# Winmostar™ User Manual

リリース *10.8.2* 

X-Ability Co., Ltd.

2022年04月06日

## Contents

1	はじめに	2
2	インストール方法	29
3	画面の説明・操作方法	33
4	基本的な操作の流れ	37
5	初期構造の作成方法	40
6	各種メニュー・ウィンドウ	48
7	リモートジョブ	189
8	アドオン	198
9	他のソフトウェアとの連携	207
10	その他のトピック	208
11	既知の不具合	214
12	よくある質問・トラブルシューティング	218
Bit	Bibliography	

本書には、Winmostar(TM)の各機能の動作・操作方法が書かれています。本書の最新版は公式サイトから入手可能です。

Winmostar(TM)を初めて使う方は ビギナーズガイド を参照してください。

ご不明点がある場合、予想通りに動かない場合は、 随時更新されている よくある質問・トラブルシューティン グ をご確認ください。

化学反応解析や特定の物性の算出など、目的別の具体的な操作手順は、 各種チュートリアル を参照してくだ さい。

## Chapter 1

## はじめに

Winmostar(TM) は量子化学計算、第一原理計算、分子動力学計算を効率的に操作できるグラフィカルユーザー インターフェースを提供します。初期構造の作成、計算の実行から結果解析に至るまで、シミュレーションに 必要な一通りの操作を Winmostar(TM) 上で実施することができます。

分子のモデリング機能については 100,000 原子まで動作確認されています。MD 計算の機能についてはより大きな系で動作確認されています。

## 1.1 引用について

学会発表、論文などで Winmostar(TM)を使用して作成したデータを発表する際、Winmostar(TM)本体については、例えば以下の様に記載してください。

Winmostar V10, X-Ability Co. Ltd., Tokyo, Japan, 2020.

Winmostar(TM)が呼び出したソルバや各種補助プログラムの引用については、それぞれのソフトウエアの指示 に従って下さい。

### 1.2 本マニュアルの表記規則

本マニュアルは以下の表記規則に従っています:

Ctrl+A キーボードのキーまたはキーの組み合せの操作を示します。

OK ラベル、ボタンなど GUI に表示される文字列を示します。

ツール → 環境設定 → 基本 → ライセンスコード メニュー、タブなどをたどる流れを示します。上記の例は、 メニューから ツール → 環境設定 とたどり、開いたウィンドウの 基本 というタブをクリックし、その中 にあるライセンスコード というラベルの付いた GUI のことを意味します。

wmset.ini,C\:winmos10\UserPref ファイル名やディレクトリ名を示します。

1s /usr/local/bin コマンドプロンプト、ターミナルで実行するコマンドを示します。

3.14159 GUI のテキストボックスへの入力を示します。

注釈:補足事項を示します。

警告:注意点を示します。

## 1.3 使用しているライブラリ

Winmostar は一部の処理に下記のライブラリ・ソフトウェアを使用しています。

#### OpenCubegen

OpenCubegen Cube Generation for Gaussian, Gamess, and MOPAC packages Author Mitsuo Shoji mitsuo.shoji@apchem.nagoya-u.ac.jp Home page: http://www.geocities.jp/dr\_mitsuos/index.html Copyright (c) All rights reserved. 2009- by Mitsuo Shoji

#### FermiSurfer

Copyright (c) 2014 Mitsuaki Kawamura

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.

#### Abbrevia 5.0

```
MOZILLA PUBLIC LICENSE
Version 1.1
```

1. Definitions.

1.0.1. "Commercial Use" means distribution or otherwise making the Covered Code available to a third party.

\_\_\_\_\_

1.1. "Contributor" means each entity that creates or contributes to the creation of Modifications. 1.2. "Contributor Version" means the combination of the Original Code, prior Modifications used by a Contributor, and the → Modifications made by that particular Contributor. 1.3. "Covered Code" means the Original Code or Modifications or the combination of the Original Code and Modifications, in each case including portions thereof. 1.4. "Electronic Distribution Mechanism" means a mechanism generally accepted in the software development community for the electronic transfer of data. 1.5. "Executable" means Covered Code in any form other than Source Code. 1.6. "Initial Developer" means the individual or entity identified as the Initial Developer in the Source Code notice required by\_ →Exhibit Δ 1.7. "Larger Work" means a work which combines Covered Code or portions thereof with code not governed by the terms of this, →License. 1.8. "License" means this document. 1.8.1. "Licensable" means having the right to grant, to the maximum extent possible, whether at the time of the initial grant or subsequently acquired, any and all of the rights conveyed herein. 1.9. "Modifications" means any addition to or deletion from the substance or structure of either the Original Code or any previous Modifications. When Covered Code is released as a series of files, a Modification is: A. Any addition to or deletion from the contents of a file containing Original Code or previous Modifications. B. Any new file that contains any part of the Original Code or previous Modifications. 1.10. "Original Code" means Source Code of computer software code which is described in the Source Code notice required by Exhibit A. ⇔as Original Code, and which, at the time of its release under this License is not already Covered Code governed by this License. 1.10.1. "Patent Claims" means any patent claim(s), now owned or hereafter acquired, including without limitation, method, process, and apparatus claims, in any patent Licensable by grantor. 1.11. "Source Code" means the preferred form of the Covered Code for

```
(前のページからの続き)
    making modifications to it, including all modules it contains, plus
    any associated interface definition files, scripts used to control
    compilation and installation of an Executable, or source code
    differential comparisons against either the Original Code or another
    well known, available Covered Code of the Contributor's choice. The
    Source Code can be in a compressed or archival form, provided the
    appropriate decompression or de-archiving software is widely,
⊶available
    for no charge.
    1.12. "You" (or "Your") means an individual or a legal entity
    exercising rights under, and complying with all of the terms of,
⇔this
    License or a future version of this License issued under Section 6.
\rightarrow 1.
    For legal entities, "You" includes any entity which controls, is
    controlled by, or is under common control with You. For purposes of
    this definition, "control" means (a) the power, direct or indirect,
    to cause the direction or management of such entity, whether by
    contract or otherwise, or (b) ownership of more than fifty percent
    (50%) of the outstanding shares or beneficial ownership of such
    entity.
2. Source Code License.
    2.1. The Initial Developer Grant.
    The Initial Developer hereby grants You a world-wide, royalty-free,
    non-exclusive license, subject to third party intellectual property
    claims:
          (a) under intellectual property rights (other than patent or
         trademark) Licensable by Initial Developer to use, reproduce,
         modify, display, perform, sublicense and distribute the
→Original
         Code (or portions thereof) with or without Modifications, and/
∽or
         as part of a Larger Work; and
          (b) under Patents Claims infringed by the making, using or
         selling of Original Code, to make, have made, use, practice,
         sell, and offer for sale, and/or otherwise dispose of the
         Original Code (or portions thereof).
         (c) the licenses granted in this Section 2.1(a) and (b) are
         effective on the date Initial Developer first distributes
         Original Code under the terms of this License.
          (d) Notwithstanding Section 2.1(b) above, no patent license is
         granted: 1) for code that You delete from the Original Code; 2)
         separate from the Original Code; or 3) for infringements_
⇔caused
         by: i) the modification of the Original Code or ii) the
         combination of the Original Code with other software or
→devices.
    2.2. Contributor Grant.
    Subject to third party intellectual property claims, each
 Contributor
```

hereby grants You a world-wide, royalty-free, non-exclusive license (a) under intellectual property rights (other than patent or trademark) Licensable by Contributor, to use, reproduce,... →modify, display, perform, sublicense and distribute the Modifications created by such Contributor (or portions thereof) either on an unmodified basis, with other Modifications, as Covered Code and/or as part of a Larger Work; and (b) under Patent Claims infringed by the making, using, or selling of Modifications made by that Contributor either alone and/or in combination with its Contributor Version (or portions of such combination), to make, use, sell, offer for sale, have made, and/or otherwise dispose of: 1) Modifications made by →that Contributor (or portions thereof); and 2) the combination of Modifications made by that Contributor with its Contributor Version (or portions of such combination). (c) the licenses granted in Sections 2.2(a) and 2.2(b) are effective on the date Contributor first makes Commercial Use of the Covered Code. Notwithstanding Section 2.2(b) above, no patent license. (d) ⇔is granted: 1) for any code that Contributor has deleted from the Contributor Version; 2) separate from the Contributor Version; 3) for infringements caused by: i) third party modifications ∽of Contributor Version or ii) the combination of Modifications →made by that Contributor with other software (except as part of the Contributor Version) or other devices; or 4) under Patent. →Claims infringed by Covered Code in the absence of Modifications made\_ ⇔bу that Contributor. 3. Distribution Obligations. 3.1. Application of License. The Modifications which You create or to which You contribute are governed by the terms of this License, including without limitation Section 2.2. The Source Code version of Covered Code may be distributed only under the terms of this License or a future version of this License released under Section 6.1, and You must include a copy of this License with every copy of the Source Code You distribute. You may not offer or impose any terms on any Source Code version that alters or restricts the applicable version of this License or the recipients' rights hereunder. However, You may\_ →include an additional document offering the additional rights described in Section 3.5. 3.2. Availability of Source Code.

```
Any Modification which You create or to which You contribute must be
    made available in Source Code form under the terms of this License
    either on the same media as an Executable version or via an accepted
    Electronic Distribution Mechanism to anyone to whom you made an
    Executable version available; and if made available via Electronic
    Distribution Mechanism, must remain available for at least twelve.
\rightarrow (12)
    months after the date it initially became available, or at least six
    (6) months after a subsequent version of that particular,
→Modification
    has been made available to such recipients. You are responsible for
    ensuring that the Source Code version remains available even if the
    Electronic Distribution Mechanism is maintained by a third party.
    3.3. Description of Modifications.
    You must cause all Covered Code to which You contribute to contain a
    file documenting the changes You made to create that Covered Code,
→and
    the date of any change. You must include a prominent statement that
    the Modification is derived, directly or indirectly, from Original
    Code provided by the Initial Developer and including the name of the
    Initial Developer in (a) the Source Code, and (b) in any notice in_
⊶an
    Executable version or related documentation in which You describe_
→the
    origin or ownership of the Covered Code.
    3.4. Intellectual Property Matters
         (a) Third Party Claims.
         If Contributor has knowledge that a license under a third party
→'s
         intellectual property rights is required to exercise the rights
         granted by such Contributor under Sections 2.1 or 2.2,
         Contributor must include a text file with the Source Code
         distribution titled "LEGAL" which describes the claim and the
         party making the claim in sufficient detail that a recipient.
→will
         know whom to contact. If Contributor obtains such knowledge,
⊶after
         the Modification is made available as described in Section 3.2,
         Contributor shall promptly modify the LEGAL file in all copies
         Contributor makes available thereafter and shall take other
⇔steps
         (such as notifying appropriate mailing lists or newsgroups)
         reasonably calculated to inform those who received the Covered
         Code that new knowledge has been obtained.
         (b) Contributor APIs.
         If Contributor's Modifications include an application
→programming
         interface and Contributor has knowledge of patent licenses
→which
         are reasonably necessary to implement that API, Contributor,
→must
         also include this information in the LEGAL file.
```

Representations. (C) Contributor represents that, except as disclosed pursuant to Section 3.4(a) above, Contributor believes that Contributor's Modifications are Contributor's original creation(s) and/or Contributor has sufficient rights to grant the rights conveyed\_ **→**by this License. 3.5. Required Notices. You must duplicate the notice in Exhibit A in each file of the ⇔Source Code. If it is not possible to put such notice in a particular, →Source Code file due to its structure, then You must include such notice, ⇔in a location (such as a relevant directory) where a user would be likely to look for such a notice. If You created one or more, →Modification(s) You may add your name as a Contributor to the notice described in Exhibit A. You must also duplicate this License in any →documentation for the Source Code where You describe recipients' rights or →ownership rights relating to Covered Code. You may choose to offer, and to charge a fee for, warranty, support, indemnity or liability obligations to one or more recipients of Covered Code. However, You may do so only on Your own behalf, and not on behalf of the Initial Developer or any Contributor. You must make it absolutely clear than any such warranty, support, indemnity or liability obligation is offered by You alone, and You hereby agree to indemnify the Initial Developer and every Contributor for any liability incurred by the Initial Developer or such Contributor as a result of warranty, support, indemnity or liability terms You offer. 3.6. Distribution of Executable Versions. You may distribute Covered Code in Executable form only if the requirements of Section 3.1-3.5 have been met for that Covered Code, and if You include a notice stating that the Source Code version of the Covered Code is available under the terms of this License, including a description of how and where You have fulfilled the obligations of Section 3.2. The notice must be conspicuously ⇔included in any notice in an Executable version, related documentation or collateral in which You describe recipients' rights relating to the Covered Code. You may distribute the Executable version of Covered Code or ownership rights under a license of Your choice, which may contain terms different from this License, provided that You are in compliance with the terms of this License and that the license for, →the Executable version does not attempt to limit or alter the recipient ⇔'s rights in the Source Code version from the rights set forth in this License. If You distribute the Executable version under a different license You must make it absolutely clear that any terms which\_ →differ from this License are offered by You alone, not by the Initial

```
Developer or any Contributor. You hereby agree to indemnify the
    Initial Developer and every Contributor for any liability incurred.
⇔by
    the Initial Developer or such Contributor as a result of any such
    terms You offer.
    3.7. Larger Works.
    You may create a Larger Work by combining Covered Code with other.
⇔code
    not governed by the terms of this License and distribute the Larger
    Work as a single product. In such a case, You must make sure the
    requirements of this License are fulfilled for the Covered Code.
4. Inability to Comply Due to Statute or Regulation.
    If it is impossible for You to comply with any of the terms of this
    License with respect to some or all of the Covered Code due to
    statute, judicial order, or regulation then You must: (a) comply_
⇔with
    the terms of this License to the maximum extent possible; and (b)
    describe the limitations and the code they affect. Such description
    must be included in the LEGAL file described in Section 3.4 and must
    be included with all distributions of the Source Code. Except to the
    extent prohibited by statute or regulation, such description must be
    sufficiently detailed for a recipient of ordinary skill to be able,
→to
    understand it.
5. Application of this License.
    This License applies to code to which the Initial Developer has
    attached the notice in Exhibit A and to related Covered Code.
6. Versions of the License.
    6.1. New Versions.
    Netscape Communications Corporation ("Netscape") may publish revised
    and/or new versions of the License from time to time. Each version
    will be given a distinguishing version number.
    6.2. Effect of New Versions.
    Once Covered Code has been published under a particular version of ...
→the
    License, You may always continue to use it under the terms of that
    version. You may also choose to use such Covered Code under the_
→terms
    of any subsequent version of the License published by Netscape. No.
→one
    other than Netscape has the right to modify the terms applicable to
    Covered Code created under this License.
    6.3. Derivative Works.
    If You create or use a modified version of this License (which you,
→mav
    only do in order to apply it to code which is not already Covered_
→Code
```

governed by this License), You must (a) rename Your license so that the phrases "Mozilla", "MOZILLAPL", "MOZPL", "Netscape", "MPL", "NPL" or any confusingly similar phrase do not appear in your license (except to note that your license differs from this License) and (b) otherwise make it clear that Your version of the license contains terms which differ from the Mozilla Public License and Netscape Public License. (Filling in the name of the Initial Developer, Original Code or Contributor in the notice described in Exhibit A shall not of themselves be deemed to be modifications of this License.) 7. DISCLAIMER OF WARRANTY. COVERED CODE IS PROVIDED UNDER THIS LICENSE ON AN "AS IS" BASIS, WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EITHER EXPRESSED OR IMPLIED,...  $\rightarrow$  INCLUDING, WITHOUT LIMITATION, WARRANTIES THAT THE COVERED CODE IS FREE OF DEFECTS, MERCHANTABLE, FIT FOR A PARTICULAR PURPOSE OR NON- $\hookrightarrow$  INFRINGING. THE ENTIRE RISK AS TO THE QUALITY AND PERFORMANCE OF THE COVERED. →CODE IS WITH YOU. SHOULD ANY COVERED CODE PROVE DEFECTIVE IN ANY RESPECT, YOU (NOT THE INITIAL DEVELOPER OR ANY OTHER CONTRIBUTOR) ASSUME THE COST OF ANY NECESSARY SERVICING, REPAIR OR CORRECTION. THIS\_ → DISCLAIMER OF WARRANTY CONSTITUTES AN ESSENTIAL PART OF THIS LICENSE. NO USE OF ANY COVERED CODE IS AUTHORIZED HEREUNDER EXCEPT UNDER THIS, →DISCLAIMER. 8. TERMINATION. 8.1. This License and the rights granted hereunder will terminate automatically if You fail to comply with terms herein and fail to ⇔cure such breach within 30 days of becoming aware of the breach. All sublicenses to the Covered Code which are properly granted shall survive any termination of this License. Provisions which, by their nature, must remain in effect beyond the termination of this License shall survive. 8.2. If You initiate litigation by asserting a patent infringement claim (excluding declatory judgment actions) against Initial\_ →Developer or a Contributor (the Initial Developer or Contributor against whom You file such action is referred to as "Participant") alleging\_ →that: (a) such Participant's Contributor Version directly or indirectly infringes any patent, then any and all rights granted by such Participant to You under Sections 2.1 and/or 2.2 of this License shall, upon 60 days notice from Participant terminate prospectively, unless if within 60 days after receipt of notice You either: (i) agree in writing to pay Participant a mutually agreeable reasonable royalty for Your past and future use of Modifications made by such Participant, or (ii) withdraw Your litigation claim with respect to the Contributor Version against such Participant. If within 60 days

of notice, a reasonable royalty and payment arrangement are not mutually agreed upon in writing by the parties or the litigation. ⇔claim is not withdrawn, the rights granted by Participant to You under Sections 2.1 and/or 2.2 automatically terminate at the expiration of the 60 day notice period specified above. (b) any software, hardware, or device, other than such Participant ∽'s Contributor Version, directly or indirectly infringes any patent, →then any rights granted to You by such Participant under Sections 2.1(b) and 2.2(b) are revoked effective as of the date You first made,  $\rightarrow$ used, sold, distributed, or had made, Modifications made by that Participant. 8.3. If You assert a patent infringement claim against Participant alleging that such Participant's Contributor Version directly or indirectly infringes any patent where such claim is resolved (such, ⇔as by license or settlement) prior to the initiation of patent infringement litigation, then the reasonable value of the licenses granted by such Participant under Sections 2.1 or 2.2 shall be taken into account in determining the amount or value of any payment or license. 8.4. In the event of termination under Sections 8.1 or 8.2 above, all end user license agreements (excluding distributors and  $\rightarrow$  resellers) which have been validly granted by You or any distributor hereunder prior to termination shall survive termination. 9. LIMITATION OF LIABILITY. UNDER NO CIRCUMSTANCES AND UNDER NO LEGAL THEORY, WHETHER TORT (INCLUDING NEGLIGENCE), CONTRACT, OR OTHERWISE, SHALL YOU, THE\_ → TNTTTAL DEVELOPER, ANY OTHER CONTRIBUTOR, OR ANY DISTRIBUTOR OF COVERED. →CODE. OR ANY SUPPLIER OF ANY OF SUCH PARTIES, BE LIABLE TO ANY PERSON FOR ANY INDIRECT, SPECIAL, INCIDENTAL, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES OF ANY CHARACTER INCLUDING, WITHOUT LIMITATION, DAMAGES FOR LOSS OF →GOODWILL, WORK STOPPAGE, COMPUTER FAILURE OR MALFUNCTION, OR ANY AND ALL OTHER COMMERCIAL DAMAGES OR LOSSES, EVEN IF SUCH PARTY SHALL HAVE BEEN INFORMED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGES. THIS LIMITATION OF LIABILITY SHALL NOT APPLY TO LIABILITY FOR DEATH OR PERSONAL INJURY RESULTING FROM SUCH PARTY'S NEGLIGENCE TO THE EXTENT APPLICABLE LAW PROHIBITS SUCH LIMITATION. SOME JURISDICTIONS DO NOT ALLOW THE EXCLUSION OR LIMITATION OF INCIDENTAL OR CONSEQUENTIAL DAMAGES, SO THIS EXCLUSION AND LIMITATION MAY NOT APPLY TO YOU. 10. U.S. GOVERNMENT END USERS. The Covered Code is a "commercial item," as that term is defined in

```
48 C.F.R. 2.101 (Oct. 1995), consisting of "commercial computer
    software" and "commercial computer software documentation," as such
    terms are used in 48 C.F.R. 12.212 (Sept. 1995). Consistent with 48
    C.F.R. 12.212 and 48 C.F.R. 227.7202-1 through 227.7202-4 (June,
\rightarrow 1995),
    all U.S. Government End Users acquire Covered Code with only those
    rights set forth herein.
11. MISCELLANEOUS.
    This License represents the complete agreement concerning subject
    matter hereof. If any provision of this License is held to be
    unenforceable, such provision shall be reformed only to the extent
    necessary to make it enforceable. This License shall be governed by
    California law provisions (except to the extent applicable law, if
    any, provides otherwise), excluding its conflict-of-law provisions.
    With respect to disputes in which at least one party is a citizen,
⇔of,
    or an entity chartered or registered to do business in the United
    States of America, any litigation relating to this License shall be
    subject to the jurisdiction of the Federal Courts of the Northern
    District of California, with venue lying in Santa Clara County,
    California, with the losing party responsible for costs, including
    without limitation, court costs and reasonable attorneys' fees and
    expenses. The application of the United Nations Convention on
    Contracts for the International Sale of Goods is expressly excluded.
    Any law or regulation which provides that the language of a contract
    shall be construed against the drafter shall not apply to this
    License.
12. RESPONSIBILITY FOR CLAIMS.
    As between Initial Developer and the Contributors, each party is
    responsible for claims and damages arising, directly or indirectly,
    out of its utilization of rights under this License and You agree to
    work with Initial Developer and Contributors to distribute such
    responsibility on an equitable basis. Nothing herein is intended or
    shall be deemed to constitute any admission of liability.
13. MULTIPLE-LICENSED CODE.
    Initial Developer may designate portions of the Covered Code as
    "Multiple-Licensed". "Multiple-Licensed" means that the Initial
    Developer permits you to utilize portions of the Covered Code under
    Your choice of the NPL or the alternative licenses, if any,
→ specified
    by the Initial Developer in the file described in Exhibit A.
EXHIBIT A -Mozilla Public License.
    ``The contents of this file are subject to the Mozilla Public_
→License
    Version 1.1 (the "License"); you may not use this file except in
    compliance with the License. You may obtain a copy of the License at
    http://www.mozilla.org/MPL/
```

```
Software distributed under the License is distributed on an "AS IS"
    basis, WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, either express or implied. See,
→the
    License for the specific language governing rights and limitations
    under the License.
    The Original Code is ____
    The Initial Developer of the Original Code is ____
    Portions created by ____
                                          ____ are Copyright (C) _____
                     _____. All Rights Reserved.
    Contributor(s):
    Alternatively, the contents of this file may be used under the terms
    of the _____ license (the "[___] License"), in which case the
    provisions of [____] License are applicable instead of those
    above. If you wish to allow use of your version of this file only
    under the terms of the [____] License and not to allow others to use
    your version of this file under the MPL, indicate your decision by
    deleting the provisions above and replace them with the notice and
    other provisions required by the [___] License. If you do not_
→delete
    the provisions above, a recipient may use your version of this file
    under either the MPL or the [___] License."
    [NOTE: The text of this Exhibit A may differ slightly from the text.]
⊶of
    the notices in the Source Code files of the Original Code. You,
⇔should
    use the text of this Exhibit A rather than the text found in the
    Original Code Source Code for Your Modifications.]
```

