset before applying changes]チェックボックス</p> <p>作業ディレクトリ名が全てのソルバで「*_temp」</p> <p>GAMESSの[Easy Setup]ウインドウの[B3LYP]</p>	<p>[OK]、[Cancel]ボタンを追加し、[OK]ボタンを押したら設定を反映、[Cancel]ボタンを押したら設定を破棄するよう変更</p> <p>デフォルトでON→OFFに変更</p> <p>ソルバごとに以下のように変更</p> <ul style="list-style-type: none"> MOPACは「*_mop_tmp」 CNDO/Sは「*_cnd_tmp」 GAMESSは「*_gms_tmp」 Gaussianは「*_gau_tmp」 NWChemは「*_nw_tmp」 <p>[B3LYP (original)]に名称変更</p>
<p>[MD]メニュー</p> <p>[MD]-[溶媒を配置/系を構築]の[Import]ボタン</p> <p>[MD]-[電荷を割り当て]メニュー</p> <p>[MD]-[Gromacs]または[LAMMPS]-[キーワード設定]</p>	<p>[Same as main window]に名称変更</p> <p>[MD]-[手動で電荷を割り当て]に名称変更</p> <p>電荷が割り当てられていない分子がある場合は、自動で[MD]-[自動で電荷を割り当て]を起動</p> <p>さらに、力場が割り当てられていない場合は、自動で[MD]-[Gromacs]または[LAMMPS]-[力場を割り当て]を起動</p>

<p>[MD]-[Gromacs]または[LAMMPS]-[キーワード設定]の[Force Field]タブ</p> <p>Gromacsキーワード設定ウィンドウの[constraints]</p> <p>LAMMPSキーワード設定ウィンドウの[Random Seed]、[Tdamp]、[Pdamp]</p> <p>LAMMPSキーワード設定ウィンドウの[Constrain hydrogen atoms]</p> <p>LAMMPSキーワード設定ウィンドウの[Pulled atoms]、[Restrained atoms]の[Set]ボタン</p> <p>LAMMPSキーワード設定ウィンドウ下部のキーワード自由入力欄</p>	<p>[MD]-[Gromacs]または[LAMMPS]-[力場を割り当て]として機能を分離し、またキーワード設定ウィンドウの[Basic]タブの[Force Field/Potential File]において汎用力場の種類を選択するよう変更</p> <ul style="list-style-type: none"> 有機物向けの汎用力場を使用する場合： <ul style="list-style-type: none"> →[力場を割り当て]ウィンドウで[自動でパラメータを割り当て]をチェック (LAMMPS向け)無機物系、ReaxFF、DPDを使用する場合： <ul style="list-style-type: none"> →[力場を割り当て]ウィンドウで[パラメータファイルを使用]をチェック すでに存在するトポロジ、座標ファイルを使用する場合： <ul style="list-style-type: none"> →[力場を割り当て]ウィンドウで[メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用]または[トポロジファイルに書かれたパラメータを使用]をチェック <p>[Advance]タブに移設</p> <p>[Basic]タブに移設</p> <p>[Advance]タブに移設</p> <ol style="list-style-type: none"> キーワード設定ウィンドウを立ち上げる前に、対象とする原子をメインウィンドウでグループ選択 メインメニューの[選択]-[グループを登録]でそのグループを登録 キーワード設定ウィンドウの[Pulled atoms]または[Restrained atoms]の[Select Group...]ボタンをクリックし、登録されたグループを選択 <p>[Manual Entry]タブに移設</p>
<p>[固体]メニュー</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[アニメーション]</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[CPMDアニメーション]</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[SCFエネルギー変化]</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[CPMDエネルギー変化]</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[NEBキーワード設定]、[NEB実行]、[遷移状態]</p> <p>[固体]-[Phonopy]、[BoltzTraP]</p>	<p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[アニメーション]-[構造最適化/BOMD]に移設</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[アニメーション]-[CPMDアニメーション]に移設</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[エネルギー変化]-[SCFエネルギー変化]に移設</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[エネルギー変化]-[CPMDエネルギー変化]に移設</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[Nudged Elastic Band]に移設</p> <p>[固体]-[Quantum ESPRESSO]-[Phonopy]、[BoltzTraP]に移設</p>
<p>リモートジョブ投入</p> <p>リモートサーバでのフォルダ構成が「~/ (Windowsユーザ名)/(ソルバ名)/(ジョブ名)」</p>	<p>「~/wm_(Windowsユーザ名)/(ソルバ名)/(ジョブ名)」に変更</p> <p>※V9以前で計算したデータを残したままアクセスしたい方は、「~/ (Windowsユーザ名)」フォルダを「~/wm_(Windowsユーザ名)」にmvするか、シンボリックリンクを作成</p>
<p>各種サブウィンドウ</p> <p>[MO Plot]ウィンドウの[ESP2]</p> <p>[Animation]ウィンドウの[Excel]ボタン</p>	<p>[ESP2(Population Charge)]に名称変更</p> <p>Animationウィンドウ内の[File]-[Export CSV]メニューに移設</p>
<p>ジョブマネージャ</p> <p>AutoShutdownチェックボックス</p> <p>Pauseチェックボックス</p>	<p>[Option]-[Auto Shutdown]メニュー</p> <p>[Option]-[Pause]メニュー</p>

その他不明点はお問い合わせください。

以上