**TeeChart Standard** 

```
_____
TeeChart Standard v2018
Copyright (c) 1995-2018 by Steema Software.
All Rights Reserved.
_____
SOFTWARE LICENSING CONTRACT
NOTICE TO USER: THIS IS A CONTRACT. BY CLICKING THE 'OK' BUTTON BELOW_
→DURING INSTALLATION,
YOU ACCEPT ALL THE TERMS AND CONDITIONS OF THIS AGREEMENT.
_____
License Terms:
_____
-- A Single License of TeeChart Standard VCL is per developer.
-- A Site License of TeeChart Standard VCL is per "physical place" with.
→unlimited number of developers
under the same company building(s).
-- For special licensing issues, volume discounts, integrations or _
→redistribution please contact us at:
sales@steema.com
```

TeeChart Standard is royalty free under the following use conditions \_\_\_\_\_ You can freely distribute TeeChart Standard code COMPILED into your, →applications as executables or dynamic link libraries, including as .Net Assemblies, VCL Packages, OCX. ↔ ActiveX Controls or ActiveX Forms, excepting compilation as design-time packages or compilation into.  $\hookrightarrow$ a DLL or OCX or other library for use as a designtime tool or for a Web server scripting environment.  $\rightarrow$  The latter case requires that a WebServer runtime license be registered per installed server. You are NOT allowed to distribute stand-alone TeeChart Standard files, →TeeChart Standard source code, TeeChart Standard manual and help file or everything else contained in\_ →this software without receiving our written permission. You are NOT allowed to distribute the TeeChart design-time package files\_ →and/or any of the TeeChart \\*.DCP or any other file from the source code files. You can freely distribute the TeeChart evaluation version, located at\_ →our web site http://www.steema.com END-USER LICENSE AGREEMENT FOR STEEMA SOFTWARE SL IMPORTANT- READ CAREFULLY BEFORE INSTALLING THE SOFTWARE. This End User License Agreement (this "EULA") contains the terms and →conditions regarding your use of the SOFTWARE (as defined below) and material limitations to your rights\_  $\rightarrow$  in that regard. You should read this EULA carefully. By installing the TeeChart Standard VCL software (hereinafter the →"SOFTWARE"), you are accepting the following EULA. I. THIS EULA. 1. Software Covered by this EULA. This EULA governs your use of the Steema Software SL ("Steema") SOFTWARE, →enclosed either as part of a SOFTWARE installer or otherwise accompanied herewith. The term ↔"SOFTWARE" includes, to the extent provided by Steema: 1) any revisions, updates and/or upgrades thereto; 2) any data, image or executable files, databases, data engines, →computer software, or similar items customarily used or distributed with computer software products; 3) anything in any form whatsoever intended to be used with or in.  $\rightarrow$  conjunction with the SOFTWARE; and 4) any associated media, documentation (including physical, electronic\_  $\leftrightarrow$ and online) and printed materials (the "Documentation"). 2. This EULA is a legal agreement between you and Steema. If you are acting as an agent of a company or another legal person, such\_  $\rightarrow$ as an officer or other employee acting for your employer, then "you" and "your" mean your principal, the →entity or other legal person for (次のページに続く)

```
(前のページからの続き)
```

```
whom you are acting. However, importantly, even if you are acting as an
→agent for another, you may still
be personally liable for violation of laws such as copyright.
\rightarrow infringement.
This EULA is a legal agreement between you and Steema.
You intend to be legally bound to this EULA to the same extent as if,
→Steema and you physically signed
this EULA.
By installing, copying, or otherwise using the SOFTWARE, you agree to be.
\hookrightarrow bound by the terms and
conditions contained in this EULA.
If you do not agree to all of the terms and conditions contained in this,
→EULA, you may not install or use
the SOFTWARE. If you have already installed or begun to install the.
↔ SOFTWARE you should cancel any
install in progress and uninstall the SOFTWARE. If you do not agree to_
→all of these terms and conditions,
then you must promptly return the uninstalled SOFTWARE to the place from_
→which you purchased it in
accordance with the return policies of that place.
II. YOUR LICENSE TO DEVELOP AND TO DISTRIBUTE.
Detailed below, this EULA grants you three licenses:
1) a license to use the SOFTWARE to develop other software products (the
→ "Development License");
2) a license to use and/or distribute the Developed Software (the
→ "Distribution License"); and
3) a license to use and/or distribute the Developed Software on a_
→Network Server (the "Web Server
License"). All of these licenses (individually and collectively, the
\rightarrow "Licenses") are explained and defined in
more detail below.
1. Definitions. Terms and their respective meanings as used in this EULA:
"Network Server" means a computer with one or more computer central_
→processing units (CPU's) that
operates for the purpose of serving other computers logically or,
→physically connected to it, including,
but not limited to, other computers connected to it on an internal.
→network, intranet or the Internet.
"Web Server" means a type of Network Server that serves other computers.
\hookrightarrow more particularly connected
to it over an intranet or the Internet.
"Developed Software" means those computer software products that are_
\rightarrow developed by or through the
use of the SOFTWARE. "Developed Web Server Software" means those,
→Developed Software products
that reside logically or physically on at least one Web Server and are_
\hookrightarrowoperated (executed therein) by the
Web Server's central processing unit(s) (CPU).
"Developed Desktop Software" means those Developed Software products_
→that are not Developed Web
Server Software, including, for example, standalone applications.
"Redistributable Files" means the SOFTWARE files or other portions of
→the SOFTWARE that are provided
```

```
by Steema and are identified as such in the Documentation for.
→distribution by you with the Developed
Software.
"Developer" means a person using the SOFTWARE in accordance with the,
→terms and conditions of this
EULA.
"Development License" is a "Per-seat license". Per-seat means the,
→license is required for each machine
that the SOFTWARE will reside on. Every machine installing, running and/
\hookrightarrow or using the software for
development purposes must have a licensed copy and its appropriate.
⇒license.
"Developer seat" is the use of one "Per seat" licensed copy of the_
→SOFTWARE by one concurrent
Developer.
2. Your Development License.
You are hereby granted a limited, royalty-free, non-exclusive right to_
→use the SOFTWARE to design,
develop, and test Developed Software, on the express condition that, and
\rightarrowonly for so long as, you fully
comply with all terms and conditions of this EULA.
The SOFTWARE is licensed to you on a Per Seat License basis.
The Development License means that you may perform a single install of_
→the SOFTWARE for use in
designing, testing and creating Developed Software on a single computer_
→with a single set of input
devices, restricting the use of such computer to one concurrent
→Developer. Conversely, you may not
install or use the SOFTWARE on a computer that is a network server or a \_
\hookrightarrow computer at which the
SOFTWARE is used by more than one Developer.
You may not network the SOFTWARE or any component part of it, where it,
\rightarrow is or may be used by more
than one Developer unless you purchase an additional Development License.
⇔for each Developer. You
must purchase another separate license to the SOFTWARE in order to add_
→additional developer seats if
the additional developers are accessing the SOFTWARE on a computer_
→network. If the SOFTWARE is
used to create Developed Web Server Software, then you may perform a_
→single install of the SOFTWARE
for use in designing, testing and creating Developed Web Server Software_
→by a single Developer on a
single computer or Network Server. No additional End User Licenses are_
→required for additional CPUs on
the single computer or Network Server.
In all cases, you may not use Steema's name, logo, or trademarks to_
→market your Developed Software
without the express written consent of Steema; agree to indemnify, hold_
→harmless, and defend Steema,
its suppliers and resellers, from and against any claims or lawsuits,
→including lawyer's fees that may arise
from the use or distribution of your Developed Software; you may use the
→SOFTWARE only to create
Developed Software that is significantly different than the SOFTWARE.
```

```
(前のページからの続き)
```

3. Your Distribution License. License to Distribute Developed Desktop Software. Subject to the terms, →and conditions in this EULA, you are granted the license to use and to distribute Developed Desktop. →Software on a royalty-free basis, provided that the Developed Desktop Software incorporates the SOFTWARE,  $\rightarrow$ as an integral part of the Developed Software in machine language compiled format (customarily an ".  $\rightarrow$ exe", or ".dll", etc.). You may not distribute, bundle, wrap or subclass the SOFTWARE as Developed. →Software which, when used in a "designtime" development environment, exposes the programmatic\_ ⇒interface of the SOFTWARE. You may distribute, on a royalty-free basis, Redistributable Files with. →Developed Desktop Software only. 4. Your Web Server License. Subject to the terms and conditions in this EULA, you are granted the\_  $\rightarrow$  license to use and to distribute Developed Web Server Software, provided that you must purchase one Web →Server License for each Network Server operating the Developed Web Server Software (and/or\_  $\hookrightarrow$ Redistributable Files called or otherwise used directly by the Developed Web Server Software)... →Notwithstanding the foregoing, however, you may distribute or transfer, free of royalties, the, →Redistributable Files (and/or any Developed Desktop Software) to the extent that they are used separately\_ →on the client/workstation side of the network served by the Web Server. 5. License Serial Number. Upon purchase of the SOFTWARE a unique serial number (the "Serial Number →") is provided by Steema either electronically or via the delivery channel. The Serial number,  $\hookrightarrow$  provides a means to install and Register the SOFTWARE. The Serial Number is subject to the restrictions.  $\rightarrow$  set forth in this EULA and may not be disclosed or distributed either with your Developed Software or, ⇒in any other way. The disclosure or distribution of the Serial Number shall constitute a breach of this\_  $\rightarrow$ EULA, the effect of which shall be the automatic termination and revocation of all the rights granted. →herein. 6. Updates/Upgrades. Subject to the terms and conditions of this EULA, the Licenses are\_ →perpetual. Updates and upgrades to the SOFTWARE may be provided by Steema at their discretion at timely\_ →intervals though Steema does not commit to providing such updates or upgrades, and, if so provided by\_ →Steema, are provided upon the terms and conditions offered at that time by Steema. 7. Evaluation Copy.

If you are using an "evaluation copy" or similar version, specifically. →designated as such by Steema on its website or otherwise, then the Licenses are limited as follows: a) you are granted a license to use the SOFTWARE for a period of fifty,  $\hookrightarrow$  (50) days counted from the day of installation (the "Evaluation Period"); b) upon completion of the Evaluation Period, you shall either i) delete the SOFTWARE from the computer containing the installation, or. ⇔you may ii) contact Steema or one of its authorized dealers to purchase a\_ →license of the SOFTWARE, which is subject to the terms and limitations contained herein; and c) any Developed Software developed with an evaluation copy may not be\_ →distributed or used for any commercial purpose. III. INTELLECTUAL PROPERTY. 1. Copyright. You agree that all right, title, and interest in and to the SOFTWARE.  $\rightarrow$  (including, but not limited to, any images, photographs, code examples and text incorporated into the\_  $\hookrightarrow$  SOFTWARE), and any copies of the SOFTWARE, and any copyrights and other intellectual properties therein\_  $\hookrightarrow$  or related thereto are owned exclusively by Steema, except to the limited extent that Steema may be\_ →the rightful license holder of certain third-party technologies incorporated into the SOFTWARE. The  $\rightarrow$  SOFTWARE is protected by copyright laws and international treaty provisions. The SOFTWARE is\_ ⇔licensed to you, not sold to you. Steema reserves all rights not otherwise expressly and specifically\_  $\rightarrow$  granted to you in this EULA. 2. Backups. You may make one copy the SOFTWARE solely for backup or archival. →purposes. 3. General Limitations. You may not reverse engineer, decompile, or disassemble the SOFTWARE,...  $\rightarrow$  except and only to the extent that applicable law expressly permits such activity notwithstanding this.  $\rightarrow$  limitation. 4. Software Transfers. You may not rent or lease the SOFTWARE. You may transfer the SOFTWARE to\_  $\rightarrow$  another computer, provided that it is completely removed from the computer from which it\_ ⇔was transferred. You may permanently transfer all of your rights under the EULA, provided that →you retain no copies, that you transfer all the SOFTWARE (including all component parts, the media and\_ →printed materials, any dates, upgrades, this EULA and, if applicable, the Certificate of Authenticity), and that the recipient agrees to the terms and conditions of this EULA as provided herein. Steema should, -be notified in writing of license

```
transfers where the company of the recipient is different to that of the,
→original licensee. If the
SOFTWARE is an update or upgrade, any transfer must include all prior.
\rightarrow versions of the SOFTWARE.
5. Termination.
Without prejudice to any other rights it may have, Steema may terminate,
→this EULA and the Licenses if
you fail to comply with the terms and conditions contained herein. In,
⇔such an event, you must destroy
all copies of the SOFTWARE and all of its component parts.
IV. DISCLAIMER and WARRANTIES
1. Disclaimer
Steema's entire liability and your exclusive remedy under this EULA_
→shall be, at Steema's sole option,
either (a) return of the price paid for the SOFTWARE;
(b) repair the SOFTWARE through updates distributed online. Steema_
⇔cannot and does not guarantee
that any functions contained in the Software will meet your requirements,
or that its operations will be
error free. The entire risk as to the Software performance or quality,
\hookrightarrow or both, is solely with the user and
not Steema. You assume responsibility for the selection of the component,
→to achieve your intended
results, and for the installation, use, and results obtained from the,
→SOFTWARE.
2. Warranty.
Steema makes no warranty, to the maximum extent permitted by law, either_
→implied or expressed,
including with-out limitation any warranty with respect to this Software,
→documented here, its quality,
performance, or fitness for a particular purpose. In no event shall_
\hookrightarrowSteema be liable to you for damages,
whether direct or indirect, incidental, special, or consequential_
\rightarrowarising out the use of or any defect in the
Software, even if Steema has been advised of the possibility of such_
→damages, or for any claim by any
other party. All other warranties of any kind, either express or implied,
including but not limited to the
implied warranties of merchantability and fitness for a particular,
→purpose, are expressly excluded.
V. MISCELLANEOUS.
1. This is the Entire Agreement.
This EULA (including any addendum or amendment to this EULA included_
\hookrightarrowwith the SOFTWARE) is the
final, complete and exclusive statement of the entire agreement between_
→you and Steema relating to
the SOFTWARE. This EULA supersedes any prior and contemporaneous.
→proposals, purchase orders,
advertisements, and all other communications in relation to the subject.
\rightarrowmatter of this EULA, whether
```

```
oral or written. No terms or conditions, other than those contained in.
\rightarrowthis EULA, and no other
understanding or agreement which in any way modifies these terms and
⇔conditions, shall be binding
upon the parties unless entered into in writing executed between the.
→parties, or by other non-oral
manner of agreement whereby the parties objectively and definitively act,
\rightarrow in a manner to be bound
(such as by continuing with an installation of the SOFTWARE, "clicking-
→through" a questionnaire, etc.)
Employees, agents and other representatives of Steema are not permitted.
\rightarrowto orally modify this EULA.
2. You Indemnify Steema.
You agree to indemnify, hold harmless, and defend Steema and its_
\hookrightarrow suppliers and resellers from and
against any and all claims or lawsuits, including attorney's fees, that...
\rightarrowarise or result from this EULA.
3. Interpretation of this EULA.
If for any reason a court of competent jurisdiction finds any provision_
\hookrightarrow of this EULA, or any portion
thereof, to be unenforceable, that provision of this EULA will be
\hookrightarrowenforced to the maximum extent
permissible so as to effect the intent of the parties, and the remainder_
⇔of this EULA will continue in full
force and effect. Formatives of defined terms shall have the same,
→meaning of the defined term. Failure
by either party to enforce any provision of this EULA will not be deemed.
\hookrightarrowa waiver of future enforcement
of that or any other provision. Except as otherwise required or_
\rightarrow superseded by law, this EULA is governed
by the laws of Spain. If the SOFTWARE was acquired outside of Spain,
→then local law may apply.
Steema Software
www.steema.com
```

#### Packmol 18.168

```
MIT License

Copyright (c) 2009-2018 Leandro Mart^^c3^^adnez, Jos^^c3^^a9 Mario_

→Mart^^c3^adnez, Ernesto Birgin

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a_

→copy

of this software and associated documentation files (the "Software"), to_

→deal

in the Software without restriction, including without limitation the_

→rights

to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell

copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is

furnished to do so, subject to the following conditions:
```

```
The above copyright notice and this permission notice shall be included.

→in all

copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS.

→OR

IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY,

FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL.

→THE

AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER

LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING.

→FROM,

OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS.

→IN THE

SOFTWARE.
```

#### libssh2 1.8.0

```
The BSD 3-Clause License
Copyright (c) 2004-2007 Sara Golemon <sarag@libssh2.org>
Copyright (c) 2005,2006 Mikhail Gusarov <dottedmag@dottedmag.net>
Copyright (c) 2006-2007 The Written Word, Inc.
Copyright (c) 2007 Eli Fant <elifantu@mail.ru>
Copyright (c) 2009-2019 Daniel Stenberg
Copyright (C) 2008, 2009 Simon Josefsson
All rights reserved.
Redistribution and use in source and binary forms,
with or without modification, are permitted provided
that the following conditions are met:
Redistributions of source code must retain the above
copyright notice, this list of conditions and the
following disclaimer.
Redistributions in binary form must reproduce the above
copyright notice, this list of conditions and the following
disclaimer in the documentation and/or other materials
provided with the distribution.
Neither the name of the copyright holder nor the names
of any other contributors may be used to endorse or
promote products derived from this software without
specific prior written permission.
THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY THE COPYRIGHT HOLDERS AND
CONTRIBUTORS "AS IS" AND ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES,
INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES
OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE
ARE DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL THE COPYRIGHT OWNER OR
CONTRIBUTORS BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL,
SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING,
BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR
SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS
INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY,
```

```
WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING
NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE
USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY
OF SUCH DAMAGE.
```

#### openssl 1.0.2m

OpenSSL License and Original SSLeay License

OpenSSL License

Copyright (c) 1998-2018 The OpenSSL Project. All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms, with or without modification, are permitted provided that the following conditions are met:

- 1. Redistributions of source code must retain the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer.
- Redistributions in binary form must reproduce the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer in the documentation and/or other materials provided with the distribution.
- 3. All advertising materials mentioning features or use of this software must display the following acknowledgment: "This product includes software developed by the OpenSSL Project for use in the OpenSSL Toolkit. (http://www.openssl.org/)"
- 4. The names "OpenSSL Toolkit" and "OpenSSL Project" must not be used to endorse or promote products derived from this software without prior written permission. For written permission, please contact openssl-core@openssl.org.
- Products derived from this software may not be called "OpenSSL" nor may "OpenSSL" appear in their names without prior written permission of the OpenSSL Project.
- 6. Redistributions of any form whatsoever must retain the following acknowledgment: "This product includes software developed by the OpenSSL Project for use in the OpenSSL Toolkit (http://www.openssl.org/)"

THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY THE OPENSSL PROJECT ``AS IS'' AND ANY EXPRESSED OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE ARE DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL THE OPENSSL PROJECT OR ITS CONTRIBUTORS BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING NEGLIGENCE OR OTHERWISE)

```
(前のページからの続き)
ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED
OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.
_____
This product includes cryptographic software written by Eric Young
(eay@cryptsoft.com). This product includes software written by Tim
Hudson (tjh@cryptsoft.com).
Original SSLeay License
Copyright (C) 1995-1998 Eric Young (eay@cryptsoft.com)
All rights reserved.
This package is an SSL implementation written
by Eric Young (eay@cryptsoft.com).
The implementation was written so as to conform with Netscapes SSL.
This library is free for commercial and non-commercial use as long as
the following conditions are aheared to. The following conditions
apply to all code found in this distribution, be it the RC4, RSA,
lhash, DES, etc., code; not just the SSL code. The SSL documentation
included with this distribution is covered by the same copyright terms
except that the holder is Tim Hudson (tjh@cryptsoft.com).
Copyright remains Eric Young's, and as such any Copyright notices in
the code are not to be removed.
If this package is used in a product, Eric Young should be given
→attribution
as the author of the parts of the library used.
This can be in the form of a textual message at program startup or
in documentation (online or textual) provided with the package.
Redistribution and use in source and binary forms, with or without
modification, are permitted provided that the following conditions
are met:
1. Redistributions of source code must retain the copyright
  notice, this list of conditions and the following disclaimer.
2. Redistributions in binary form must reproduce the above copyright
  notice, this list of conditions and the following disclaimer in the
  documentation and/or other materials provided with the distribution.
3. All advertising materials mentioning features or use of this software
  must display the following acknowledgement:
  "This product includes cryptographic software written by
   Eric Young (eay@cryptsoft.com)"
  The word 'cryptographic' can be left out if the rouines from the
→library
  being used are not cryptographic related :-).
4. If you include any Windows specific code (or a derivative thereof)
⇔from
  the apps directory (application code) you must include an
→acknowledgement:
  "This product includes software written by Tim Hudson (tjh@cryptsoft.
⇔com)"
THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY ERIC YOUNG ``AS IS'' AND
```

ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR. →PURPOSE ARE DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL THE AUTHOR OR CONTRIBUTORS BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL, EXEMPLARY, OR. →CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT,... → STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE. The licence and distribution terms for any publically available version. ⊶or derivative of this code cannot be changed. i.e. this code cannot simply, →be copied and put under another distribution licence [including the GNU Public Licence.]

#### Delphi/Pascal Wrapper around the library "libssh2"

The BSD 4-clause License and Mozilla Public License 1.1 Copyright (c) 2004-2009, Sara Golemon <sarag@libssh2.org> Copyright (c) 2009 by Daniel Stenberg Copyright (c) 2010 Simon Josefsson <simon@josefsson.org>} All rights reserved. Redistribution and use in source and binary forms, with or without modification, are permitted provided that the following conditions are met: Redistributions of source code must retain the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer. Redistributions in binary form must reproduce the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer in the documentation and/or other materials provided with the distribution. Neither the name of the copyright holder nor the names of any other contributors may be used to endorse or promote products derived from this software without specific prior written permission. THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY THE COPYRIGHT HOLDERS AND CONTRIBUTORS "AS IS" AND ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE ARE DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL THE COPYRIGHT OWNER OR CONTRIBUTORS BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR

SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.
Copyright (c) 2010, Zeljko Marjanovic <savethem4ever@gmail.com> This code is licensed under MPL 1.1 For details, see http://www.mozilla.org/MPL/MPL-1.1.html

#### Putty

MIT License

PuTTY is copyright 1997-2019 Simon Tatham.

Portions copyright Robert de Bath, Joris van Rantwijk, Delian Delchev, Andreas Schultz, Jeroen Massar, Wez Furlong, Nicolas Barry, Justin.  $\rightarrow$  Bradford, Ben Harris, Malcolm Smith, Ahmad Khalifa, Markus Kuhn, Colin Watson, Christopher Staite, Lorenz Diener, Christian Brabandt, Jeff Smith, Pavel Kryukov, Maxim Kuznetsov, Svyatoslav Kuzmich, Nico Williams, Viktor Dukhovni, and CORE SDI S.A. Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software →"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the. Software is furnished to do so, subject to the following conditions: The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF\_ →MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER\_ →LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS\_ →IN THE SOFTWARE.

#### Balloon

IMPORTANT: THIS SOFTWARE END USER LICENSE AGREEMENT (EULA) IS A LEGAL AGREEMENT BETWEEN THE LICENSEE (HEREINAFTER "YOU", EITHER AN INDIVIDUAL OR ANY OTHER LEGAL ENTITY) AND THE COPYRIGHT OWNER(S) OF THE BALLOON SOFTWARE (HEREINAFTER "SOFTWARE"). READ IT CAREFULLY BEFORE DOWNLOADING AND USING THE SOFTWARE. IT PROVIDES A LICENSE TO USE THE SOFTWARE AND CONTAINS WARRANTY INFORMATION AND LIABILITY DISCLAIMERS. BY DOWNLOADING AND/OR USING THE PROGRAM, YOU AGREE TO BECOME BOUND BY THE TERMS OF THIS

AGREEMENT. IF YOU DO NOT AGREE TO BE BOUND BY THESE TERMS, THEN DO NOT DOWNLOAD OR USE THE SOFTWARE AND DELETE THE SOFTWARE FILES FROM YOUR COMPUTER SYSTEM. 1. Through any use of the Software You acknowledge your acceptance of the conditions of this license. 2. You acknowledge and agree that the Software is proprietary to the →Copyright owner(s), and is protected under Finnish copyright law and international copyright treaties. You further acknowledge and agree that all right, →title and interest in and to the Software, including all intellectual property rights, are and shall remain with the Copyright owner(s). 3. There is no fee for the use of the Software, which is provided to you "free of charge" as a public service. 4. As is common courtesy, you agree to acknowledge your use of the ⇔Software in any reports or publications that include any results obtained with the Software. 5. License Grants 1. The licensee is granted a non-exclusive license to use the →Software in accordance with the terms of this EULA. 2. You may redistribute unmodified copies of the Software to third\_ →parties. The receiver of the Software will have same rights and →responsibilities as if the Software would have been obtained directly from the original distribution site, i.e. the receiver is bound by the terms of this\_  $\rightarrow$  EULA. 6. License Restrictions 1. You may not alter, merge, modify, adapt or translate the Software, or decompile, reverse engineer, disassemble, or otherwise reduce the Software to a human-perceivable form. 2. You may not sell, rent, lease, or sublicense the Software. 3. You may not modify the Software or create derivative works based\_  $\rightarrow$ upon the Software. 7. License Termination In the event that you fail to comply with this EULA, the Copyright →owner(s) may terminate the license. Upon any termination of this EULA, you, ⇔shall immediately discontinue the use and destroy all copies of the  $\rightarrow$ Software. 8. Governing Law This EULA shall be governed by the laws of Sweden without reference, →to its conflict of law provisions. The court of Stockholm, Sweden, shall be the first instance forum for settlement of any disputes arising under this EULA. 9. WARRANTY DISCLAIMER THE COPYRIGHT OWNER(S) PROVIDE(S) NO TECHNICAL SUPPORT, WARRANTIES OR REMEDIES FOR THE SOFTWARE. THE PROGRAM IS PROVIDED "AS IS" AND MAY\_ ↔CONTAIN

ERRORS ("BUGS"), BE BASED ON ERRONEOUS ASSUMPTIONS, OR HAVE OTHER
→DEFECTS,
KNOWN AND UNKNOWN. CONSEQUENILY, THERE IS NO WARRANTY WHATSOEVER FOR
STRE
THE
DECORDAM FOR ANY DARTICULAR DURDOGE OF INFRIMENT, THUS YOU ACCEPT
ALL
RESPONSIBILITY WITH REGARD TO THE PERFORMANCE OF THE PROGRAM. THE
RESIDENT WITH RESIDE TO THE PERCORDANCE OF THE PROSPARY, THE
OBTAINED, AND THE USE AND INTERPRETATION OF SUCH RESULTS, AND ANY
↔FUTURE
CONSEQUENCES ARISING FROM YOUR USE OF THE PROGRAM OR RESULTS DERIVED
THEREOF.
10. LIMITATION OF LIABILITY
YOU AGREE NOT TO HOLD LIABLE FOR DAMAGES, IN ANY WAY, SHAPE OR FORM,
ANY COPYRIGHT HOLDER OR OTHER PARTY HAVING THE RIGHT TO REDISTRIBUTE
⇔0R
MODIFY THE PROGRAM. SUCH DAMAGES INCLUDE BUT ARE NOT LIMITED TO
→GENERAL,
SPECIAL, INCIDENTAL OR CONSEQUENTIAL DAMAGES ARISING OUT OF THE USE OR
INABILITY TO USE THE PROGRAM,
LOSS OF DATA, INACCURATE MODIFICATION OF DATA, OR ANY OTHER LOSSES
INCURRED BY YOU OR BY A THIRD PARTY AS A RESULT OF THE USE OF THE
→PROGRAM
OR INABILITY TO USE THE PROGRAM, OR INABILITY OF THE PROGRAM TO WORK
TOGETHER WITH OTHER PROGRAMS. YOU AGREE THAT THE COPYRIGHT HOLDERS AND
OTHER RESPONSIBLE PARTIES MAY HAVE KNOWLEDGE OF SUCH DEFECTS,
SINACCURACIES,
LACK OF OPERATIONAL COMPATIBILITY WITH OTHER PROGRAMS, OR THE
OF CUCH DAMACES AMONG OTHER DEFECTS AND THAT YOU WILL NOT HOLD THESE
DARTIES LIABLE FOR ANY DAMAGES RESULTING TO YOU OR TO A THIRD DARTY
ARISING FROM YOUR USE OF THE PROGRAM
BALLOON Copyright ^^c2^^a9 2006-2018 Mikko Vainio.
BALLOON Copyright ^^c2^^a9 2008-2014 J. Santeri Puranen.
BALLOON Copyright ^^c2^^a9 2010 Visipoint Ltd.
All rights reserved.

#### JSME

```
Copyright (c) 2017, Novartis Institutes for BioMedical Research Inc and_

→Bruno Bienfait

All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms, with or without

modification, are permitted provided that the following conditions are_

→met:

* Redistributions of source code must retain the above copyright

notice, this list of conditions and the following disclaimer.

* Redistributions in binary form must reproduce the above copyright

notice, this list of conditions and the following disclaimer in the

documentation and/or other materials provided with the_

→distribution.

* Neither the name of the Novartis Institutes for BioMedical_

→Research nor the
```

```
names of the authors may be used to endorse or promote products
     derived from this software without specific prior written.
\rightarrow permission.
THIS SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS" AND
ANY EXPRESS OR IMPLIED WARRANTIES, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE.
\rightarrow IMPLIED
WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE ARE
DISCLAIMED. IN NO EVENT SHALL COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY
DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL
→DAMAGES
(INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR,
→SERVICES;
LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED.
→AND
ON ANY THEORY OF LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR
→TORT
(INCLUDING NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF_
→ THIS
SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.
JSME uses code from the following libraries:
   - Apache Harmony - Apache License v2.0 http://www.apache.org/
\rightarrowlicenses/
                   - Apache License v2.0 http://www.apache.org/
   – gwt-mosaic
→licenses/
    - gwt-exporter - Apache License v2.0 http://www.apache.org/
→licenses/
                    - Apache License v2.0 http://www.apache.org/
   - gwt
→licenses/
                    - https://github.com/Actelion/openchemlib/blob/
   - OpenChemLib
→master/LICENSE
   - InChI 1.05
                   - http://www.inchi-trust.org/
   - emscripten
                    - https://kripken.github.io/emscripten-site/index.
⇔html
```

## Chapter 2

## インストール方法

## 2.1 対応 OS

Winmostar の対応 OS は以下の通りです。

- Windows 10
- Windows 8
- Windows 7

Windows Server の場合は、予め無償版またはトライアルをご入手頂き、動作検証した上でご使用下さい。

macOS、Linux の場合は、VirtualBox などの仮想マシンで Windows OS をインストールした上で Winmostar を 使用してください。これらの環境でネイティブ動作するバージョンは今後開発される予定です。

Winmostar をインストールする端末とは別のマシン(リモートサーバ)でジョブを実行する場合、セットアップ方法ではCentOS向けの手順が紹介されていますが、以下の機能を備えていれば基本的にはUbuntuなど、どのOSでも利用可能です。

- SSH、SCPを用いた通信が可能で、UNIX コマンドを実行できる
- Winmostar が対応するジョブスケジューラ が動作する
- Winmostar から使用する各種ソルバをインストールできる

## 2.2 最小・推奨スペック

Winmostar の最小スペックは以下の通りです。

- CPU・メモリ: Windows 7/8/10 のシステム要件に準ず
- HDD: 4 GB 以上の空き容量

一般的な事務作業、ネットサーフィンなどをする程度のパソコンでも動作します。

推奨スペックは、Winmostar本体が比較的低いスペックの PC でも動作するため、一緒に使用するソルバーの推 奨スペックに準じます。ソルバーの推奨スペックが不明な場合は、ひとまず浮動小数点演算機能(コア数 x 周 波数)が高い CPU のマシンを準備して下さい。HDD、メモリは後から比較的容易に増設できるため、まずは 標準的な容量で構いません。

## 2.3 インストール

下記の方法で想定通りにインストールできない場合は、よくある質問・トラブルシューティング を確認してく ださい。

- 1. ライセンスコードを取得していない場合は、機能一覧 をご確認の上、以下のリンク先にてライセンスを 登録し取得します。
  - 無償版
  - 学生版
  - プロフェッショナル版
  - プロフェッショナル版(トライアル)
- 2. 安定版最新バージョンの Winmostar インストーラ をダウンロードします。

注釈:

- 動作環境は最小・推奨スペック でご確認ください。
- USB メモリ・DVD・ユーザポータルでインストーラを入手済みの方は、この操作が不要です。
- 3. インストーラをダブルクリックして起動します。64bit 版 Windows の場合は、インストールする Winmostar の種類(64bit 版または 32bit 版)を選択します。

警告:

- Winmostar が起動している場合は、あらかじめ終了しておきます。
- 4. インストール先フォルダを指定し(デフォルトは C:\winmos10)、インストールを開始します。

#### 警告:

- インストール先フォルダおよびその上位階層の名前に日本語、全角文字などのマルチバイト文 字や特殊記号が含まれている場合は、一部のモジュールが不具合を起こす場合があります。
- ディスプレイ設定でテキストやその他の項目を拡大・縮小している場合は、一部表示が崩れる場合があります。詳細は こちら。
- C:\Program Files 以下へのインストールは不可です。

注釈:

- インストール完了後、スタートメニューとデスクトップにショートカットが作成されます。
- セキュリティ対策ソフトの警告が出た場合は、無視してインストールを継続してください(以下、 同様)。
- 既に過去のバージョンの Winmostar がインストールされている場合は、上書きインストールするか、 インストール先フォルダを変更して過去のバージョンと共存させることが可能です。
- バージョンアップの方は アップデート または アップグレード を確認してください。

5. 新規インストールの場合は、Winmostarを起動し、初回起動時に出現するダイアログでライセンスコード を設定します。

#### 注釈:

- 納品したライセンス入りインストーラを使用した場合は、この操作が不要です。
- 6. こちらの手順に従い Winmostar 用の Cygwin 環境を構築します。
- Winmostar をインストールした Windows PC (ローカルマシン)上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。リモートサーバでのみ計算を行う場合もインストールしてください。
  - Windows 版 GAMESS インストールマニュアル
  - Windows 版 NWChem インストールマニュアル
  - Windows 版 Gaussian インストールマニュアル
  - Windows 版 LAMMPS インストールマニュアル
  - Windows 版 NAMD インストールマニュアル
  - Windows 版 Quantum ESPRESSO インストールマニュアル
  - Windows 版 FDMNES インストールマニュアル

注釈:

- Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMX は前の手順でインストールする CygwinWM に含まれます。
- ・最大原子数を拡張した MOPAC6 を使う場合は 独自拡張版 MOPAC6 から入手してください (動作未 保障)。
- 8. 必要に応じて、使用しているセキュリティ対策ソフトの設定において、Winmostar、CygwinWM、ソルバのインストールフォルダを監視対象から除外します。
- エクスプローラ上で各ファイルの拡張子を表示する設定に変更します。(必須ではありません)設定方法 は Q. Windows のエクスプローラ上で拡張子を表示するにはどうしたらいいですか? で確認してください。
- リモートサーバへのジョブ投入と、リモートサーバ上でのジョブのスケジューリングを行いたい場合は、 サーバに対応しているジョブスケジューラがインストールされているか確認します。入っていない場合 は以下のリンク先の手順でTORQUEをインストールします。
  - Torque インストール方法(CentOS 7 向け)
  - Torque インストール方法 (CentOS 6 向け)

注釈:

- ジョブのスケジューリングが不要な場合は、リモートサーバ上にジョブスケジューラをインストールする必要がありません。
- 11. リモートサーバへのジョブ投入を行う場合は、投入先のサーバに使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。
  - ・ Linux 版 GAMESS インストールマニュアル
  - ・ Linux 版 NWChem インストールマニュアル
  - ・ Linux 版 Gromacs インストールマニュアル

- ・ Linux 版 LAMMPS インストールマニュアル
- Linux 版 Quantum ESPRESSO インストールマニュアル
- ・ Linux 版 OpenMX インストールマニュアル
- ・ Linux 版 DCDFTBMD インストールマニュアル
- 12. インストール手順は以上です。続けて、必要に応じて ビギナーズガイド や 各種チュートリアル を確認し て下さい。

### 2.4 アンインストール

Winmostar のインストール先フォルダとショートカットの削除することでアンインストールできます。

## 2.5 アップデート

アップデート(マイナーバージョン・リビジョンの更新)はインストールと同じ方法で実施できます。

例:V10.0.0→V10.1.0、V9.4.0→V9.4.5

- 古いバージョンを残してインストールする場合は、古いバージョンの UserPref フォルダ以下のファイル を、新しいバージョンの UserPref フォルダの以下にコピーすることで、設定を引き継ぐことができます。
- UserPref フォルダは Winmostar のインストールフォルダ以下にあります。

## 2.6 アップグレード

アップグレード(メジャーバージョンの更新)はインストールと同じ方法で実施できます。

例: V8.000→V9.0.0、V9.0.0→V10.0.0

- V3~V6からアップグレードする場合、古いバージョンのインストールフォルダ以下の設定ファイル atoms1.wmx、winmos\_server.ini、wm\_nmr.ref、wm\_irscale.refをV10のUserPrefフォルダ以下にコピーす ることで、設定を引き継ぐことができます。
- V7~V9からアップグレードする場合、古いバージョンのUserPrefフォルダ以下のwmset.ini、atoms1.wmx、winmos\_server.ini、wm\_nmr.ref、wm\_irscale.refをV10のUserPrefフォルダ以下にコピーすることで、設定を引き継ぐことができます。
- UserPref フォルダは Winmostar のインストールフォルダ以下にあります。
- 詳細は V10 移行ガイド、 V9 移行ガイド を参照してください。

## **Chapter 3**

## 画面の説明・操作方法

### 3.1 画面の説明

Winmostar を起動して出現するウィンドウ(メインウィンドウと呼ぶ)は下図の様な構成となっています。

メインウィンドウのタイトルには現在編集中のファイルの名前、使用中の Winmostar のライセンス とバージョンが表示されます。



ツールバー メインメニューの中でよく使われる機能をここでも選択することができます。ポイン タを重ねるとそれぞれのボタンの役割を確認できます。また、以下の機能のみ特殊な動作をし ます。

・上部のツールバーの 1 行目中央の ソルバを選択 プルダウンメニュー

(9)	+-#±3%Q(M(F)	QIVI	NIL/	щ
-	MOPAC		~	~
	3			

**Q Q CH3 C CH3 CH3**

• 上部のツールバーの 2 行目左端の 編集操作向けの元素を選択 プルダウンメニュー

Η	1	~	(
			1

winmost で選ばれた元素に応じて、その横の 原子を追加 、 元素を変更 ボタンの挙動が変化します。

- 分子表示エリア 現在編集中の分子構造が表示されます。デフォルトでは炭素原子(緑色)と水素原子(黄色)が結合した構造が表示されます。表示 → 表示項目 → 分子情報 メニューにチェックがついている場合は、上部と下部には詳細な情報が表示されます。赤丸は 原子選択マーカーを示します。 グループ選択 された状態では、原子が青丸で囲まれます。 表示 → ラベル/電荷メニューから各原子の横に表示される番号や電荷の値の種類を切り替えることができます。配色は ツール → 環境設定 → 表示 から変更することができます。
- キーワード表示エリア 各ソルバのキーワード設定ウィンドウで設定した内容が表示されます。デ フォルトでは MOPAC の設定が表示されます。
- 座標表示エリア 分子表示エリアに表示されている分子構造の、各原子の座標が表示されます。上部 のタブで表示および出力する際の形式を切り替えることができます。デフォルトでは Z-Matrix が選択されています。グループ選択されていない状態では、座標表示エリアで選ばれた行と マーカー(赤丸)が付いた原子は一致します。Ctrl+左クリックまたは Shift+左クリック により複数行を選択することでグループ選択(青丸)することができます。表示されている内 容の詳細はポインタを重ねることで確認することができます。
- 座標入力エリア マーカー(赤丸)が付いた原子の座標(Z-Matrix またはXYZ形式)と最適化フラ グを入力することができます。
- 第二キーワード表示エリア キーワード表示エリア と基本的には同じですが、ここに記入された内 容は、ソルバの入力ファイルの中で座標の後ろに出現します。GAMESS、Quantum ESPRESSO などの一部のソルバでのみ使われます。

### 3.2 マウス操作

メインウィンドウでは下表のようにマウスで操作することができます。分子・原子を選択する方法 の詳細は選択メニュー に記載しています。
修飾 キー	左クリック	左ドラッグ	右クリック	右ドラッグ / ホイール操作
なし	マーカーを移動	視点の回転	原子を置換	表示の拡大・縮小
Shift	分子単位でグルー プ選択 または解除	視線の平行移動	原子を削除	
Ctrl	複数原子をグルー プ選択 または解除	矩形でグループ選 択		

ただし、分子表示エリアの右端を左ドラッグすると、表示を拡大・縮小することができます。

# 3.3 ショートカットキー

メインウィンドウでは下表のショートカットキーを使うことができます。下表に記載されている以 外にも、メインメニューの各項目の横に記載されたショートカットキーも使用可能です。

表1:基礎的な操作

新規	Ctrl+N
開く	Ctrl+O
上書き保存	Ctrl+S
名前を付けて保存	Shift+Ctrl+S
元に戻す	Ctrl+Z
やり直し	Ctrl+Y
グループを切り取り	Ctrl+X
グループをコピー	Ctrl+C
グループを貼り付け	Ctrl+V
ヘルプ	F1

# 表 2: 分子構造の構築

フラグメントで置換	F6
原子を追加(座標を指定)	F4
原子を削除	Shift+F4
結合を付加/変更	F7
結合を削除	F8
原子を移動(並進移動)	F5
元素を変更	Shift+F5
水素を付加(すべての原子に付加)	Ctrl+H
グループを削除	Ctrl+D
環構築	F9

簡易構造最適化	Ctrl+G
グループを移動	Ctrl+M
グループを軸回転(選択2原子)	Ctrl+R
グループを軸回転(選択3原子)	Ctrl+A
グループを固定/固定解除	Ctrl+I
結合長を自動調整	Ctrl+J
グループを回転(マウス操作)	Ctrl+F
グループを簡易構造最適化	Ctrl+L

表 3: 分子構造の微調整

# 表 4: 表示関連の操作

表示の拡大	F3
表示の縮小	F2
表示をウィンドウに合わせる	Ctrl+4
表示方向を変更	Ctrl+1, 2, 3
キーワード&座標表示エリアの表示/非表示	F10
分子表示エリアを画像として保存	Ctrl+Alt+I
分子表示エリアを画像としてコピー	Ctrl+Alt+C

# **Chapter 4**

# 基本的な操作の流れ

ここでは、Winmostarを用いて量子化学計算、分子動力学計算、あるいは第一原理計算を流す基本的な流れを 紹介します。

初期構造を作成

初期構造の作成方法の手順で、計算したい系を作成します。

(2) 計算条件(キーワード)の設定

<u></u> 上部.		の1行目	中央の	ソルバを選	択 プル	ダウンメ	<b>-</b> -
3	MOPAC	~ •					
٩	ОСНЗ ЛС ЩРР(-2)	-C2H3 -C6	で使用し	ったいソルバる	を選び、	キーワート	ヾ設定
ボタン		Eクリックしま	す。				

いくつかのソルバでは、キーワードの欄にポインタを重ねると、そのキーワードの意味 が出現します。

- (3) 計算の実行
  - Winmostar をインストールした Windows PC 上で計算を実行する場合(\*\*ローカルジョブ\*\*)
    - キーワード設定ウィンドウが開いた状態で Run ボタンを押します。
    - キーワード設定ウィンドウを OK ボタンを押して閉じます。メインウィンドウの キーワード表示エリア にキーワードが反映されるので、キーワードを直接編集し たい場合は、この段階でキーワード表示エリアを編集するか、 テキストエディタ で開く から任意のテキストエディタを用いて入力ファイルを編集します。その後、



ツールバーの 実行 ボタン ----- をクリックします。

Run または 実行 をクリックした後、入力ファイルが保存されていない場合は入力ファ イルの名前を入力すると保存され、続けて Winmostar Job Manager にジョブが登録さ れます。

Winmostar Job Manager は登録されたジョブを順番に処理します。

Winmostar をインストールした PC にネットワークで接続された Linux マシン上で実行する場合(リモートジョブ)

キーワード設定ウィンドウをOKボタンを押して閉じます。



次に、ツールバーの リモートジョブ投入 ボタン をクリックしサーバへ の接続設定を行います。その後、Submit Remoet Job ウィンドウ上の Send & Submit ボ タンを押し、入力ファイルの保存、転送(Send)とリモートサーバでのジョブの登録(Submit)を一度に行います。

リモートサーバ上では登録されたジョブが順番に実行されます。

リモートサーバ上でジョブが終了したら *Get All Files* ボタンを押して、Winmostar を インストールした Windows PC 上に計算から出力されたファイルを転送します。

詳細は リモートジョブの実行手順 を参照してください。

(4) ログの確認



どのファイルを開くか聞かれるが、ログを確認したい計算の入力ファイルがメインウィ ンドウに表示されている場合は、デフォルトで選択されるファイルを開きます。

ログファイルがテキストエディタで表示されるので、ジョブが正常あるいは異常終了したか確認します。

(5) 各種物理量の表示、解析



ジョブが正常終了している場合は、ツールバーの 結果解析 ボタン 🔽 🦉 🧟 を押し て、表示したい物理量のメニューを選択します。

どのファイルを開くか聞かれるため、適宜選択します。複数ファイル選択する場合もあ ります。ログの確認時と同様に、メインウィンドウに表示されているファイルに紐づけ られたものがデフォルトで選択されます。

ファイルを指定すると、結果表示用のウィンドウが表示されます。

• 構造最適化の過程やトラジェクトリを可視化する場合はツールバーの アニメーショ

	œ	Ħ	2	
ン ボタン		h	3	を押します



の エネルギー変化 ボタン \_\_\_\_\_ を押します。

• 分子形状の解析については、別途 ツールメニュー 以下に機能が用意されています。

(6) ジョブの延長、継続

ジョブの延長や継続が必要な場合は、再度キーワード設定ウィンドウを開き、ジョブを 開始します。

- MD については、キーワード設定ウィンドウで Extending Simulation にチェックを入れます。
- Quantum ESPRESSO については、キーワード設定ウィンドウで Output Directory に Continue を指定します d。
- ・ その他、例えば半経験QM、QMの構造最適化計算の後に計算を流したい場合は、
  ヘノ(A) ノー



旦 ツールバーの アニメーション ボタン **アロンド** を押して、最終構造をメイン ウィンドウに表示したうえで、継続ジョブのキーワード設定を行います。

# Chapter 5

# 初期構造の作成方法

# 5.1 分子構造の作成

以下のいずれかの方法を選択する。

- 各種形式(PDB、mol、mol2、SDF、CIF、xyzなど)のファイルを開くまたはメインウィンドウへのドラッグアンドドロップで開く。
- SMILES 形式の文字列を ファイル  $\rightarrow$  インポート  $\rightarrow$  SMILES から読み込む。
- ・構造式を ツール → 構造式を入力 で直接描画する。
- •3次元の分子構造をメインウィンドウ上で構築する。

適宜 編集メニュー から必要な操作を選択する。

- 1. ある程度目的の分子に形状が近づくように、初期構造(炭素原子と水素原子が結 合したもの)に対し、フラグメントで置換を実行する。
- 2. 芳香環が隣接した構造は環構築を実行する。
- 3. 不要な部分構造を削除したい箇所では グループを削除 を実行する。
- 4. 水素原子を付加したい箇所では選択原子に付加(1原子)(2原子)(3原子) を実行する。
- 5. 原子の種類を変更したい箇所では元素を変更を実行する。
- 化学結合を作成したい場所では結合を付加/変更を実行する。結合の種類の変更 も同じ操作で行う。
- ある程度妥当な原子配置に調整するために 簡易構造最適化 を実行する。(原子数 が小さい場合に限る)
- 8. 明示的に部分構造を回転させたい場合は グループ編集 → 部分回転 を実行する。
- 9. 様々な配座を取りうる分子の場合は ツール → 配座探索 (Balloon) を実行し、エネ ルギーの低い構造を選択する。
- ポリマーの場合は、直接分子全体をモデリングしても良いが、ポリマーの作成の方法を使う 方が効率が良い。

# 5.2 点電荷の割り当て

MD 計算で必要な点電荷を Winmostar 上で設定する方法を紹介する。

デフォルトの AM1/BCC 電荷を用いる場合は明示的に電荷を設定する必要がない。また、水分子に は選択した水モデルの電荷の値が無条件で適用される。

AM1/BCC 以外の電荷を使用する場合は、 分子構造の作成 の方法で 1 分子を作成した後、以下の方 法で電荷を割り当てる。割り当てた電荷は 表示 → ラベル/電荷 を変更することで表示し確認するこ とができる。

一部の原子の電荷を平均化またはシフトしたい場合は グループの電荷を平均化 または グループの 電荷をシフト を使用する。

• AM1/BCC 電荷または Gasteiger 電荷を割り当てる。

 $MD \rightarrow$  手動で電荷を割り当て  $\rightarrow$  *Acpype* を使用 の手順で割り当てる。イオンの場合 は *Total charge [e]* に電荷を入力する。

- RESP 電荷を割り当てる。
  - *QM* → *GAMESS* → キーワード設定 → *Easy Setup* にて、計算手法、基底関数を「HF/6-31G\*」に設定し、*Method* に *ESP/RESP* を選択する。イオンの場合は *Charge* に電荷を入 力する。
  - Easy Setup ウィンドウを OK ボタンで閉じ、 GAMESS Setup ウィンドウで Run ボタンを押 し計算を実行する。
  - 3. GAMESS の計算が終了したら *QM* → *GAMESS* → 結果解析 → *RESP* 電荷 にて RESP 電荷 を取得する。
- MOPAC, GAMESS, Gaussian, NWChem, Quantum ESPRESSOの Population 解析結果の電荷を メインウィンドウに読み込む。
  - MOPAC の場合は 電荷 (arc) の手順で読み込む。
  - Quantum ESPRESSO の場合は 固体 → *Quantum ESPRESSO* → *Lowdin* 電荷 の手順で読み 込む。
  - それ以外の場合は、ログファイルをメインウィンドウで開く。
- 元素ごとに値を指定して割り当てる。
  - MD → 手動で電荷を割り当て → マニュアル入力 の手順で割り当てる。
- 選択した原子に値を入力して割り当てる。
  - 電荷を入力したい原子を分子表示エリアでグループ選択し、編集→属性を変更→電荷/スピンを変更から電荷を入力する。
- テキストファイル上で直接編集して割り当てる。
  - 一旦分子構造を ファイル → 名前を付けて保存 において mol2 形式で保存し、保存した mol2 ファイルを任意のテキストエディタで開き、 @<TRIPOS>ATOM から始まるセクショ ンの9列目の値を編集する。編集後、ファイル → 再度読み込み をクリックし、編集後の 構造を読み込む。
- ポリマーの場合は、直接分子全体の AM1/BCC 電荷、RESP 電荷などを計算すると時間が掛か るため、ポリマーの作成 の方法を使う。

# **5.3** 孤立系 (気体)の作成

- 1. 分子構造の作成の方法で1分子の構造を作成する。量子化学計算の場合は周期境界条件を使わないため 以降の操作は不要である。
- 2. MD 計算の場合は 点電荷の割り当て の方法で電荷を割り当てる。
- 3. 編集  $\rightarrow$  セルを作成/編集  $\rightarrow$  ':ref: 'edit\_createcell\_create にて OK ボタンを押す。

# 5.4 低分子液体の作成

- 1. 分子構造の作成の方法で1分子の構造を作成する。
- 2. MD 計算の場合は 点電荷の割り当て の方法で電荷を割り当てる。
- 3. ファイル → 名前を付けて保存 から mol2 形式で保存する。
- 4.1.から3.の手順を計算したい全ての分子種に対して行う。
- 5. MD → 溶媒を配置/セルを構築 を選択する。
- 系内にどの分子を何分子入れるか決める。メインウィンドウに表示された分子は Add Displayed Molecule, 水分子の場合は Add Water をクリックする。それ以外の場合は Add mol2 File をク リックし 1. から 4. の手順で保存した mol2 ファイルを選択する。
- 7. 系内に投入する個数を入力する。
- 8. 6.、7.の手順を計算したい全ての分子種に対して行う。
- 9. Solvate/Build MD Cell ウィンドウ下部の Simulation Cell にてシステムサイズを設定し、 Build ボタンを押す。

注釈:

- 密度が高いと系の作成に失敗することがあるので、低い密度(目的の物質あるいは目的の物質 に類似する物質の実験値が分かっている場合は、その値の 40 %程度)から始め、 編集  $\rightarrow$  セ ルを作成/編集  $\rightarrow$  ':ref: 'edit\_createcell\_transform で密度を調整するか、MD 計算を実行し圧力 一定計算で目的の密度、圧力まで徐々に圧縮してください。
- *CygwinWM* がインストールされていない、または 溶媒を配置/セルを構築 機能で配置するのが 困難な場合は、 グループ編集 → 部分複製 、 セルを作成 、 追加読み込み を組み合わせるこ とでも作成可能です。

# 5.5 ポリマーの作成

- 1. 分子構造の作成の方法で計算したいポリマーの繰り返し単位(ここではモノマーと呼ぶ)を作成する。例 えば、ポリエチレンの場合はエチレン分子ではなくエタン分子を作成する。
- 2. MD 計算の場合は、モノマーの状態で 点電荷の割り当て の方法で電荷を割り当てる。
- 3. 分子表示エリア にて、隣のモノマーと接続する原子を 2 か所左クリックし、  $MD \rightarrow$ ポリマー  $\rightarrow$ モノマー 登録 の方法でモノマーとして登録する。

 4. 作成したいポリマーの構造に応じて、MD → ポリマー → ホモポリマービルダ、ブロックポリマービル ダ、ランダムポリマービルダの操作を実行する。

#### ちなみに:

- 例えば -[AAABBB]-のような構造の場合は、一旦 ブロックポリマービルダ を使用して AAABBB を 作成し、wpo フォルダに作成されたwpo ファイル(実態は mol2 形式)を再度 モノマー登録 にて モノマーとして登録し ホモポリマービルダ を使用する。
- 5. MD → ポリマー → ポリマーセルビルダ の操作を実行し、シミュレーションセルを作成する。
- 6. ポリマー中に低分子成分が溶解している場合は、分子構造の作成と点電荷の割り当ての手順で溶解している低分子を作成しあらかじめ mol2 形式で保存しておく。そして、5.の手順の後で保存した低分子成分の mol2 ファイルを MD → 分子を挿入 にて選択し挿入する。5.の手順において密度を低めに設定しないと低分子成分の挿入に失敗することがある。

# 5.6 気液界面の作成

- 1. 低分子液体の作成の方法で液相を作成する。
- 2. 編集 → セルを変形 にて Transform only along the selected axis と Do not change にチェックを入れ、 Set incremental length または Set total length にチェックを入れ、値を入力した後 OK ボタンを押す。

#### 注釈:

液相の構造を MD 計算で緩和した後に Expand する場合は、MD 計算後の構造においてシミュレーションセルの外の座標を持つ原子が多く存在するため、Expand する前に 編集 → 周期境界に基づき原子を再配置を選択する。分子系の場合は セルの内側に分子単位で再配置、無機系では セルの内側に原子単位で再配置を選択する。

# 5.7 液液界面の作成

- 1. 低分子液体の作成の方法で片方の液相を作成する。この時、予め2つの相に含まれる全ての種類の分子 について mol2 ファイルを作成しておく。
- 2. ファイル → 名前を付けて保存 から mol2 形式で保存する。
- 3. MD → 溶媒を配置/セルを構築 を選択する。
- 4. もう片方の相にどの分子を何分子入れるか決める。水分子の場合は Add Water をクリックする。それ以外の場合は Add mol2 File をクリックし mol2 ファイルを選択する。
- 5. 系内に投入する個数を入力する。
- 6.4.、5.の手順を計算したい全ての分子種に対して行う。
- Simulatoin Cell タブで Set Lattice Constants にチェックを入れ、 Same as main window ボタンをクリックする。次に、 Box Type で「triclinic」を選択する。 Set Lattice Constants の右に、最初に作成した相のセルサイズが表示される。 Change only one direction をクリックし、 Select direction で Zを選択し、 Enter density で指定密度を入力すると、x,y 方向の格子定数は固定したまま z 方向の格子定数が自動で設定される。
- 8. Build ボタンを押す。
- 9. ファイル → 名前を付けて保存 から mol2 形式で保存する。

- 10. *MD* → 界面ビルダ をクリックする。
- 11. *Cell* タブの *Cell 1* の *Browse* ボタンをクリックし、2. で保存したファイルを選択する。同様に、 *Cell 2* に おいては、9. で保存したファイルを選択する。
- 12. Direction タブの Interval に液相間の距離を入力する。
- 13. Build ボタンをクリックし、保存するファイル名を入力してから保存 ボタンをクリックする。

# 5.8 タンパク質の作成(リガンドなし)

- 1. 計算したいタンパク質の pdb ファイルを Winmostar で開く。
- 選択 → 分子種によるグループ選択の手順でタンパク以外の成分(結合水、緩衝剤、リガンドなど)をグループ選択してから、 編集 → グループ編集 → グループを削除の手順で選択グループを削除する。
- 3. 編集 → 水素を付加 → *pdb2gmx* を使用 を実行する。実行前の状態で水素が付加されているように見える場合も、この処理を省略すると後ほど計算に失敗することがある。
- 4. MD → 溶媒を配置/セルを構築 をクリックする。 Add Displayed Molecule をクリックし、 Enter # of molecules で「1」と入力し OK ボタンをクリックする。 次に Add Water ボタンをクリック し、 Enter # of molecules で適当な分子数(5000~10000 程度)を入力し、 OK ボタンをクリッ クする。その後、 Build ボタンをクリックする。
- 5. 系を中性化するために *MD* → 水をイオンに置換 の手順でイオンを配置する。「WARNING: The charges defined on the main window will be discarded. Are you sure you want to continue?」と表示されたら はい をクリックする。

なお、この後 MD 計算を実行する場合は、上記手順を実行した後ファイルを保存すると、残基情報 などが適切に保存されないことがあるため、上記手順を実行後続けて MD 計算を実行することが望 ましい。

# 5.9 タンパク質の作成(リガンドあり)

- 1. 計算したいタンパク質-リガンド複合体の pdb ファイルを Winmostar で開く。
- 2. 選択 → 分子種によるグループ選択 の手順でリガンド以外の成分 (タンパク、結合水、緩衝剤 など)をグループ選択してから、編集 → グループを削除 の手順で選択グループを削除する。
- 3. 編集 → 水素を付加 → *OpenBabel* を使用 を実行する。
- 4. ファイル → 名前を付けて保存 にてリガンドの構造を mol2 形式で保存する。
- 5. 再び計算したいタンパク質-リガンド複合体の pdb ファイルを Winmostar で開く。
- 3. 選択 → 分子種によるグループ選択の手順でタンパク以外の成分(結合水、緩衝剤、リガンドなど)をグループ選択してから、 編集 → グループ編集 → グループを削除の手順で選択グループを削除する。
- 7. 編集 → 水素を付加 → *pdb2gmx* を使用 を実行する。実行前の状態で水素が付加されているように見える場合も、この処理を省略すると後ほど計算に失敗することがある。
- 溶媒を配置/セルを構築 をクリックする。 Add Displayed Molecule をクリックし、 Enter # of molecules で「1」と入力し OK ボタンをクリックする。 次に Add Water ボタンをクリックし、 Enter # of molecules で適当な分子数(5000~10000 程度)を入力し、 OK ボタンをクリックす る。そして、 Add mol2 File ボタンをクリックし、4. で保存した mol2 ファイルを開き、 Enter

# of molecules で「1」と入力し、 OK ボタンをクリックする。「この分子を乱数的に配置しま すか?」と聞かれたらいいえ をクリックする。その後、 Build ボタンをクリックする。

9. 系を中性化するために *MD* → 水をイオンに置換 の手順でイオンを配置する。「WARNING: The charges defined on the main window will be discarded. Are you sure you want to continue?」と表示されたら はい をクリックする。

なお、この後 MD 計算を実行する場合は、上記手順を実行した後ファイルを保存すると、残基情報 などが適切に保存されないことがあるため、上記手順を実行後続けて MD 計算を実行することが望 ましい。

# **5.10** 無機結晶の作成

CIF ファイルなどで計算したい結晶のデータを既に持っている場合は、Winmostar でそのファイル を開く。そのようなファイルがない場合は、以下の操作を行う。

- 1. 固体 → 結晶ビルダ をクリックする。
- 2. Crystal Builder ウィンドウ右上の以下の項目を選択する。
  - Lattice の Crystal System から計算したい結晶の分類を選択する。
  - Lattice の Space Group から計算したい結晶の空間群を選択する。 Space Group の選択肢は Crystal System によって変化する。
  - Lattice Constants に計算したい結晶の格子定数を入力する。
- 3. Crystal Builder ウィンドウ右下のリストに、非対称要素の原子を入力する。
  - Atom の欄をダブルクリックし元素の種類を入力する。
  - *X*, *Y*, *Z*の欄をダブルクリックし座標を記入する。
  - Add ボタンで原子を追加する。
  - Remove ボタンでリスト中で選択された原子を削除する。
- 4. OK ボタンをクリックして、結晶ビルダで指定した構造をメインウィンドウに反映する。
- 5. 結晶にひずみを与える場合は、 編集 → セルを作成/編集 → ':ref:'edit\_createcell\_transform 機 能を使用してください。

# 5.11 無機結晶の作成(点欠陥または元素置換あり)

- 1. 欠陥がない状態の結晶の CIF ファイルを開くか、 無機結晶の作成 の方法で結晶構造を作成する。
- 2. 固体  $\rightarrow$  スーパーセルを作成 をクリックする。a, b, c の値を大きくし、スーパーセルのサイズを指定する(まずは各方向2程度)。最後に *OK* ボタンをクリックする。
- メインウィンドウにおいて、点欠陥を作りたい箇所の原子または、元素を置換したい原子を左クリックし 赤いマーカーが付いた状態にする。
- 4. 点欠陥を作りたい場合は、 編集 → グループを削除 をクリックする。
- 5. 元素を置換したい場合は、 編集 → 編集操作向けの元素を選択 から変更後の元素を選択し、その後 編集 → 属性を変更 → 元素を変更 をクリックする。

# 5.12 無機スラブ(表面)の作成

- 1. バルクの状態の結晶の CIF ファイルを開くか、 無機結晶の作成 の方法で結晶構造を作成する。
- 2. 固体 → スラブを作成 をクリックする。
- 3. *Miller indices (h k l)* など *Generate Slab* ボタンより上の項目を入力してから *Generate Slab* ボタンをクリックする。
- 4. Generate Slab ボタン以下の項目を入力してから OK をクリックする。作成したいスラブ構造の表裏両方の原子配置が、Surface configurationsの選択肢の中にない場合は、少なくとも片方の面の原子配置が望みの構造となるようにし OK ボタンをクリックした後、メインウィンドウで グループを削除 機能を使って不要な原子層を削除する。原子層を予め厚めに作るときは、Generate Slab ボタン上の Minimum slab size の値を大きくする。

# 5.13 分子吸着表面の作成

- 1. 分子構造の作成の方法で吸着させる分子を作成する。
- 2. ファイル → 名前を付けて保存 から mol2 形式で保存する。
- 3. 無機スラブ(表面)の作成の方法で表面を作成する。
- 4. 必要に応じて、 固体  $\rightarrow$  スーパーセルを作成 をクリックする。 a, b の値を大きくし、スーパーセルのサ イズを指定する。最後に *OK* ボタンをクリックする。
- 5. ファイル → 追加読み込み をクリックし、先ほど保存した吸着分子の mol2 ファイルを選択する。その後、 編集 → グループ編集 → グループを回転(マウス操作),グループを回転(数値を指定),グループを回 転(配向を指定),グループを並進移動(マウス操作),グループを並進移動(数値を指定)などの機能 を用いて、吸着分子の配向、位置を変更する。

# 5.14 固固界面(粒界)の作成

- 1. 無機スラブ(表面)の作成の方法で片方の固体を作成する。
- 2. ファイル → 名前を付けて保存 から cif 形式で保存する。
- 3. 無機スラブ(表面)の作成の方法でもう片方の固体を作成する。
- 4. ファイル → 名前を付けて保存 から cif 形式で保存する。
- 5.  $MD \rightarrow$ 界面ビルダをクリックする。
- 6. *Cell* タブの *Cell* 1 の *Browse* ボタンをクリックし、3. で保存したファイルを選択する。同様に、 *Cell* 2 に おいては、5. で保存したファイルを選択する。
- 7. Direction タブの Interval に固体間の距離を入力する。また、 Interval の Specify interval on selected axis between outermost atoms にチェックを入れる。
- 8. Repeat タブに移動すると、3 つの Suggest ボタンのうち、上ふたつ(a-axis と b-axis)が押せる状態になっている。この Suggest ボタンをクリックし、 Ratio の値(Cell1 と Cell2 のセルサイズ比率)が1 に近く、かつシステムサイズが大きすぎない行を選択し、 Set ボタンをクリックする。
- 9. Build ボタンをクリックし、保存するファイル名を入力してから保存ボタンをクリックする。
- 10. Ctrl+左ドラッグなどにより、片方の固体をグループ選択する。詳細は選択メニューを参照する。

11. 編集 → グループ編集 → グループを並進移動(数値を指定)をクリックし、X,Y方向にグループを並進 移動させる。 表示 → 三面図を表示 を有効にすると位置の確認をしやすくなる。

# **Chapter 6**

# 各種メニュー・ウィンドウ

# 6.1 ファイル メニュー

# 6.1.1 新規

起動直後の状態に戻ります。

**ヒント:** Ctrl+N でも操作できます。

# 6.1.2 開く

ファイルから分子構造をメインウィンドウに読み込みます。各種ソフトのフォーマットに対応して います。

ヒント: Ctrl+O でも操作できます。

# 6.1.3 最近使ったファイル

最近開かれたファイルを開きます。

#### 履歴をクリア

最近開かれたファイルの履歴を空にします。

# 6.1.4 プロジェクトを開く

プロジェクトファイル (拡張子 wmpj)を開きます。

**ヒント:** Ctrl+Alt+O でも操作できます。

# 6.1.5 最近使ったプロジェクト

最近開かれたプロジェクトファイルを開きます。

#### 履歴をクリア

最近開かれたプロジェクトファイルの履歴を空にします。

## 6.1.6 再度読み込み

メインウィンドウのタイトルに表示されているファイルを再度読み込みます。

#### 6.1.7 追加読み込み

メインウィンドウに表示されている分子構造に、選択したファイルの分子構造を追加します。

## 6.1.8 上書き保存

メインウィンドウに表示されている分子構造を上書き保存します。 詳細は 名前を付けて保存 を参照してください。

ヒント: Ctrl+S でも操作できます。

# 6.1.9 名前を付けて保存

メインウィンドウに表示されている分子構造を別名で保存します。

ファイル名およびファイルを含むフォルダ名(上位階層全て)は半角英数のみで記入することを推 奨します。

- 全角英数、日本語などのマルチバイト文字、スペースが含まれる場合は、一部の処理で不具合がでることがあります。
- アンダースコアは使用可能です。

各種ソルバの入力ファイルを保存する場合は、 キーワード表示エリア と 座標表示エリア の内容を 基にファイルが作成されます。

キーワード表示エリアに、保存したいソルバのキーワードが表示されていない場合は、キーワード 設定ウィンドウが自動で開きます。また、MOPAC、GAMESS、Gaussian、NWChemの場合はファ イル → 座標出力形式を切り替え で選択されたフォーマットで座標が出力されます。

ヒント: Shift+Ctrl+S でも操作できます。

# **6.1.10** インポート

特定の形式の分子構造と、一部の計算結果ファイルを読み込みます。

#### **SMILES**

SMILES 形式の文字列から分子構造を生成し、メインウィンドウに読み込みます。 *Import SMILES* ウィンドウが開いたら、 *Enter SMILES* の欄に SMILES 形式の文字列を入力し、 *Import* を押してく ださい。内部的には Balloon または OpenBabel が使用されます。 \*\_smiles\_tmp という作業フォ ルダに中間ファイルが生成されます。

# **6.1.11** エクスポート

選択した形式でメインウィンドウに表示されている内容を出力します。

#### **SMILES**

メインウィンドウに表示されている分子構造を SMILES 形式の文字列で出力します。メインウィン ドウに複数分子表示されている場合は使用できません。Cygwin 上で OpenBabel を使用します。「水 素原子を補完してから SMILES を生成しますか?」のダイアログで「はい」の場合は OpenBabel を-b オプション付きで mol2 形式経由で実行し、「いいえ」の場合は xyz 形式経由で実行します。

警告:本機能を利用するためには CygwinWM のセットアップ が必要です。

#### 構造式

メインウィンドウに表示されている分子構造の構造式の画像をSVG形式で出力します。メインウィンドウに複数分子表示されている場合は使用できません。Cygwin上でOpenBabelを使用します。

警告:本機能を利用するためには CygwinWM のセットアップ が必要です。

#### 画像

メインウィンドウに表示されている内容を BMP または JPG 形式で出力します。

### VRML

メインウィンドウに表示されている分子構造を VRML 形式で出力します。

#### **CHARMM crd File**

メインウィンドウに表示されている分子構造を CHARMM の crd 形式で座標を出力します。

# **6.1.12** テキストエディタで開く

メインウィンドウのタイトルに表示されるファイルを、環境設定ウィンドウにて選択したテキスト エディタで開きます。 注釈:テキストエディタで編集後、再度読み込みを選択すると、変更をメインウィンドウに反映することができます。

# **6.1.13** エクスプローラで表示

メインウィンドウのタイトルに表示されているファイルの一階層上のディレクトリを開きます。

#### 6.1.14 座標出力形式を切り替え

座標表示エリア での表示形式と、MOPAC、GAMESS、Gaussian、NWChem 形式でファイルを保存 する際の座標形式を指定します。

ヒント:座標表示エリア上部のタブでも切り替えることができます。

# 6.1.15 終了

Winmostar を終了します。

# 6.2 編集メニュー

原子・分子構造のモデリング機能に関するメニューです。

編集の対象とする原子を選択する方法は 選択メニュー を参照してください。

自動で生成される結合は、原子間距離が(共有結合半径の和)×(係数)より小さい場合に生成されます。係 数はデフォルトで1.15となっていて、この値は ツール → 環境設定 で変更できます。

原子を追加、グループを軸回転(選択2原子)などのマウス操作を伴う機能は、Escキーまたは同機能のメニューのチェックを外すことでキャンセルできます。

# 6.2.1 元に戻す

各種編集操作を元に戻します。50回まで可能です。

# 6.2.2 やり直し

元に戻した操作をやり直します。50回まで可能です。

### **6.2.3** テキストを戻す

キーワード表示エリア で編集した内容を元に戻します。

## 6.2.4 編集操作向けの元素を選択

原子を追加や 元素を変更 で適用される元素を選択します。

### 6.2.5 原子を追加

#### 座標を指定

分子表示エリア にてクリックする位置に原子を追加します。追加される原子の種類は ツールバー

H 1 V (

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 - Winmost で選択します。

ヒント: F4 または ツールバー からも操作できます。

座標と結合関係を指定

Z-Matrix 形式における結合関係と座標を同時に指定して原子を追加します。 追加される原子の種類

H	1	$\sim$	(

は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 Winmost で選択します。まず原子を置く場所をクリックし、次に Z-Matrix 表記における 3 つの接続原子(Na, Nb, Nc)を順番にクリックします。

# 6.2.6 原子を削除

マーカー が付いた原子を削除します。

**ヒント:** Shift+F4 または ツールバー でも操作できます。

#### 6.2.7 原子を移動

#### 並進移動

マーカー が付いた原子を 分子表示エリア 上でドラッグして移動します。

ヒント: F5 でも操作できます。

並進移動 (水素付き)

マーカー が付いた原子とそこに結合する水素を 分子表示エリア 上でドラッグして移動します。

**ヒント:** Ctrl+F5 または Alt +ドラッグでも操作できます。

Z-Matrix を保持して並進移動

マーカー が付いた原子と Z-Matrix で結合関係にある原子を同時に 分子表示エリア 上でドラッグして移動します。官能基単位での移動などに向いています。

二面角を変更

マーカー が付いた原子を 分子表示エリア 上でドラッグして移動します。Z-Matrix の二面角のみが 変化します。

6.2.8 属性を変更

元素を変更

選択した原子の元素を 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



winmost で選択した元素に変更します。グループ選択されている場合はグループ選択された原子全てが対象となります。

ヒント: Shift+F5 または ツールバーの Chg ボタンでも操作できます。

注釈: *Lp 0* は Lone pair、 *Cb 104* は MOPAC で分子構造を切り出すときに使われる Capped bond、 ++ *105* から - *108* は MOPAC のスパークル、 *Tv 109* は MOPAC の並進ベクトル、 *Xx 110* から *Z 112* は各ソルバのダミー原子をそれぞれ意味します。

#### 最適化フラグを変更

選択した原子の最適化フラグを変更します。グループ選択されている場合はグループ選択された原 子全てが対象となります。 Solver で General が選択されている場合は、X,Y,Z それぞれに選択した フラグがそのまま設定されます。 Solver で具体的なソルバーが選択されている場合は、それぞれ該 当するフラグが設定されます。

警告: OpenMX の場合は、 座標表示エリア 上で 0 と表示されていたらファイル保存時に 1,逆 に 1 と表示されていたら 0 と出力されます。つまり、本機能の Variable および Fixed の表 記に従った動作となります。

#### 電荷/スピンを変更

選択した原子の電荷(User電荷)またはスピン密度の値を変更します。グループ選択されている場合はグループ選択された原子全てが対象となります。 Overwrite をチェックした場合は、選択した原子の全ての値が入力値に上書きされます。 Scale をチェックした場合は、選択した原子の全ての値が等倍されます。

注釈: User Charge または Spin Density をメインウィンドウ上で表示したい場合は、表示  $\rightarrow$  ラベ  $\mu$ /電荷 メニューの *User* 電荷 または スピン密度 を選択します。

#### 結合関係を変更

マーカーが付いた原子の Z-Matrix における 3 つの接続原子 (Na, Nb, Nc)を順番にクリックして再 設定します。

#### 占有率を変更

マーカーが付いた原子の置かれたサイトまたは、グループ選択された原子の置かれたサイトの占有率(Occupancy)を変更します。 Occupancy の合計値は1 である必要があります。

1 以外の占有率が設定されているサイトには、複数の原子が存在しているように Winmostar 上で扱われます。Occupancy が設定された CIF ファイルを読み込んだ際の挙動も同様です。

### 6.2.9 ダミー原子を追加

ダミー原子を効果的に配置することで、Z-Matrixを用いた構造最適化計算やIRC計算の効率を上げたり、Z-Matrix由来のエラーを回避できることがあります。

#### 選択2原子に沿って追加

マーカー(赤太丸、赤細丸)が付いた2原子を通る直線上にダミー原子を追加します。

### グループの重心に追加

グループ選択された構造の重心の位置にダミー原子を追加します。

## 6.2.10 結合を付加/変更

マーカー(赤太丸、赤細丸)が付いた2原子間に結合を生成します。すでに生成している場合は、 結合の種類が変更されます。結合の種類としては、一重、二重、三重、芳香環(1.5重)、赤色の5 つが定義されています。赤色の結合はプレゼンテーション等の用途で使用してください。

ヒント: F7 または ツールバー でも操作できます。

6.2.11 結合を削除

マーカー(赤太丸、赤細丸)が付いた2原子間の結合を削除します。

ヒント: F8 または 編集ボタンエリア の 結合削除 ボタンでも操作できます。

#### 6.2.12 水素を付加

欠落している水素原子を補います。結合距離が極端に本来の平衡長から外れたファイル(ChemDraw や PubChemの mol 形式など)を読み込んだ場合、水素の付加が正常にできないことがあるため、その場合は事前に 編集 → 原子/結合の自動調整 → 結合長を自動調整 をご使用ください。

#### すべての原子に付加

全ての原子に水素を自動的に付加します。グループ選択されている場合はその原子のみ水素を付加 します。

**ヒント:** Ctrl+H でも操作できます。

#### 選択原子に付加(自動)

マーカーが付いた原子に水素原子を付加します。グループ選択されている場合はその原子に水素を 付加します。

ヒント: ツールバーの+Hボタンでも操作できます。

#### 選択原子に付加(1原子)(2原子)(3原子)

マーカーが付いた原子に水素が1~3つ付加した状態にします。グループ選択されている場合はその原子に水素を付加します。

#### pdb2gmx を使用

Gromacs の gmx pdb2gmx コマンドを用いて、pdb または gro ファイルから読み込んだタンパク質 に対して水素を自動的に付加します。元となる pdb または gro ファイルにおいて、アミノ残基の情 報を持たない原子が存在している場合には、処理に失敗します。\*\_protonate\_tmp という作業 フォルダに中間ファイルが生成されます。

注釈:メインウィンドウに表示されている構造にリガンド、溶媒などのタンパク質以外の分子が含まれている場合、選択 → 分子種によるグループ選択 および 編集 → グループ編集 → グループを削除 機能を用いて事前に削除してください。

警告: 本機能を利用するためには CygwinWM のセットアップ が必要です。

#### **OpenBabel** を使用

OpenBabelを用いて水素を自動的に付加します。主に pdb ファイルから切り出したリガンド分子に 対して使用します。 \*\_protonate\_tmp という作業フォルダに中間ファイルが生成されます。

注釈:メインウィンドウに表示されている構造にリガンド、溶媒などのタンパク質以外の分子が含まれている場合、選択 → 分子種によるグループ選択 および 編集 → グループ編集 → グループを削除 機能を用いて事前に削除してください。

警告:本機能を利用するためには CygwinWM のセットアップ が必要です。

## 6.2.13 水素を削除

全ての水素原子を削除します。

# **6.2.14** フラグメントで置換

ヒント: F6、 Replace ボタン、または原子を右クリックでも操作できます。

# **6.2.15** フラグメントを選択

フラグメントで置換で置換されるフラグメントを選択します。

### 6.2.16 環構築

連結した4原子の両端2原子にマーカー(太赤丸、細赤丸)が付いた状態で同機能を選択すると、 その4原子を骨格に含む芳香環を生成します。

ヒント: F9 でも操作できます。

ヒント: 例えばベンゼン分子の H-C-C-H という部分の両端の H にマーカーを移動し、本機能を呼び出すと、ナフタレン分子が作成されます。

6.2.17 グループ編集

グループ選択(青丸)された原子に対して操作を行います。

グループを軸回転(選択2原子)

2つのマーカー(赤太丸、赤細丸)が付いた2原子間のベクトルを軸としてグループ選択された構造を回転させます。

ヒント: Ctrl+R でも操作できます。

グループを軸回転(選択3原子)

マーカーが付けられた3原子(分子表示エリア左上のMarked Order: で確認することができます) で定義される面の法線ベクトルを軸として、グループ選択された構造を回転させます。

**ヒント:** Ctrl+A でも操作できます。

グループを回転(マウス操作)

グループ選択された構造を、マーカー(赤太丸)が付いた原子を中心に回転させます。

ヒント: Ctrl+F でも操作できます。

グループを回転(数値を指定)

グループ選択された構造を、マーカー(赤太丸)が付いた原子または幾何中心を中心に、スライ ダー操作まはた数値入力により回転させます。指定するのはオイラー角です。

ヒント: Ctrl+F でも操作できます。

グループを回転(配向を指定)

グループ選択された構造を特定軸または特定面に対し配向するよう回転させます。マーカーが付け られた2原子(特定軸に配向させる場合)または3原子(特定面に配向させる場合)がグループ選 択された構造の中に含まれている必要があります(マーカーが付けられた原子は分子表示エリア 左 上の Marked Order: で確認することができます)。

グループを並進移動(マウス操作)

グループ選択された構造を 分子表示エリア 内でドラッグして移動させます。

**ヒント:** Ctrl+M でも操作できます。

グループを並進移動(数値を指定)

グループ選択された構造を、スライダー操作または数値入力により並進移動させます。

グループを簡易構造最適化

グループ選択された構造に対し、分子力場を用いた構造最適化を行います。

ヒント: Ctrl+L でも操作できます。

グループ内の隣接原子間に結合を生成

グループ選択された構造中の隣接原子間で結合を自動生成します。ボロノイ分割により隣接が判定 されます。

**ヒント:** Ctrl+L でも操作できます。

グループを切り取り

グループ選択された構造を、クリップボードに切り取ります。

**ヒント:** Ctrl+X でも操作できます。

グループをコピー

グループ選択された構造を、クリップボードにコピーします。

**ヒント:** Ctrl+C でも操作できます。

グループを貼り付け

グループ選択された構造を、クリップボードから貼り付けます。貼り付け後、ドラッグして位置を 決定します。

**ヒント:** Ctrl+V でも操作できます。

グループを複製

グループ選択された構造を、一定間隔で複製して配置します。サブウィンドウにて各方向の配置間 隔と複製数を指定します。

グループを削除

グループ選択された構造、あるいはそれ以外の構造を削除します。分子内の一部の構造を削除した 場合は、切断された箇所に水素原子を自動で補います。

ヒント: Ctrl+D でも操作できます。

## グループを固定/固定解除

グループ選択された構造の全成分の最適化フラグを0(fix)または1(free)に設定します。より 細かい制御をしたい場合は編集→属性を変更→最適化フラグを変更を選択してください。

ヒント: Ctrl+I でも操作できます。

グループの電荷をシフト

グループ選択された構造の持つ点電荷の合計値を、指定した値に一様にシフトします。MD計算実 行時など、系全体の電荷を0にしたいときに便利な機能です。

#### グループの電荷を平均化

グループ選択された構造の持つ点電荷の合計値を、それらの平均値に修正します。 GAMESS を使用 (RESP 電荷)や RESP 電荷の実行後、等価な原子(例えばメチル基の3つの水素原子)の電荷を平 均化したい時などに便利な機能です。

# 6.2.18 原子/結合の自動調整

簡易構造最適化

分子力場を用いた構造最適化を行います。

ヒント: Ctrl+G でも操作できます。

### 結合を再生成

原子間距離から結合の有無と種類を判定し、結合を割り当て直します。

#### 結合長を自動調整

結合長をある程度妥当な値に調整します。

ヒント: 必要に応じて本機能と 簡易構造最適化 を合わせてご使用ください。

#### Z-Matrix を再生成

Z-Matrix を自動的に再生成します。接続原子も自動で設定されます。

#### 芳香環を単結合+2 重結合に変換

芳香環結合を単結合と二重結合の組み合わせに変更します。

#### 不明な元素を水素に変更

Lp やダミー原子として認識された原子を水素に変更します。

ヒント: CIF ファイル中の重水素を水素に変更する際などに有用です。

## 6.2.19 選択原子間の距離/角度を変更

マーカー(赤丸)が付けられた2~4原子間の(分子表示エリア 左上の Marked Order: で確認する ことができます) 距離、角度または二面角を入力して変更します。

# 6.2.20 番号の取り直し/ソート

#### 選択2原子間で交換

マーカーが付いた2つの原子の番号を交換します。主にZ-Matrixの編集時に使われます。

### 水素とその他でソート

水素以外の原子、水素原子という順番となるように原子の番号を並べ替えます。

#### 分子種でソート

同じ種類の分子が連続するよう原子の順番を並べ替えます。

# 6.2.21 座標系の取り直し

#### カメラ座標系に取り直し

現在のカメラの視線の逆方向を Z 軸、カメラの上方向を Y 軸、カメラの右方向を X 軸として再定 義し、分子を回転させます。

#### 選択3原子で設定

マーカーが付けられた3原子を通る平面の法線方向をZ軸、マーカーが付けられた2原子を通るベクトルをX軸として取り直します。

#### 慣性主軸方向に回転

慣性主軸が X,Y,Z 軸と一致するように系全体を回転させます。長軸が X 軸となります。

#### 選択原子の位置を原点に設定

マーカーの付いた原子を原点に設定します。

#### セルの下限の端を原点に設定

セルの原点の座標が(0,0,0)となるように座標系を取り直します。

#### 座標軸を交換

座標軸同士を交換し、座標系を取り直します。

#### X/Y/Z 軸を反転

指定した軸を反転させ、座標系を取り直します。

## 6.2.22 キラリティ

#### x方向に座標を反転

メインウィンドウに表示されている分子構造を鏡像体に変換します。x 座標の符号が反転されます。

#### 鏡像体を生成

メインウィンドウに表示されている分子構造の鏡像体を、現在の構造に隣接して生成します。

# 6.2.23 セルを作成/編集

## セルを作成

シミュレーションセルを作成します。

- Set Distance にチェックを入れた場合は、メインウィンドウに表示されている分子構造の各方向の最小・最大値から指定した距離だけ離れた場所にセルの境界を作成します。Use Cubic Cell にチェックを入れた場合は、立方体のセルが作成されます。
- Set Dimension にチェックを入れた場合は、指定した大きさの立方体のセルが作成されます。

#### セルを変形

- 1. How to transform cell においてセルの変形方法を指定します。
  - 選択した軸方向にのみセルを変形する場合は Transform only along the selected axis にチェック を入れます。変形量(長さ)で指定する場合は Set incremental length、変形後のサイズで指定 する場合は Set total length、垂直ひずみで指定する場合は Set normal strain、変形後の密度で 指定する場合は Set density をそれぞれ選びます。
  - 相似的にセルを変形する場合は Transform similarly にチェックを入れます。変形後の密度を Target Density に入力します。
  - せん断ひずみを与える場合は Transform by shear strain にチェックを入れます。変形する方向と 与えるひずみを指定します。
  - セルの角度を変更する場合は Transform by angle にチェックを入れます。変形する角度の種類 と値を指定します。

2. Atomic positions において原子の動かし方を指定します。

- ・原子位置は固定でセルのみ変更する場合は Do not change にチェックを入れます。
- セルの変形に伴い原子位置も変更する場合は Move with keeping fractional coordinate にチェックを入れます。分子系では、*Keep intramolecular coordinates* にチェックを入れ、分子内座標は固定します。

## 手動でセルを編集

Create/Edit Cell ウィンドウが開き、そこで MD 計算や平面波 DFT 計算などのシミュレーションセルを作成または編集します。セルが存在しない場合は、 Create ボタンをクリックすると、メインウィンドウに表示されている分子構造の各方向の最小・最大値から Distance の距離だけ離れた場所にセルを作成します。Expand ボタンクリックすると、指定方向にセルサイズを拡張することができます。Create/Edit Cell ウィンドウの右側では直接セルサイズの値を編集することができます。Box Vecors, Lattice Constants, LAMMPS Tilt Factors をクリックし、セルサイズの表記方法を変えることができます。

注釈:

- ・環境設定 → 表示 → 表示選択 → 格子定数 にチェックを入れると 分子表示エリア に格子定数 を表示することも可能です。
- 本機能でセルサイズを変更しても、原子の座標は変化しないため、セルサイズに合わせて原子の座標も相似的に変化させたい場合は密度を変更を使用します。

- シミュレーションセルの外にある原子を編集前のシミュレーションセルの中に戻したい場合は 周期境界に基づき原子を再配置機能を使用します。
- 6.2.24 セルを削除

セルを削除します。

#### 6.2.25 周期境界に基づき原子を再配置

シミュレーションセルの外に出ている原子の座標を、周期境界を考慮してセル内に戻します。主に 分子系では セルの内側に分子単位で再配置、主に無機系では セルの内側に原子単位で再配置 を選 択します。

#### 注釈:

- 表示 → 周期境界条件の表現形式 → なし が選択されていると、座標の変化を確認しやすくな ります。
- 表示 → 周期境界条件の表現形式機能では、表示のみが変化し座標は変化しませんが、本機能では実際に座標が変化します。

#### 6.2.26 密度を変更

密度を指定して、シミュレーションセルと原子座標を相似的に拡大または縮小します。各原子の座 標は、分子の重心について拡大縮小され、分子内での相対位置は変化しません。

#### 6.2.27 電荷を編集

電荷の値を編集します。電荷の種類を指定して、ユーザ電荷へ設定します。指定した電荷を削除す ることもできます。全電荷が特定値になるように調整することができます。

# 6.3 選択メニュー

原子・分子を選択する機能に関するメニューです。

#### ヒント: 原子の選択方法

原子を選択する方法には、 赤丸のマーカーを用いる方法 と、 青丸のグループ選択を用いる方法 が あります。

赤丸のマーカーを用いる方法 は主に 1 原子に対する操作で使われます。分子表示エリアで 左クリック した原子にマーカーが移動します。下図のメタノール分子の例では、OH(ヒドロキシ)基の酸素(赤) → 水素(黄色)の順に 左クリック しており、最後にマーカーが付けられた原子に太赤丸、1 つ前にマーカーを付けられた原子に細赤丸が付いています。また、下図右赤枠内の、座標表示エリア で 左クリック することでもマーカーが移動します。マーカーが付けられた原子は過去 4 つ分記憶され、下図左上赤枠内のように表示されます(下図の場合は *Marked Order: 6 - 2 - 1 - 3*)。各原子の番号は 座標表示エリア または 表示 → ラベル/電荷 → 番号元素 を選択することで 分子表示エリア 内で確認できます。



青丸のグループ選択を用いる方法は、主に複数原子に対する操作で使われます。分子表示エリア でCtrl+左ドラッグ、Ctrl+左クリック、Shift+左クリックすることでグループ選択できま す。あるいは選択メニュー以下の機能を使うことでもグループ選択できます。下図のメタノール 分子の例では、CH3(メチル)基の周囲をCtrl+左ドラッグしており、CH3基の原子が青丸で囲 まれています。また、座標表示エリアでCtrl+左クリックすることでもグループ選択できます。 分子表示エリア内の数左上にはグループ選択されている原子の個数と組成が表示されます(下図の 例では Group Selection: 4 Atoms (CH3))。



グループ選択されていない状態で、 編集  $\rightarrow$  グループ編集 などの複数原子に対する操作を実行した 場合は、 マーカーで分断される部分構造をグループ選択 が自動で実行されます。具体的には、赤 太丸と赤細丸のマーカーが付けられた 2 原子で分断される部分構造がグループ選択されます。下図 のメタノール分子の例では、酸素(赤) 炭素(緑)と順に 左クリック してマーカーを移動させた 後、 編集  $\rightarrow$  グループ編集  $\rightarrow$  グループを軸回転(選択 2 原子)を選択すると、酸素-炭素の間で分 断される構造のうち、最後にマーカーが付けられた CH3 基の側が自動でグループ選択されます(画 面上では八イライトされる)。 Winmostar N= 6 CH4O M= 32.04 Marked Order: 1 - 2 - 6 - 2 Marked Atom: X= 0 Y= 0 Z= 0 C Length= 1.455 Angle= 101.703 Dihedral= 0 Lper= 0

6.3.1 すべてをグループ選択

全ての原子をグループ選択します。

# 6.3.2 グループ選択を解除

グループ選択を解除します。

6.3.3 グループ選択の範囲を反転

グループ選択されていない原子をグループ選択し、それまでグループ選択されていた原子のグルー プ選択は解除します。

# 6.3.4 分子種によるグループ選択

Select by ウィンドウの Use List タブが Molecular Species にチェックされた状態で開きます。Select by ウィンドウ内のリストの各行をクリックすると、対応する分子種がグループ選択されます。

注釈: タンパク質の pdb ファイルから計算する際に本機能を使用するとタンパク・リガンド・結合水・緩衝剤などを抜き出すことができます。

# 6.3.5 分子によるグループ選択

Select by ウィンドウの Use List タブが Molecules にチェックされた状態で開きます。Select by ウィンドウ内のリストの各行をクリックすると、対応する分子がグループ選択されます。

# 6.3.6 元素によるグループ選択

Select by ウィンドウの Use List タブが Elements にチェックされた状態で開きます。Select by ウィンドウ内のリストの各行をクリックすると、対応する元素がグループ選択されます。

# 6.3.7 選択記述言語によるグループ選択

Select by ウィンドウの Use Selection Language タブが開きます。テキストボックスに選択記述言語 で選択方法を記述した後に、 Apply ボタンをクリックすると、対応する原子がグループ選択されま す。選択記述言語では以下の構文がサポートされています。

element C H	全ての炭素と水素原子を選択します
index 1-3 6 8	1,2,3,6,8番目の原子を選択します。
compid 1	
	CompID が 1 の分子種を選択します。 CompID と分子種の対応は <i>Apply</i> ボタン下の リストで確認できます。
moleid 1-3	
	1, 2, 3 番目の分子を選択します。 どの分子が何個あるかは <i>Apply</i> ボタン下のリ ストで確認できます。
site 1	
	各分子の中の1番目の原子(サイト)を選択 します。 各分子に含まれる原子の個数は Apply ボタン 下のリストで確認できます。
charge 0.5	
	電荷が0.5の原子を選択します。 ±0.1%の許容誤差が設けられています。
resname GLY	残基名が GLY の残基に含まれる原子を選択します。
name CA	原子名が CA の原子を選択します。
x< 10	x 座標が 10 Angstrom 未満の座標を選択します。 (x と<の間にスペースなし) 同様に y,z について も使用可能です。 x>, x=>, x<= も使用可能で す。

表1:基礎的な構文

残基名、原子名は PDB または gro 形式のファイルを開いた際に使用可能です。

(compid 1) and (site 1)	CompID が1の分子種で、かつ分子内の1番目のサイトを選択します。
(current) and (element H)	現在グループ選択されている原子の中で水素原子だけ を選択します。
(resname GLY) and (not	残基名が GLY で、かつ水素以外の原子を選択します。
(element H))	

表 2: 論理演算子を用いた複合的な構文

and、 not 以外に or と xor を使用可能です。これらの論理演算子を使用する際には上記の例の ように丸括弧 ()を使用してください。

また、整数を入力するところに %2==0 と入力すると 2 で割った余りが 0 になる数列が代入されま す。例えば site %3==1 と入力するとサイトが 1,4,7,10...の原子が選択されます。

# 6.3.8 マーカーで分断される部分構造をグループ選択

1番目と2番目のマーカーが付いた2個の原子の間で分断される部分構造をグループ選択されます。 詳細は選択メニューに画像付きで記載しています。

# 6.3.9 現在のグループに隣接する原子をグループ選択

現在の選択グループに隣接する原子をグループ選択します。ここでは、全原子にボロノイ分割を適用した際に、同一のボロノイ境界を有する原子を、隣接する原子を定義しています。

# 6.3.10 現在のグループに隣接する分子をグループ選択

現在の選択グループに隣接する分子をグループ選択します。ここでは、全原子にボロノイ分割を適用した際に、同一のボロノイ境界を有する原子を、隣接する原子を定義しています。

# 6.3.11 グループを登録

グループ選択されたグループに名前を付けて登録し、 登録グループを選択 から呼び出せるように します。

## 6.3.12 登録グループを選択

グループを登録で登録されたグループを呼び出します。LAMMPS 実行時には、ここにリストアップされたグループが ndx ファイル内に出力されます。Winmostar を再起動した後も登録グループを引き継ぎたい場合は、 登録グループを ndx ファイルに書き出し を用いて ndx ファイルに書き出した後、 ndx ファイルからグループを読み込み を用いて読み込みます。

# 6.3.13 ndx ファイルからグループを読み込み

ndx ファイルに出力されたグループを読み込み、登録グループを選択から呼び出せるようにします。

6.3.14 登録グループをndx ファイルに書き出し

登録グループを選択に登録されたグループをndxファイルに出力します。

**6.3.15** グループをndx ファイルに追加

グループ選択されたグループを、指定した ndx ファイルに追加します。

# 6.3.16 グループを結合して転置

含まれる原子の数が等しい複数のグループを結合し、順序を転置します。例えば、グループAに123、グループBに456が登録されていて本機能をグループAとグループBに適用した場合、14、25、36という3つのグループが作成されます。

# 6.4 表示メニュー

## 6.4.1 キーワード&座標表示エリアを表示

メインウィンドウでキーワード表示エリアと座標表示エリアの表示・非表示を切り替えます。

## 6.4.2 三面図を表示

分子表示エリアを三面図表示にします。

## 6.4.3 表示をリセット

カメラをデフォルト位置に戻します。

## **6.4.4** 表示方向を変更

カメラの視線の方向を変更します。

#### 6.4.5 拡大/縮小

視野を拡大または縮小します。

## 6.4.6 常に中心を注視

ここにチェックが入っている場合は、表示されている分子構造が変化しても、常にその時点での重 心がカメラの注視点となります。入っていない場合は、明示的に視線を変更しない限り注視点が変 化しません。

## **6.4.7** 選択原子を注視

マーカー(太赤丸)で付いた原子を注視点に指定します。

# 6.4.8 平行移動

メインウィンドウで左ドラッグすると、視線が平行移動します。

## 6.4.9 回転

#### 自由回転

メインウィンドウで左ドラッグすると、注視点を中心にカメラが回転します。

#### X, Y, Z 軸周りで回転

メインウィンドウで左ドラッグすると、各軸の周りでカメラが回転します。

#### 表示を回転

メインウィンドウで左ドラッグすると、表示が回転します。

#### 表示を回転(数値を指定)

表示の回転角度を入力します。

# 6.4.10 表示プリセット

表示の設定を一括で保存・読み込みします。

#### 6.4.11 遠近法を使用

ここにチェックが入っている場合は、分子表示エリアに遠近法が適用されます。

## 6.4.12 奥行き表現を使用

ここにチェックが入っている場合は、分子表示エリアにフォグが適用されます。手前と奥の原子の 区別がつきやすくなります。フォグの強さは ツール → 環境設定 メニュー にて設定できます。

# 6.4.13 光沢表現を使用

ここにチェックが入っている場合は、分子表示エリアで原子に光沢が掛かります。

# 6.4.14 表示項目

分子表示エリアに表示する項目にチェックを入れます。

# 6.4.15 ラベル/電荷

分子表示エリアにおいて、各原子の脇にラベル(注釈)と、電荷の大きさを示す球を表示します。

(ラベル/電荷を隠す)	ラベルと電荷の表示を隠します。(初期状態)
番号&元素	原子の通し番号と元素名を表示します。
番号	原子の通し番号を表示します。
元素	元素名を表示します。
Mulliken 電荷	各種ログファイルを開いた際に読み込まれる
	Mulliken 電荷を表示します。
ESP 電荷	各種ログファイルを開いた際に読み込まれる
	ESP または RESP 電荷を表示します。
Lowdin 電荷	各種ログファイルを開いた際に読み込まれる
	Lowdin 電荷を表示します。
NBO 電荷	各種ログファイルを開いた際に読み込まれる
	NBO(Natural Bond Orbital) 電荷を表示します。
User 電荷	
	編集 → 屋性を変更 → 雷荷/スピンを変更 や
	MD、雪苔を割り当てたどの機能でコーザが
	MD→電何を割り当てなどの機能でユーダが 割り当てた雪荷を表示します
	的り当てた電荷を収入します。
スピン密度	
	各種ログファイルを開いた際に読み込まれる
	スピン密度や
	編集 → 属性を変更 → 電荷/スピンを変更 で割
	り当てたスピン密度を表示します。
差電子密度	差電子密度を表示します。

# 6.4.16 双極子/遷移モーメント

双極子/遷移モーメントを表示

各種ログファイルを開いた際に読み込まれる双極子モーメントまたは遷移モーメントを表示します。

遷移モーメントを選択

表示する遷移モーメントを選択します。

スケールを変更

双極子/遷移モーメントを表示する際の大きさを指定します。

**6.4.17** 分子の表現形式

分子の表現方法(モデル)を選択します。
## 6.4.18 周期境界条件の表現形式

セルが作成されている状態で、原子座標がセルの上端・下端よりも小さい値の場合の表示方法を示します。本機能で座標の値そのものは変化しません。 編集 → 周期境界に基づき原子を再配置 を使うと本機能で表示されている原子の位置に座標の値を設定することができます。

# 6.4.19 Winmostar Viewer

分子表示エリアで表示している構造をWinmostar Viewer を用いて表示します。

# 6.4.20 外部ビューア

分子表示エリアで表示している構造を各種の外部プログラムで表示します。

### Jmol

Jmol を起動します。

### VRML

VRML 形式のファイルを出力し、VRML ビューアを起動します。

## Mercury

Mercury を起動します。読込み中のファイルが CIF の場合はそのファイルを使用します。

### ChemscapeChime

MDL Chime を起動します。

## レイトレーシング (POV-Ray)

POV-Ray 形式のファイルを出力し、POV-Ray を用いてレンダリングします。

## **OpenSCAD**

OpenSCAD 形式のファイルを出力し、OpenSCAD を起動します。3D プリンタ用のデータを作成で きます。

# 6.4.21 画像をコピー

分子表示エリアの画像をクリップボードにコピーします。

# 6.5 半経験 *QM* → *MOPAC* メニュー

MOPAC に関するメニューです。

MOPAC6 と MOPAC7 は Winmostar に同梱されています。それ以外の MOPAC を利用する場合は、 別途代理店より MOPAC 本体を購入し、環境設定ウィンドウにてパスを設定してください。

# 6.5.1 キーワード設定

MOPAC の計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は *Run* ボタン、一旦メイン ウィンドウに戻る場合は *OK* ボタンを押してください。

*Run* をクリックしたときの挙動は (1) *MOP6W70* 実行, (2) *MOP7W70* 実行, (3) *MOPACX* 実行 を参照 してください。

*Reset* ボタンでデフォルトの状態に戻ります。*Save as Default* ボタンで現在の状態をデフォルトの状態として保存します。*Save as Default*  $\rightarrow$  *Clear Default Settings* で保存されてデフォルトの状態を出荷時の状態に戻します。

Easy Setup 簡易設定画面を表示します。

Hamiltonian 使用するハミルトニアンを指定します。MOPACの各パージョンがサポートするハミルトニアンは以下の通りです。

ハミルトニアン	実装されている MOPAC のバージョン
AM1	MOPAC 6, MOPAC 7, MOPAC 93, MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC
	2002, MOPAC 2006, MOPAC 2009, MOPAC 2012
PM3	MOPAC 6, MOPAC 7, MOPAC 93, MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC
	2002, MOPAC 2006, MOPAC 2009, MOPAC 2012
RM1	MOPAC 2007
AM1 EXTER-	MOPAC 7.1, MOPAC 93, MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC 2002,
NAL=RM1.rm1	MOPAC 2006, MOPAC 2009, MOPAC 2012
PM5	MOPAC 2002, MOPAC 2006
PM6	MOPAC 2007, MOPAC 2009, MOPAC 2012
PM7	MOPAC 2012
MINDO/3	MOPAC 6, MOPAC 7, MOPAC 93, MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC
	2002, MOPAC 2006
MNDO	MOPAC 6, MOPAC 7, MOPAC 93, MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC
	2002, MOPAC 2006, MOPAC 2009, MOPAC 2012
MNDO-d	MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC 2002, MOPAC 2006, MOPAC 2009,
	MOPAC 2012

## Method 計算方法を指定します。

EF EF (Eigen Vector Following) 法による構造最適化計算を行います。

TS 遷移状態を求めます。

FORCE 振動解析を行います。

1SCF 1回だけ SCF 計算を行います。(構造最適化を行いません。)

IRC 固有反応座標計算を行います。エネルギーは保存されません。

IRC=1 1番目の基準振動の逆方向を指定して固有反応座標計算を行います。

IRC=-1 1番目の基準振動の正方向を指定して固有反応座標計算を行います。

Charge 電荷の値を指定します。

Multiplicity 多重度を指定します。

OPEN 開殻計算における電子数と軌道数を指定します。

MM

MMOK CONH 結合に分子力学補正を加えます。

NOMM CONH 結合に分子力学補正を加えません。

GNORM エネルギー勾配ノルムの閾値を指定します。

LARGE 指定したサイクルごとに情報を出力します。

GRAPH 分子軌道をグラフィックス表示するためのファイルを作成します。(GPAGH/GRAPHF)

EXTERNAL ディスク上のパラメータ・ファイルを読み込みます。

STEP 反応座標計算におけるきざみ幅を指定します。

POINT 反応座標計算における計算点数を指定します。

STEP1/2 グリッド計算におけるきざみ幅を指定します。

POINT1/2 グリッド計算における計算点数を指定します。

AUX 他のプログラムで利用するための AUX ファイルを作成します。

BONDS 最終の結合次数行列を出力します。

ENPART エネルギーを1中心および2中心項に分解するエネルギー分割を指定します。

ESP 静電ポテンシャルを計算します。

EXCITED 一重項第一励起状態を最適化します。

GEO-OK 原子が異常に近接している場合のチェックを無視します。

NOINTER 原子間距離を出力しません。

OLDFPC 古いバージョンの MOPAC と同じ基準物理量の値を用います。

POLAR 分極率を計算します。

PRECISE 収束判定条件を 100 倍厳しくします。

SYMMETRY 対称性や等価条件を利用して構造を定義します。

UHF 非制限 Hartree-Fock 計算を実行します。

VECTORS 最終固有ベクトル(波動関数)を出力します。

XYZ XYZ 座標系を用いて計算を行います。

Others その他のキーワードを記入します。

# **6.5.2** キーワード読み込み

既存の MOPAC の入力ファイルから、キーワード(計算条件)のみを読み込みます。

# 6.5.3 (1) MOP6W70 実行, (2) MOP7W70 実行, (3) MOPACX 実行

メインウィンドウで MOPAC の入力ファイルが開かれている場合は、そのファイルを使って MOPAC を実行します。開かれていない場合は、MOPAC の入力ファイルを保存した上で MOPAC を実行します。

入力ファイルを保存する際に、 座標出力形式を切り替えの選択肢(Z-Matrix または XYZ)および 座標表示エリアの Z-Matrix / XYZ タブの選択に応じて座標の出力フォーマットが変化します。

(1) MOP6W70 実行, (2) MOP7W70 実行, (3) MOPACX 実行 の違いは、起動する MOPAC のプログ ラムパスです。プログラムパスは、 ツール → 環境設定 → プログラムパス で変更することができ ます。デフォルトで設定されている MOP6W70 は MOPAC6、 MOP7W70 は MOPAC7 で、どちらも Winmostar に内蔵されているものです。(3) MOPACX 実行 には MOPAC2012 などのプログラムを指 定して使うことを想定しています。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが water.dat の時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	前明
outファイル water.out	計算結果の概略をまとめたファイルです。
arcファイル water.arc	計算結果の詳細をまとめたファイルです。
<b>mgfファイル</b> water.mgf	キーワード GRAPH を指定したことで出 力されるファイルで、 分子軌道の描画に使われる情報を含み ます。
作業ディレクトリ water_mop_tmp\	作業ディレクトリです。

## 6.5.4 ログを表示 (out)

out ファイルをテキストエディタで開きます。

# 6.5.5 ログを表示 (arc)

arc ファイルをテキストエディタで開きます。

# 6.5.6 アニメーション

構造最適化 (arc)

arc ファイルを選択し、分子構造のアニメーションを表示します。 アニメーション表示の操作方法は Animation ウィンドウ を参照してください。

### **IRC, STEP (out)**

out ファイルを選択し、IRC 計算のアニメーションを表示します。

アニメーション表示の操作方法はAnimation ウィンドウを参照してください。

## 6.5.7 結果解析

分子軌道, 電子密度 (mgf)

mgf ファイルを選択し、分子軌道を表示します。

キーワード で GRAPHF が設定されている必要があります。サブウィンドウの操作方法は Energy Level Diagram ウィンドウ, MO Plot ウィンドウ を参照してください。

### 電荷 (arc)

arc ファイルを選択し、電荷、ダイポールを表示します。

表示  $\rightarrow$  ラベル/電荷  $\rightarrow$  Mulliken 電荷 を選択すると電荷が表示されます。

### IR スペクトル (out)

out ファイルを選択し、IR スペクトルを表示します。

キーワード で振動計算が設定されている必要があります。サブウィンドウの操作方法は IR Spectrum ウィンドウ を参照してください。

## 6.5.8 ジョブマネージャで実行

チェックが入っている場合は、MOPACを実行する際に Winmostar Job Manager を使用します。入っていない場合は、MOPAC での計算が終わるまで Winmostar は待ち状態となり、MOPAC の出力結果は自動でメインウィンドウに読み込まれます。

ツール → 環境設定 メニュー からも設定することができます。

# 6.6 半経験 *QM → CNDO/S* メニュー

CNDO/S プログラムに関するメニューです。

CNDO/S プログラムは Winmostar に同梱されています。CNDO/S プログラムは旧日本化学プログラム 交換機構(JCPE、現在の日本コンピュータ化学会)に登録されていた P083 プログラムを、Winmostar に対応させるために微修正したものです。P083 のマニュアルは こちら から入手可能です。CNDO/S プログラム(cndosw.exe)は gfortran でコンパイルされています。

# **6.6.1** キーワード設定

CNDO/Sの計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は*Run*ボタン、一旦メインウィンドウに戻る場合はOKボタンを押してください。

Run をクリックしたときの挙動は実行を参照してください。

Method 計算方法を指定します。(CNDO または INDO)

Multiplicity 多重度を指定します。

Basis set 基底関数を指定します。(SP または SPD)

BONDS 結合次数を出力することを指定します

NOINTER チェックを入れた場合は原子間距離を出力しません。

SHORT 簡略化されたログを出力します。

OUTMO MOLMOL2 用のファィルを出力します。

**Repulsion integral** 

反発積分の式を指定します。

- Pariser
- 大野
- 西本-又賀
- 理論式

Nuclear repulsion energy

核間反発エネルギーの式を指定します。

- Za \* Zb / 1
- Za \* Zb \*  $\gamma$ ab

**PKAPPA** p 電子に対する kappa の値を指定します。

DKAPPA d電子に対する kappa の値を指定します。

Charge 電荷を指定します。

# of CI 励起状態の CI 計算に含める状態の数を指定します。(上限 500)

# of excited states 結合次数を出力する励起状態の数を指定します。

# **6.6.2** キーワード読み込み

既存の CNDO/S の入力ファイルから、キーワード(計算条件)のみを読み込みます。

## 6.6.3 実行

メインウィンドウで CNDO/S の入力ファイルが開かれている場合は、そのファイルを使って CNDO/S を実行します。開かれていない場合は、CNDO/S の入力ファイルを保存した上で CNDO/S を実行します。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが water.cnd の時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	前明
	計算のログファイルです。
lst ファイル	
water.lst	
作業ディレクトリ	作業ディレクトリです
water cnd tmp	

# 6.6.4 ログを表示 (lst)

lst ファイルをテキストエディタで開きます。

# 6.6.5 結果解析

UV-Vis スペクトル

lst ファイルを選択し、UV-Vis スペクトルと分子軌道を表示します。

サブウィンドウの操作方法は UV-Vis Spectrum ウィンドウ, Energy Level Diagram ウィンドウ, MO Plot ウィンドウ を参照してください。

# **6.7** $QM \rightarrow GAMESS \nearrow \exists \exists \neg \neg$

GAMESS に関するメニューです。

GAMESS を利用するためには別途 GAMESS をインストールする必要があります。GAMESS をインストールする方法は インストール に記載しています。

# 6.7.1 キーワード設定

GAMESS の計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は Run ボタン、一旦メインウィンドウに戻る場合は OK ボタンを押してください。

Run をクリックしたときの挙動は (1) GAMESS 実行, (2) GAMESS 実行 を参照してください。

*Reset* ボタンでデフォルトの状態に戻ります。*Save as Default* ボタンで現在の状態をデフォルトの状態として保存します。*Save as Default*  $\rightarrow$  *Clear Default Settings* で保存されてデフォルトの状態を出荷時の状態に戻します。

Easy Setup 簡易設定画面を表示します。

NCPUS 並列数を指定します。

NODES (FireFly) 計算に使用するノードのディレクトリを指定します。

Basic タブ

**\$CONTRL** 

ICHARG 電荷を指定します。

- MULT 多重度を指定します。
- SCFTYP SCF 計算方法を指定します。
- RUNTYP 計算目的を選択します。
- COORD 分子構造データの形式を指定します。
- MAXIT SCF 計算の反復回数の上限を指定します。
- NZVAR 内部座標の数を指定します。
- EXETYP 実際に計算を行うかどうかの指定で、入力をチェックするときは CHECK を指定します。
- NOSYM 計算の際に対称性を利用するかどうかを指定します。
- NPRINT 出力の詳細度を指定します。
- LOCAL 軌道の局在化の方法を指定します。(デフォルト0=しない)
- ECP Pseudopotential を指定します。
- DFTTYP 密度汎関数法の基底関数系を指定します。
- TDDFT 時間依存 (Time-dependent)DFT 法を用いて励起状態のエネルギー計算を行うかどうかを指定します
- Others その他のキーワードを記入します。

### **\$BASIS**

- **Basis Set** 基底関数系を選択します。GBASIS、NGAUSS、NDFUNC、NFFUNC、DIFFSP、 DIFFS に反映されます。
- GBASIS 基底関数系の基本セット
- NGAUSS Gaussian 関数の数
- EXTFIL 外部ファイルから基底関数を読み込みます。
- NDFUNC 加える d-分極関数の数
- NFFUNC 加える f-分極関数の数
- NPFUNC 加える p-分極関数の数

DIFFSP sp-diffuse 関数を加えるかどうかの指定

- DIFFS s-diffuse 関数を加えるかどうかの指定
- Others その他のキーワードを記入します。

# Advanced タブ

### **\$SYSTEM**

**TIMLIM** 計算の制限時間 (デフォルト 600 分)

```
MWORDS メモリー使用量 (デフォルト 1MW)
```

```
Others その他のキーワードを記入します。
```

### \$SCF

```
DIRSCF ダイレクト SCF 計算法を使用するかどうかを指定します。
```

**DAMP** Fock 行列の作成に際して、Davidson damping を利用します。

CONV SCF 収束判定の際の密度変化の閾値を指定します。(デフォルト 1.0D-05)

Others その他のキーワードを記入します。

**\$GUESS** 

GUESS 初期波動関数の求め方を指定します。

Others その他のキーワードを記入します。

**\$STATPT** 

NSTEP 構造最適化のステップ数の上限を指定します。(デフォルト20)

**OPTTOL** エネルギー勾配の閾値を指定します。(デフォルト 0.0001 Hartree/Bohr)

METHOD 構造最適化のアルゴリズムを指定します。

HESS Hessian 行列の求め方を指定します。

Others その他のキーワードを記入します。

Z-Matrix Z-Matrix の設定を行います。

DFT

\$DFT

LC 長距離補正を行うかどうかを指定します。(BLYP, BOP 及び BVWN の場合のみ)

MU 長距離補正のパラメータの値を指定します。(デフォルト 0.33)

Others その他のキーワードを記入します。

### **\$TDDFT**

NSTATE 求める状態の数 (基底状態をのぞく)を指定します。

**NRAD** 密度汎関数の導関数を求める際の動径方向の格子点の数を指定します。(デフォル ト 48)

NLEB 角度方向の格子点の数を指定します。(デフォルト 110)

Others その他のキーワードを記入します。

# **6.7.2** キーワード読み込み

既存の GAMESS の入力ファイルから、キーワード(計算条件)のみを読み込みます。

# 6.7.3 punch ファイルから読み込み

### **\$VEC**を読み込み

\$VECを punch ファイルから読み込みます。

## **\$HESS**を読み込み

\$HESS を punch ファイルから読み込みます。

# 6.7.4 (1) GAMESS 実行, (2) GAMESS 実行

メインウィンドウで GAMESS の入力ファイルが開かれている場合は、そのファイルを使って GAMESS を実行します。開かれていない場合は、GAMESS の入力ファイルを保存した上で GAMESS を実行します。

入力ファイルを保存する際に、 座標出力形式を切り替えの選択肢(Z-Matrix または XYZ)および 座標表示エリアの Z-Matrix / XYZ タブの選択に応じて座標の出力フォーマットが変化します。

(1) GAMESS 実行, (2) GAMESS 実行 の違いは、起動する GAMESS のプログラムパスです。プログラムパスは、 ツール  $\rightarrow$  環境設定  $\rightarrow$  プログラムパス で変更することができます。(1) GAMESS 実行, (2) GAMESS 実行 には、バージョンの異なる GAMESS などを設定して、両者を場面に応じて使い分けながら使用することを想定しています。

外部基底関数ファイルを使用するには(\$BASIS EXTFIL=.T.)、 basis.lib を GAMESS の EXE ファイルと同じディレクトリに置きます。WinGAMESS の場合は、 runscript.csh の中で setenv EXTBAS ../basis.lib と指定します。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが water.inp の時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	前明
	計算のログファイルです。
<b>outファイル</b> water.out	
<b>batファイル</b> water.inp.bat	GAMESS を実行するためのバッチファイ ルです。
punファイル water.pun	詳細な結果解析を行うための punch ファ イルです。

ジョブは Winmostar Job Manager を通じて実行されます。

# 6.7.5 ログを表示 (out,log)

out ファイルをテキストエディタで開きます。

# **6.7.6** アニメーション

out ファイルの情報から構造最適化、スキャン、IRC 計算等のアニメーションを作成し表示します。 アニメーション表示の操作方法は Animation ウィンドウ を参照してください。

## 6.7.7 結果解析

分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR

out ファイルの情報から分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR の情報を取得し表示します。

読み込まれた電荷の情報は 表示  $\rightarrow$  ラベル/電荷  $\rightarrow Mulliken$  電荷 などを選択することで分子表示エリアに表示することができます。

サブウィンドウの操作方法は Energy Level Diagram ウィンドウ, MO Plot ウィンドウ, UV-Vis Spectrum ウィンドウ, NMR ウィンドウ を参照してください。

IR/ラマンスペクトル

out ファイルを選択し、振動スペクトル (IR またはラマンスペクトル)を表示します。

RUNTYP=HESSIAN の out ファイルから IR スペクトルを読み込ませた後、続けて本メニューで RUNTYP=RAMAN の out ラマンスペクトルを読み込ませると、両方のスペクトルを同時にサブウィ ンドウに表示することができます。

サブウィンドウの操作方法は IR Spectrum ウィンドウ を参照してください。

### **RESP** 電荷

RESP 法に基づく点電荷を punch ファイルから算出します。

読み込ませる punch ファイルは、キーワード設定 → Easy Setup において RESP/ESP の設定を選ん で実行した計算から出力されている必要があります。スピン多重度は1という前提で処理されます。

「分子構造的に等価な原子に同じ電荷を割り当てますか?」と聞かれ、 はい をクリックすると内 部的には acpype を、 いいえ をクリックすると内部的には AmberTools を直接使って RESP 電荷を 算出しています。基本的には はい をクリックする方を推奨しますが、大きい分子の場合などに処理 が正常終了しない場合があり、そのような場合は いいえ をクリックしてください。両者の計算結果 は、大きくは変化しないことが期待されます。いいえ を選択した後に分子構造的に等価な原子(例 えばメチル基の 3 つの水素原子)の電荷を平均化したい場合は、 グループの電荷を平均化 を使用 してください。

警告:本機能を利用するためには CygwinWM のセットアップ が必要です。

## 6.7.8 PDB

### PDB 編集

PDB データの残基情報等を残したまま、原子削除等の編集を行います。

### **FMOutil**

FMOutilを起動します。

## 6.7.9 PIO 解析

Paired Interacting Orbitals 解析を実行します。詳細は PIO 解析ウィンドウ を参照してください。

# 6.8 $QM \rightarrow Gaussian \nearrow \Box \neg \neg$

Gaussian に関するメニューです。

Gaussian を利用するためには別途 Gaussian をインストールする必要があります。

# 6.8.1 キーワード設定

Gaussian の計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は Run ボタン、一旦メイン ウィンドウに戻る場合は OK ボタンを押してください。

Run をクリックしたときの挙動は 実行 を参照してください。

Reset ボタンでデフォルトの状態に戻ります。Save as Default ボタンで現在の状態をデフォルトの状態として保存します。Save as Default  $\rightarrow$  Clear Default Settings で保存されてデフォルトの状態を出荷時の状態に戻します。

Easy Setup 簡易設定画面を表示します。

%nprocshared 並列数を指定します。

Link0

#nproc=n プロセッサ数を指定します。

#Chk=file チェックポイントファイルを指定します。

**#Mem=n** 動的メモリ量をワード単位で指定します。KB, MB, GB, KW, MB, GW の単位を指定 することもできます。(デフォルト: 6MW)

Comment コメントを記述します。

- # ルートセクションの始まりを指定します。
- #N 標準レベルで出力を行います。(デフォルト)
- **#P** 詳細な出力を行います。各リンクの開始時と終了時における実行時間などや, SCFの収束 に関する情報が出力されます。
- #T 重要な情報と結果のみを出力する簡潔な出力を指定します。

Hamiltonian 使用するハミルトニアンを指定します。

- **hf** Hartree-Fock 計算を行います。明示的に指定されない限り,一重項には RHF を,それより 高次の多重度では UHF を用います。
- rhf Restricted Hartree-Fock 計算を行います。
- uhf Unrestricted Hartree-Fock 計算を行います。
- am1 AM1 ハミルトニアン を用いた半経験的計算を行います。
- pm3 PM3 ハミルトニアン を用いた半経験的計算を行います。
- pm3mm HCON 結合に関する分子力学補正が含まれた PM3 ハミルトニアン を用いた半経験 的計算を行います。

b3lyp Becke3 汎関数に LYP 非局所相関汎関数を組み合わせた密度汎関数法計算を行います。

ub3lyp b3lypのUnrestricted版です。

mp2 Hartree-Fock 計算の後に 2 次までの Moller-Plesset 相関エネルギー補正を行います。

ump2 mp2のUnrestricted版です。

mp4 Hartree-Fock 計算の後に 4 次までの Moller-Plesset 相関エネルギー補正を行います。

ump4 mp4 の Unrestricted 版です。

cis 一電子励起 CI を用いて励起状態を計算します。

cisd 二電子励起 CI を用いて励起状態を計算します。(CI と同義)

indo INDO ハミルトニアンを用いた半経験的計算を行います。

cndo CNDO ハミルトニアンを用いた半経験的計算を行います。

gvb GVB(General Valence Bond; 一般化原子価結合) 計算を行います。

Basis 基底関数セットを指定します。

Pop 分子軌道の出力や電子密度解析及び原子の電荷分布などを制御します。

none 分子軌道を出力せず,電子密度解析も行いません。

minimal 原子の電荷と軌道エネルギーを出力します。

- **regular** 占有軌道と仮想軌道を 5 つずつ出力します。密度行列と Mulliken 電子密度解析も出力 します。
- full すべての占有軌道と仮想軌道を出力します。密度行列と Mulliken 電子密度解析も出力します。

Calc. Type EF (Eigen Vector Following) 法による構造最適化計算を行います。

opt 構造最適化を実行します。

opt=z-matrix 内部座標で構造最適化を行います。

- opt=modredundant redundant 内部座標の定義(探索や束縛情報を含む)を追加・削除・修正 ます。構造指定の後に入力セクションが必要です。
- opt=(ts,noeigentest,calcfc) 遷移状態に対する最適化を行います。曲率のテストを行いません。 初回に力の定数を計算します
- irc 反応経路を追跡します
- irc=(maxpoint=20, stepsize=20t, calcfc)反応経路を追跡します。経路上の点の個数とステップ サイズを指定します。初回に力の定数を計算します

MaxCyc 最適化ステップの最大数を設定します。

Freq

freq 力の定数と振動数の計算を行います。

freq=raman IR 強度に加えてラマン強度も計算します。

freq=vcd 通常の振動数解析に加えて振動円二色性 (VCD) 強度を計算します

- freq=noraman Hartree-Fock 解析的振動数計算でラマン強度を求めません。
- freq=nraman 電場に関する解析的双極子導関数を数値的に微分することによって分極率導関数を求めます。

freq=nnraman 核座標に関する解析的分極率を数値微分して分極率導関数を求めます。

Charge 電荷の値を指定します。

Multiplicity 多重度を指定します。

Td

- td 時間依存 (time-dependent)Hartree-Fock または DFT 法を用いて励起状態のエネルギー計算 を行います
- td=(nstates=n) n 個の状態に対して時間依存計算法を用いて励起状態のエネルギーを求めます。 (デフォルト3)

gfinput 基底関数系を入力フォーマットと同様な形式で出力します。

gfprint 基底関数系を表形式で出力します。

nosymm 座標の再配向を行わず, Z-matrix 配向ですべての計算を実行します。

guess=read チェックポイントファイルから初期波動関数を読み込みます

geom=check 分子指定セクションをチェックポイントファイルから取り出します。

Others その他のキーワードを記入します。

## **6.8.2** キーワード読み込み

既存の Gaussian の入力ファイルから、キーワード(計算条件)のみを読み込みます。

# 6.8.3 実行

メインウィンドウで Gaussian の入力ファイルが開かれている場合は、そのファイルを使って Gaussian を実行します。開かれていない場合は、Gaussian の入力ファイルを保存した上で Gaussian を実行します。

入力ファイルを保存する際に、 座標出力形式を切り替えの選択肢(Z-Matrix または XYZ)および 座標表示エリアのZ-Matrix / XYZ タブの選択に応じて座標の出力フォーマットが変化します。

Gaussian のプログラムパスは、 ツール  $\rightarrow$  環境設定  $\rightarrow$  プログラムパス で変更することができます。 実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが water.gjf の時のファイル/ フォルダ名を併記しています。

種類	前明
	計算のログファイルです。
log ファイル	
water.log	
<b>batファイル</b> water.gjf.bat	Gaussian を実行するためのバッチファイ ルです。
作業ディレクトリ water_gau_tmp\	作業ディレクトリです。

ジョブは Winmostar Job Manager を通じて実行されます。

# 6.8.4 ログを表示 (log/out)

log ファイルをテキストエディタで開きます。

# **6.8.5** アニメーション

## 構造最適化

log ファイルの情報から構造最適化計算のアニメーションを作成し表示します。

アニメーション表示の操作方法はAnimation ウィンドウを参照してください。

## **IRC/modred**

log ファイルの情報から IRC 計算のアニメーションを作成し表示します。

アニメーション表示の操作方法はAnimation ウィンドウを参照してください。

# 6.8.6 結果解析

## 分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR

log ファイルの情報から分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR の情報を取得し表示します。

読み込まれた電荷の情報は 表示  $\rightarrow$  ラベル/電荷  $\rightarrow$  *Mulliken* 電荷 などを選択することで分子表示エリアに表示することができます。

サブウィンドウの操作方法は Energy Level Diagram ウィンドウ, MO Plot ウィンドウ, UV-Vis Spectrum ウィンドウ, NMR ウィンドウ を参照してください。

IR/ラマンスペクトル

log ファイルを選択し、振動スペクトル(IR またはラマンスペクトル)を表示します。

サブウィンドウの操作方法は IR Spectrum ウィンドウ を参照してください。

## **RESP** 電荷

RESP 法に基づく点電荷を esp ファイルから算出します。

読み込ませる esp ファイルは、 キーワード設定  $\rightarrow Easy Setup$  において RESP/ESP の設定を選んで 実行した計算から出力されている必要があります。スピン多重度は 1 という前提で処理されます。 内部では、Antechamber を用いて RESP 電荷を算出しています。

本機能を利用する際は、G09.C.01 以降のバージョンを利用する必要があります。G09.C.01 よりも前のバージョンを使う場合は、IOP の変更が必要です。

警告:本機能を利用するためには CygwinWM のセットアップ が必要です。

# 6.8.7 FormChk

G09W,G03W ユーティリティの Formchk を起動し、.chk ファイルから書式付の.fch ファイルを作成し、表示します。

## 6.8.8 Fchk ファイル読み込み (Cubegen)

G09W,G03W ユーティリティの Cubegen を起動し、.fch ファイルを読込んで Cube ファイルを作成 します。Cubegen がない場合は、Winmostar 内臓の OpenCubegen を使います。

サブウィンドウの操作方法は MO Plot ウィンドウ と以下を参考にしてください。

Property

MO 分子軌道 Density 電子密度 ESP ESP Spin スピン密度 (α-β) Alpha αスピン密度 Beta βスピン密度 Current Density Current Density Shielding Density Shielding Density

Type Density キーワードのオプションを指定します。(HF, MP2, CI, QCI)

Cube Cube ファイルを出力します。

# 6.8.9 Cube ファイル読み込み

Cube 形式ファイルを読込んで表示します。

GAMESS の pun ファイルの場合は、Cube ファイルに変換します。

サブウィンドウの操作方法は MO Plot ウィンドウ と以下を参考にしてください。

**cube Manipulation** *File 1* と *File 2* に指定した cube ファイルに対して操作を実行します。

- map 上の欄のデータに下の欄のデータをマッピングします。(例 Density に ESP をマッピン グする)
- subtract 2 つの cube ファイルのデータの差を対象とします。
- sub 2 2 つの cube ファイルのデータの自乗の差を対象とします。
- add 2つの cube ファイルの和を対象とします。

Cube Map で対象とした cube ファイルの演算結果を出力し表示の対象とします。

**Cubegen** Cubegen を起動し、fch ファイルを読込んで Cube ファイルを作成します。詳細は *Fchk* ファ イル読み込み (*Cubegen*) を参照してください。

## 6.8.10 PIO 解析

Paired Interacting Orbitals 解析を実行します。詳細は PIO 解析ウィンドウを参照してください。

# 6.9 $QM \rightarrow NWChem \checkmark \exists \exists \neg \neg$

NWChem に関するメニューです。

NWChem を利用するためには別途 NWChem をインストールする必要があります。NWChem をインストールする方法は インストール に記載しています。

# 6.9.1 キーワード設定

NWChemの計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は*Run*ボタン、一旦メインウィンドウに戻る場合はOKボタンを押してください。

Run をクリックしたときの挙動は実行を参照してください。

Reset ボタンでデフォルトの状態に戻ります。

Easy Setup 簡易設定画面を表示します。

Use MPI チェックを入れると MPI を用います。並列数はチェックボックスの横に入力します。

Basic タブ

Title タイトルを指定します。

Basis 基底関数系を指定します。cartesian/sphericalを選択します。一部原子の例外を Exception で指定します。

Task 計算手法 (theory) と計算目的 (operation) を指定します。

Charge 電荷を指定します。

### DFT

Multiplicity DFT のスピン多重度を指定します。

Exchange DFT の交換関数を指定します。

Correlation DFT の相関関数を指定します。

## SCF

Multiplicity SCFの多重度を指定します。

Wave Function SCF の計算理論を指定します。

### Property

Mulliken Mulliken 電荷を出力するか選択します。

Shielding NMR 計算を行うか選択します。

Dipole ダイポールモーメントを出力するか選択します。

NEB/String タブ Task の Operation に neb か string を指定したときに有効になります。

NBeads ビーズの数を指定します。

KBeads NEB のバネ定数を指定します。

MaxIter 最適化の最大繰り返し数を指定します。

StepSize 最適化のステップサイズを指定します。

NHist 準ニュートン法で使用するヒストリーの数を指定します。

Freezel ZTS で最初のビーズを固定するか設定します。

FreezeN ZTS で最後のビーズを固定するか設定します。

Convergence 収束条件を loose/default/tight から選びます。

- XYZ\_Path 初期パスのファイルを指定します。計算のリスタートなどで使用します。Print\_Shift 指定したステップ毎にパスを出力します。
- EndGeom 最後のビーズの座標を指定します。Load ボタンでファイルを指定して読み込めま す。Winmostar で読み込めるフォーマットを XYZ 形式で読み込みます。また、Edit ボタ ンで編集することができます。

### Advanced タブ

Memory メモリ使用量を指定します。

Set tolguess initial guess の精度を指定します。

ECP ECP のポテンシャルを指定します。

Geometry

noautoz 内部座標の変換を行わないように設定します。

Other Settings その他の入力要素を記述します。

# 6.9.2 キーワード読み込み

既存の NWChem の入力ファイルから、キーワード(計算条件)のみを読み込みます。

# 6.9.3 実行

メインウィンドウでNWChemの入力ファイルが開かれている場合は、そのファイルを使ってNWChemを実行します。開かれていない場合は、NWChemの入力ファイルを保存した上でNWChemを実行します。

入力ファイルを保存する際に、 座標出力形式を切り替えの選択肢(Z-Matrix または XYZ)および 座標表示エリアの Z-Matrix / XYZ タブの選択に応じて座標の出力フォーマットが変化します。

NWChem のプログラムパスは、 ツール → 環境設定 → プログラムパス で変更することができます。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが water.nw の時のファイル/フォルダ名を併記しています。

│ 種類	説明
	計算のログファイルです。
outノアイル	
water.out	
	計算の詳細情報をまとめたファイルです。
movecs ファイル	
water.movecs	
	NWChem を実行するためのバッチファイ
	ルです。
bat J F 1 IV	
water.bat	
作業ディレクトロ	作業ディークトロです
	1F未ノ 1 レクトリ C 9 。 
water_nw_tmp\	

ジョブは Winmostar Job Manager を通じて実行されます。

# 6.9.4 ログを表示 (out)

out ファイルをテキストエディタで開きます。

# 6.9.5 アニメーション

## 構造最適化

out ファイルの情報から構造最適化等のアニメーションを作成し表示します。 アニメーション表示の操作方法は Animation ウィンドウ を参照してください。

# **NEB/String**

xyz ファイルの情報から NEB, String 計算のアニメーションを作成し表示します。 アニメーション表示の操作方法は *Animation* ウィンドウ を参照してください。

# 6.9.6 結果解析

## 分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR

out ファイルの情報から分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR の情報を取得し表示します。

読み込まれた電荷の情報は 表示  $\rightarrow$  ラベル/電荷  $\rightarrow$  Mulliken 電荷 などを選択することで分子表示エリアに表示することができます。

サブウィンドウの操作方法は Energy Level Diagram ウィンドウ, MO Plot ウィンドウ, UV-Vis Spectrum ウィンドウ, NMR ウィンドウ を参照してください。

IR/ラマンスペクトル

out ファイルを選択し、振動スペクトル (IR またはラマンスペクトル)を表示します。

**RUNTYP=HESSIAN** の out ファイルから IR スペクトルを読み込ませた後、続けて本メニューで **RUNTYP=RAMAN** の out ラマンスペクトルを読み込ませると、両方のスペクトルを同時にサブウィ ンドウに表示することができます。

サブウィンドウの操作方法は IR Spectrum ウィンドウ を参照してください。

# 6.10 MD メニュー

分子動力学法に関するメニューです。

MD メニューの機能を利用するには MD パックが必要です。また、ほぼ全ての機能で CygwinWM が必要です。

## 6.10.1 溶媒を配置/セルを構築

本機能は主に以下の2つの目的で使用されます。

- 1. メインウィンドウに表示されている分子の周りに溶媒分子を並べる
- 2. 低分子を並べて液相を作成する

並べることが可能な分子は以下の3種類です。

- メインウィンドウに表示された分子
- mol2 形式で保存された分子
- 水分子

現在のファイル名の末尾に\_builder\_tmp を付けた作業用フォルダが作成され、その中で Packmol を用いた処理が行われます。

作業用フォルダ以下の packmol.bat、packmol.log に詳細が記載されています。作業用フォル ダ以下の output.pdb が最終的に生成された分子構造を含むファイルになります。

- Add Displayed Molecule メインウィンドウに表示されている分子を追加します。ボタン を押した後、追加する分子数を入力します。1個しか配置しない場合は、メインウィ ンドウに表示されている分子については座標が固定された状態で他の分子が並べら れます。
- Add Water 系に水分子を追加します。ボタンを押した後、追加する分子数を入力します。 水分子のモデルは、*Options* タブの *Water Model* から選びます。
- Add .mol2 File 系にあらかじめ.mol2 形式で保存した分子を追加します。ボタンを押した 後、.mol2 ファイルの場所を指定し、追加する分子数を入力します。追加する分子数 が1のときは、その分子を乱数的に配置するか、.mol2 ファイルに書かれた座標に固 定して配置するか指定します。PDB ファイルから切り出したリガンド分子を配置す る場合は、通常は固定して配置します。QM 計算などから求めた点電荷(RESP 電荷 など)を用いて MD 計算を実行する場合は、ここで指定する.mol2 ファイルにその点 電荷の情報が記載されている必要があります。

Delete 選択された上のリストの中の項目を削除します。

**Simulation Cell** 

- Set Density 作成されるシミュレーションセルの密度を指定します。大きすぎる場合 は分子を十分に挿入できないことがあるため、液相の場合は通常 0.5~0.8 g/cm<sup>3</sup> 程度に設定します。
- Set Distance from Solute *Method* に *Solvate* を選んでいる際に、メインウィンドウに 表示された分子とシミュレーションセルの間の距離を指定します。
- Set Lattice Constants シミュレーションセルのサイズを直接指定します。 Same as main window ボタンを押すと、メインウィンドウに設定されたセルと同じ値が入力されます。
- Change only one direction 2つの格子定数を固定しながら、指定密度になるよう1つの格子定数を動かすときに使用します。 *Box Type* で triclinic を選択すると使えるようになります。特に、界面構造を作成する際に有効な機能です。

Box Type シミュレーションセルの形状を指定します。

### Option

Water Model Add Water により追加される水モデルを指定します。指定した水モデ ルの座標データは Cygwin 上の Gromacs にインストールされたトポロジファイル のライブラリから引用されます。

#### **Packmol Parameters**

**Tolerance** Packmol における tolerance パラメータを指定します。

Margin Packmol を使用する場合のセルの端付近の原子を置かない領域の幅を指定します。

Random seed Packmol を使用する場合の乱数の種を指定します。

- Automatically change random seed every time Packmol を使用する場合の乱数の 種を毎回自動で変更します。
- Reset このウィンドウにおける設定をリセットします。

Build このウィンドウで設定された内容に従いシミュレーションセルを作成します。

## 6.10.2 分子を挿入

mol2 形式で保存された分子を複数個、メインウィンドウに表示されている構造に追加することがで きます。シミュレーションセルが作成されていない場合は、事前に セルを作成 または 溶媒を配置/ セルを構築 を使用して作成してください。

追加する分子について、座標を変えずに1つだけ追加したい場合は、 追加読み込み を選択してく ださい。

内部動作は 溶媒を配置/セルを構築 と同じです。

## 6.10.3 自動で電荷を割り当て

複数分子に対して、自動で電荷を割り当てます。

現在のファイル名の末尾に \_charge\_tmp を付けた作業用フォルダが作成され、その中で Packmol を用いた処理が行われます。

- 全ての Method を… に設定 チェックを入れた場合には、メインウィンドウに表示されて いる全ての分子種に対し、プルダウンメニューで指定した Method で電荷を計算しま す。チェックを入れなかった場合は、各原子種に対し Method を選択してください。
  - 既に電荷が割り当てられた分子種には新たに電荷を割り当てない チェックを入れた 場合には、全ての Method を… に設定 にチェックが入っていても、すでに電荷が 割り当てられた分子については新たに電荷を割り当てません。
  - タンパク質・単原子イオン・水には新たに電荷を割り当てない チェックを入れた場 合、タンパク質・単原子イオン・水分子については、この機能で電荷を割り当て ません。タンパク質の MD 計算においては、AM1-BCC 等の方法では電荷の計算 に時間が掛かり、また力場の割り当て時に残基名から自動的に電荷が割り振られ るため、チェックを入れる必要があります
- Method 電荷を割り当てる方法を選択します。
- Charge その分子種の電荷を設定します。中性分子では 0、イオンでは+1,-1 などその電荷を指定します。

## 6.10.4 手動で電荷を割り当て

### Acpype を使用

メインウィンドウに1分子だけ表示されている状態で本機能を呼び出すと、AM1-BCCまたはGasteiger の方法で点電荷を各原子に対して割り当てます。内部的には Cygwin 上の Acpype プログラムを使 用しています。溶質分子の電荷割り当てや、溶媒を配置/セルを構築または 分子を挿入 にて挿入す る mol2 形式のファイルの作成時に使用します。中性でない多原子イオンに電荷を割り振る場合は、 RESP 電荷または本機能を利用する必要があります。多原子イオンの場合は、*Total charge [e]* に電 荷を入力します。現在のファイル名の末尾に \_acpype\_tmp を付けた作業用フォルダが作成され、 その中で処理が行われます。作業用フォルダ以下の temp.sh、 temp.log に詳細が記載されます。 作業用フォルダ以下の input.acpypeinput GMX.itp に記された電荷の値が結果となります。

### マニュアル入力

メインウィンドウに表示されている分子(結晶)構造に対し、原子種毎に点電荷の値を直接指定す ることができます。主に固体系向けの機能です。

#### GAMESS を使用 (RESP 電荷)

GAMESS を使用して RESP 電荷を算出します。詳細は RESP 電荷 を参照してください。

## 6.10.5 ポリマー

*MD*→ポリマーメニューを参照してください。

### 6.10.6 界面ビルダ

*MD* → 界面ビルダ メニュー を参照してください。

# 6.10.7 水をイオンに置換

水分子を単原子イオンに置換します。あらかじめ系内に水分子を配置しておく必要があります。水 を配置するためには 溶媒を配置/セルを構築 を使用してください。主にタンパク質系において系内 の電荷を中和するために使われます。内部では Cygwin 上で gmx genion を実行します。

**Neutral** *True* の場合は、系全体の電荷が中性となるようイオンを配置し、 *Number of Cations* と *Number of Anions* は無視されます。 *False* の場合は、 *Number of Cations* と *Number of Anions* に 記した個数のイオンがそれぞれ配置されます。

Concentration 置換するイオンの濃度を指定します。

Cations/Anions 陽イオンおよび陰イオンの種類をプルダウンから指定します。

- Number of Cations/Number of Anions 陽イオンおよび陰イオンの個数を指定します。 *Neutral* が *False* の時に有効な設定となります。
- Execute Cygwin 上で gmx genion を実行します。現在のファイル名の末尾に \_genion\_tmp を付 けた作業用フォルダが作成され、その中で処理が行われます。作業用フォルダ以下の temp.sh 、 temp.log に詳細が記載されています。途中、系内の分子が不適切な場合に、一時的なト ポロジファイル(temp.top)の自動生成に失敗することがあります。トポロジファイル作成 の詳細は作業フォルダ内の temp\_top\_tmp 内に出力されます。

## 6.10.8 Gromacs

 $MD \rightarrow Gromacs$  メニュー を参照してください。

## 6.10.9 LAMMPS

 $MD \rightarrow LAMMPS$  メニュー を参照してください。

# 6.10.10 Amber

 $MD \rightarrow Amber$  メニュー を参照してください。

## 6.10.11 MODYLAS

MODYLAS のキーワード設定、計算の実行、アニメーションの表示、エネルギーの表示を行います。 基本的には *MD* → *Gromacs* メニュー と類似の挙動を示します。

# 6.11 *MD* $\rightarrow$ *Gromacs* $\checkmark \Box \neg \neg$

Gromacs に関するメニューです。

Winmostar では Gromacs を Cygwin 環境上で実行するため、本機能を利用するためには *CygwinWM* のセットアップ が必要です。

# 6.11.1 力場を割り当て

力場を設定します。ソルバの種類に応じて、選択肢が変化します。

自動で割り当てられるパラメータをテキストファイル上で編集してから計算したい場合は、まず自動でパラ メータを割り当てで一旦パラメータを割り当て、その後のキーワード設定ウィンドウの Options タブで Dump all files for remote をクリックしファイルを保存してください。その後、そのファイルを編集し、編集後のファ イルを Winmostar で開いてください。そして、再度力場を割り当て機能を起動し、トポロジファイルに書か れたパラメータを使用または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を選択してください。

自動でパラメータを割り当て 新たに力場パラメータを割り当てます。

- (一般) タンパク質、水分子以外の分子の力場を指定します。内部では、GAFF, GAFF2, OPLS/AA-L+GAFF の場合は acpype、 Dreiding の場合は内製プログラム、UFF の場合は OpenBabel を独自に拡張し たプログラムが使用されます。Dreiding の設定は polymer/dreiding.lib.txt に書かれていま す。UFF の詳細は Universal Force Field を確認してください。
  - Exception 特定の分子に対し、(General) にて選択した力場を使わず、ユーザが指定する LJ パラメー タを割り当てます。サブウィンドウの左の欄にて LJ パラメータを指定したい分子にチェックを 入れ、右の欄で LJ パラメータを入力します。

注釈: 例えば固液界面系において固相の原子に LJ パラメータを割り振りたい時などに使用します。

(タンパク質/イオン)タンパク質、単原子の力場を指定します。ここで、PDBやgroフォーマットにおいてアミノ酸残基の名前が割り当てられている原子がタンパク質として認識されます。内部的にはgmx pdb2gmxが使用されます。

警告: 残基名を含まないファイルから分子構造を読み込んだ場合は本機能を使用できません。

- (水分子)水分子の力場を指定します。 溶媒を配置/セルを構築 で選択した水モデルを指定する必要があり ます。内部的には Cygwin にインストールされた Gromacs のトポロジのライブラリからパラメータ を取得します。
- タンパク質向けに [position\_restraints] を追加 タンパク質が存在する場合は Advanced タブにおける -POSRES で位置を拘束するための情報([position\_restraints] セクション)をトポロジファ イルに書き込みます。タンパク質が存在しない場合は無視されます。
- 選択原子向けに [position\_restraints] を追加 ユーザが指定する分子に対し、 Advanced タブにおける -POSRES で位置を拘束するための情報([position\_restraints] セクション)をトポロジファ イルに書き込みます。例えば固液界面系に於いて固相を固定する場合などに使用します。
- 選択原子向けに [distance/angle/dihedral\_restraints] を追加 ユーザが指定する分子に対し、 Advanced タ プにおける -POSRES で距離・角度・二面角を拘束するための情報をトポロジファイルに書き込み ます。

Dump Now 現在の設定に基づき、力場が割り当てられたファイルを生成します。

### 注釈:

 力場の情報をテキストエディタ等で編集してカスタマイズしたい場合は、まず本機能を使用してファ イルを保存し、Gromacsの場合は top、LAMMPSの場合は data ファイルをテキストエディタ等で編 集してください。

- 次に、Gromacs の場合は、トポロジファイルに書かれたパラメータを使用を選択して OK ボタン をクリックしてください。そして、top ファイルの場所を聞かれるので、先ほど保存・編集した top ファイルを開いてください。
- LAMMPS の場合は、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を選択し Next > ボ タンをクリックしてください。そして、力場の種類を選択してくださいと出るので、使用する汎用 力場の種類を選択して OK ボタンをクリックしてください。
- 電荷はメインウィンドウに表示されている構造から取得されます。メインウィンドウに複数種類の電荷が設定されている場合は(例えばGAMESSのログファイルを開き Mulliken 電荷とLowdin 電荷が設定されている場合など)(高優先)User 電荷 > NBO 電荷 > Lowdin 電荷 > ESP 電荷 > Mulliken 電荷(低優先)の順番に優先され使用されます。
- パラメータファイルを使用(無機物、**ReaxFF、DPD**向け)(LAMMPS向け)無機物用ポテンシャル、ReaxFF または DPD を使用したい場合に選択します。*Next* > ボタンを押した後に、実際に使用する力場の種類を 指定します。
- トポロジファイルに書かれたパラメータを使用 (Gromacs向け)既に存在している top ファイルを用いて MD 計算を実行する場合に選択します。メインウィンドウには対応する gro ファイルを開いておく必要があり ます。
- 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 (LAMMPS 向け)既に存在している data ファイル を用いて MD 計算を実行する場合に選択します。メインウィンドウには使用する data ファイルを開いて おく必要があります。 Next > ボタンを押した後に、使用する力場の種類を指定します。

# 6.11.2 キーワード設定

Gromacsの計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は*Run*ボタン、一旦メインウィンドウに戻る場合は*OK*ボタンを押してください。

Run をクリックしたときの挙動は Gromacs 実行 を参照してください。

電荷が割り当てられていない分子がある場合は、 自動で電荷を割り当て が自動で立ち上がります。 力場が割り当てられていない場合は、 力場を割り当て が自動で立ち上がります。

*Reset* ボタンでデフォルトの状態に戻ります。*Save* ボタンで Force Field を除く設定を保存します。 *Load* ボタンで *Save* にて保存した設定を読み込みます。

Extending Simulation 継続ジョブを実行します。

詳細は Gromacs 実行 を参照してください。

Preset 計算条件のプリセットを指定します。各プリセットは以下のキーワードを変更します。

	Minimize (fast)	NVT (fast)	NPT (fast)	NVE (fast)
dt		0.002	0.002	0.002
nsteps	5000	5000	5000	5000
integrator	steep	md	md	md
gen-vel		yes	no	no
tcoupl		berendsen	berendsen	
ref-t		300	300	
				次のページに続く

	Minimire		NDT	
	winimize		NP1 (( ))	NVE
	(fast)	(fast)	(fast)	(fast)
pcoupl		no	parrinello-	
			rahman	
ref-p			1.0	
pbc	yes	yes	yes	yes
comm-mode	linear	linear	linear	linear
nstcomm		50	50	50
nh-chain-length		10	10	
nsttcouple		-1	-1	
nstpcouple			-1	
constraints	hbonds	all-bonds	all-bonds	all-bonds
lincs-order		4	4	4
lincs-iter		1	1	1
shake-tol		1e-5	1e-5	1e-5
nstxout	100	100	100	100
nstvout	100	100	100	100
nstenergy	10	10	10	10
buffer-tolerance	5e-3	5e-3	5e-3	5e-3
rvdw	1.0	1.0	1.0	1.0
rvdw-switch	0.9	0.9	0.9	0.9
coulombtype	pme	pme	pme	pme
rcoulomb	1.0	1.0	1.0	1.0
rcoulomb-	0.9	0.9	0.9	0.9
switch				
fourier-spacing	0.12	0.12	0.12	0.12
pme-order	4	4	4	4
ewald-rtol	1e-5	1e-5	1e-5	1e-5
	False	False	False	False
Enable				
double precision				
-				
	False	False	False	False
-DFLEXIBLE				
	False	False	False	False
Extend				
simulation				
from full-				
precision				
trajectory				
agectory				
1	1	1	1	1

表3-前のページからの続き

	Minimize	NVT	NPT	NVE
dt		0.0005	0.0005	0.0005
nsteps	20000	20000	20000	20000
integrator	steep	md	md	md
gen-vel		yes	no	no
tcoupl		nose-hoover	nose-hoover	
ref-t		300	300	
pcoupl		no	parrinello-	
ref-n			1.0	
nbc	ves	ves	ves	ves
comm-mode	linear	linear	linear	linear
nstcomm		1	1	1
nh-chain-length		1	1	1
nsttcouple		1	1	
nstpcouple		1	1	
constraints	hbonds	hbonds	hbonds	hbonds
lincs-order	noonus	8	8	8
lincs-iter		2	2	2
shake-tol		1e-9	1e-9	1e-9
nstxout	400	400	400	400
nstyout	400	400	400	400
nstenergy	40	40	40	40
buffer-tolerance	1e-9	1e-9	1e-9	1e-9
rvdw	1.5	1.5	1.5	1.5
rvdw-switch	1.4	1.4	1.4	1.4
coulombtype	pme	pme	pme	pme
rcoulomb	1.5	1.5	1.5	1.5
rcoulomb-	1.4	1.4	1.4	1.4
switch				
fourier-spacing	0.10	0.10	0.10	0.10
pme-order	6	6	6	6
ewald-rtol	1e-9	1e-9	1e-9	1e-9
	True	True	True	True
Enable				
double precision				
	Falsa	Falsa	Falsa	Falsa
-DFLEXIBLE				
Extend simulation from full- precision trajectory	False	False	False	False
			1	

	Minimize	NVT	NPT	NVE
	(vapor,fast)	(vapor,fast)	(vapor,fast)	(vapor,fast)
dt		0.002	0.002	0.002
nsteps	5000	5000	5000	5000
integrator	steep	md	md	md
gen-vel	1	yes	no	no
tcoupl		berendsen	berendsen	
ref-t		300	300	
pcoupl		no	parrinello-	
			rahman	
ref-p			1.0	
pbc	no	no	no	no
comm-mode	angular	angular	angular	angular
nstcomm	ungunu	50	50	50
nh-chain-length		10	10	
nsttcounle		-1	-1	
nstreouple		1	-1	
constraints	hbonds	all-bonds	all-bonds	all-bonds
lincs_order	noonds	4 4		
lincs_iter		1	1	1
shake tol		1	1	1
sliake-toi	100	100	100	100
nstvout	100	100	100	100
Instvout	100	100	100	100
nstenergy	10	10	10	10
buffer-tolerance	5e-3	5e-3	5e-3	5e-3
rvdw	1.0	1.0	1.0	1.0
rvdw-switch	0.9	0.9	0.9	0.9
coulombtype	cut-off	cut-off	cut-off	cut-off
rcoulomb	1.0	1.0	1.0	1.0
rcoulomb-	0.9	0.9	0.9	0.9
switch				
fourier-spacing				
pme-order				
ewald-rtol				
	False	False	False	False
Enable				
double precision				
_				
	False	False	False	False
-DFLEXIBLE				
	False	False	False	False
Extend				
simulation				
from full-				
precision				
trajectory				

	Minimize	NVT	NPT	NVE
	(vapor)	(vapor)	(vapor)	(vapor)
dt		0.0005	0.0005	0.0005
nsteps	20000	20000	20000	20000
integrator	steep	md	md	md
gen-vel		ves	no	no
tcoupl		nose-hoover	nose-hoover	
ref-t		300	300	
pcoupl		no	parrinello-	
			rahman	
ref-p			1.0	
pbc	no	no	no	no
comm-mode	angular	angular	angular	angular
nstcomm		1	1	1
nh-chain-length		1	1	
nsttcouple		1	1	
nstpcouple			1	
constraints	hbonds	hbonds	hbonds	hbonds
lincs-order		8	8	8
lincs-iter		2	2	2
shake-tol		1e-9	1e-9	1e-9
nstxout	400	400	400	400
nstvout	400	400	400	400
nstenergy	40	40	40	40
buffer-tolerance	1e-9	1e-9	1e-9	1e-9
rvdw	1.5	1.5	1.5	1.5
rvdw-switch	1.4	1.4	1.4	1.4
coulombtype	cut-off	cut-off	cut-off	cut-off
rcoulomb	1.5	1.5	1.5	1.5
rcoulomb-	1.4	1.4	1.4	1.4
switch				
fourier-spacing				
pme-order				
ewald-rtol				
	True	True	True	True
Enable				
double precision				
I I I I I I I I I I I I I I I I I I I				
	False	False	False	False
-DFLEXIBLE				
	False	False	False	False
Extend				
simulation				
from full-				
precision				
trajectory				
aujectory				
1	1	1	1	1

	Minimize (NMA)	NMA
dt		
nsteps	20000	20000
integrator	l-bfgs	nm
gen-vel		
tcoupl		
ref-t		
pcoupl		
ref-p		
pbc	yes	yes
comm-mode		
nstcomm		
nh-chain-length		
nsttcouple		
nstpcouple		
constraints	none	none
lincs-order		
lincs-iter		
shake-tol		
nstxout	400	400
nstvout	400	400
nstenergy	40	40
buffer-tolerance	1e-9	1e-9
rvdw	1.5	1.5
rvdw-switch	1.4	1.4
coulombtype	pme	pme
rcoulomb	1.5	1.5
rcoulomb-switch	1.4	1.4
fourier-spacing	0.10	0.10
pme-order	6	6
ewald-rtol	1e-9	1e-9
Enable double precision	True	True
emtol	0.01	
-DFLEXIBLE	True	True
Extend simulation from full- precision trajectory	False	True

- # of Threads スレッド並列数を指定します。
- MPI (for Remote Job) MPI 並列数を指定します。リモートジョブ投入で実行するときのみ反映されます。

Basic

**Run Control** 

dt 数値積分における1ステップの時間刻みを指定します。

nsteps 計算するステップ数の最大値を指定します。

integrator 計算アルゴリズムを指定します。

**Velocity Generation** 

gen-vel 初速度を生成するか指定します。

Fix random seed チェックを入れると gen-seed を使用します。

gen-seed 初速度の random seed を指定します。

Explicitly set gen-temp チェックを入れた場合はここで初速度の温度をしていします。入れない場合は ref-t が初速度の温度となります。

### **Temperature Coupling**

tcoupl 温度制御のアルゴリズムを選択します。

tc-grps 温度制御対象のグループを指定します(スペース区切りで複数設定可)。

ref-t 設定温度を指定します (スペース区切りで複数設定可)。

tau-t 温度制御の時定数を指定します(スペース区切りで複数設定可)。

### **Pressure Coupling**

pcoupl 圧力制御のアルゴリズムを選択します。

pcoupltype 圧力制御におけるセルの動かし方を示します。

ref-p 設定圧力を指定します。

tau-p 圧力制御の時定数を指定します。

compressibility 系全体の圧縮率を指定します。

### Advanced

**Boundary Condition** 

pbc 周期境界条件を選択します。

## **Energy Minimization**

emtol エネルギー最小化計算の収束条件である force の最大値を指定します。

emstep エネルギー最小化計算における粒子を動かすステップ幅の初期値を指定します。

### **Run Control**

comm-mode 系全体の運動量の除去方法を指定します。

nstcomm 系全体の運動量を除去する頻度を指定します。

### **Temperature/Pressure Coupling**

**nh-chain-length** Nose-Hoover 法で温度制御した際の Nose-Hoover chain の段数を指定します。

nsttcouple 温度制御の頻度を指定します。

nstpcouple 温度制御の頻度を指定します。

**refcoord-scaling** 温度制御時の position restraint の基準座標のスケーリングについて指定 します。

### Constraints

constraints 拘束条件を選択します。

constraint-algorithm 拘束アルゴリズムを選択します。

continuation 親ジョブから拘束距離を引き継ぐか指定します。

**lincs-order** LINCS 法の次数を指定します。

lincs-iter LINCS 法における反復回数を指定します。

shake-tol SHAKE 法の収束判定に用いる打ち切り誤差パラメータを指定します。

#### Misc.

print-nose-hoover-chain-variables 温度・圧力制御パラメータを子ジョブに引き継ぐ場合 に指定します。

define -DFLEXIBLE 水分子を flexible にする場合に選択します。

**define -DPOSRES** 特定分子の位置を拘束する場合に選択します。(posres.itp を include する)

Extend simulation from full-precision trajectory Extending Simulation にチェックを入れ継 続ジョブを流す際に、この項目にチェックが入っていた場合、前のジョブの trr ファイ ルからジョブを継続します。この項目にチェックが入っていなかった場合、前のジョ ブの最終状態の gro ファイルからジョブを継続します。例えば、エネルギー極小化計 算の後に基準振動解析を実行する場合には、チェックを入れる必要があります。

### Output

### **Output Control**

- nstxout 原子の座標を出力する頻度をステップ数で指定します。
- nstvout 原子の速度を出力する頻度をステップ数で指定します。
- nstenergy エネルギーなどの系全体の統計量を edr ファイル (エネルギーファイル) に出 力する頻度をステップ数で指定します。
- nstxout-compressed ファイルサイズを節約できる xtc 形式で原子の座標を出力する頻度を ステップ数で指定します。
- **compressed-x-grps** xtc 形式で出力するグループを指定します。デフォルトでは系全体が 対象となります。

### Interaction

Modify cutoff radii not to exceed L/2 チェックを入れた場合は、rlist, rvdw, rvdw-switch, rcoulomb, rcoulomb-switch が格子定数の半分を超えないように自動調整します。

### **Neighbor Searching**

nstlist neighbor list を更新する頻度を指定します。

**ns-type** neighbor list を作成する方法を指定します。

cutoff-shceme neighbor list に含める原子の選択方法を指定します。

Use buffer-tolerance neighbor list のカットオフ距離を自動設定する際のパラメータであ る、二体ポテンシャルエネルギーの打ち切り誤差を指定します。チェックを外すと rlist の値がカットオフ距離として設定されます。

**rlist** neighbor list のカットオフ距離を指定します。

#### VdW

vdwtype ファンデルワールスポテンシャルの計算手法を指定します。

- **rvdw-switch** ファンデルワールスポテンシャル計算に Switching を選択した際に、Switching が始まる距離を指定します。
- rvdw ファンデルワールスポテンシャル計算のカットオフ距離を指定します。
- DispCorr カットオフに伴うエネルギーおよび圧力の長距離補正の有無を選択します。
- vdw-modifier ファンデルワールスポテンシャルのカットオフ時の Switching/Shift などの 設定を選択します。

### Electrostatics

- coulombtype クーロンポテンシャルの計算手法を指定します。
- **rcoulomb-switch** クーロンポテンシャル計算に Switching を選択した際に、Switching が始 まる距離を指定します。
- rcoulomb クーロンポテンシャル計算の実空間カットオフ距離を指定します。
- coulomb-modifier クーロンポテンシャルのカットオフ時の Switching/Shift などの設定を 選択します。

### Ewald

- Set # of grids for fourier space チェックを入れた場合は fourier-spacing を使用します。入 れない場合は fourier-nx, ny, nz を使用します。
- **fourier-spacing** Ewald, PME または PPPM 法における波数空間のメッシュサイズを指定します。
- **fourier-nx, ny, nz** Ewald, PME または PPPM 法における波数空間のカットオフ距離または メッシュ数 (それぞれ x, y, z 成分)を指定します。
- pme-order PME 法における外挿関数の次数を指定します。

ewald-rtol Ewald, PME または PPPM 法の精度パラメータを指定します。

## Other

Other Parameters その他の設定を mdp ファイルの記述に基づき指定します。

### Automatic

Rescale velocities to.. NVE アンサンブルにおいて目標温度に系の温度を近づけたい時に使い ます。計算中の平均温度とここで入力した温度からスケーリング係数を算出して、最終構 造の各粒子の速度をスケーリングします。

Rescale box size to.. NPT アンサンブルで計算した後に、設定圧力に近い状態で NVE または NVT アンサンブルで計算した場合に使用します。最終構造を、計算中の平均セルサイズ にスケーリングします。

### Options

Make a Backup of Working Directory 作業ディレクトリのバックアップを行う際に選択します。

Restore Working Directory 継続ジョブが異常終了時など、作業ディレクトリ を実行前の状態 に戻す際にクリックします。

- **Dump .mdp File** 現在開かれているウィンドウで設定した内容で Gromacs の計算条件 (mdp) ファイルを作成し保存します。
- **Dump All Files for Remote** Gromacs を実行せず、Gromacs の計算に必要なファイルを保存だ けする機能です。本機能を利用する前に ツール → リモートジョブ投入 ウィンドウを開い てください。
- Rerun from xtc すでに終了した計算から出力されたトラジェクトリ (xtc) ファイルの構造に対し、現在開かれているウィンドウで設定して計算条件を用いてエネルギーのみを計算し、エネルギー(edr)ファイルを取得します。
- Open top file 力場を割り当て機能で生成された top ファイルをテキストエディタで開きます。
- **maxwarn** 計算続行を許容する warning message 数の最大値を指定します(0:1つ以上のメッ セージで中断)
- Verbose Output 計算中のステップを表示させる際に指定します。
- Concatenate .edr and .trr files 実行済の.edr ファイル及び.trr ファイルとファイル結合する際に クリックします。ファイル結合は Extending Simulation の後処理として実行されます。
- Unwrap Atoms (trjconv -pbc nojump) 計算結果の.gro ファイル及び.trr ファイルを周期境界で 折り返さない (unwrapped) 座標で出力します。
- Enable Double Precision 倍精度版の Gromacs のバイナリで MD 計算およびプリポスト処理を 実行します。
- **Overwrites any output file without making a backup in working directory** チェックを入れる と、作業ディレクトリの中に新しいファイルを生成する際に、同名の古いファイルがある 場合はバックアップを作成します。ディスク容量確保のため、*Make a Backup of Working Directory* にチェックが入っている場合はこの項目のチェックを外すことを推奨します。
- **Enable detailed parallelization setting** -nt によるトータルスレッド数の指定の代わりに、Thread-MPI(-ntmpi) と OpenMP(-ntomp) の並列数を個々に指定します。
- # of Thread-MPI Thread-MPI の並列数を指定します。

# of OpenMP OpenMP の並列数を指定します。

# 6.11.3 Gromacs 実行

Gromacs を実行します。状況に応じて実行方法が異なります。

- (デフォルト) Extending Simulation にチェックがなく、力場を割り当てにおいて自動でパラメータを割り当てを 座標ファイル(拡張子:gro)とトポロジファイル(拡張子:top)を新規に生成してからジョ プを開始します。
- Extending Simulation にチェックがなく、力場を割り当てにおいてトポロジファイルに書かれたパラメータを使用 メインウィンドウで開かれている座標ファイル(拡張子:gro)と、力場を割り当てで指定 したトポロジファイル(拡張子:top)を使用してジョブを開始します。
- Extending Simulation にチェックがある場合 メインウィンドウで開かれている座標ファイル(拡張子:gro)に紐づけられた作業ディレクトリの中にある座標ファイル(gmx\_mdrun\_tmp.gro)とトポロジファイル(gmx\_tmp.top)を用いてジョブを開始します。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが water.gro の時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	説明
outファイル water.out	water.sh の標準出力のテキストファイ ルです。
<b>shファイル</b> water.sh	Gromacs とそのプリ・ポスト処理を実行 するための シェルスクリプトです。
<b>batファイル</b> water.gro.bat	water.sh を実行するためのバッチファ イルです。
<b>作業ディレクトリ</b> water_gmx_tmp\	作業ディレクトリです。

作業ディレクトリには以下のファイルが生成されます。ここでは主要なファイルのみ示しています。

種類	前明
input.gro	新規ジョブの場合は、実行時に指定した gro ファイルが コピーされたものです。 継続ジョブの場合は、前のジョブのファ イルとなります。
gmx_tmp.top	新規ジョブの場合は、実行時に指定した top ファイルが コピーされたものです。 継続ジョブの場合は、前のジョブのファ イルとなります。
gmx_tmp.mdp	計算条件を指定するファイルです。
gmx_tmp_mdrun.tpr	gro, top, mdp ファイルから生成する mdrun の入力ファイルです。
gmx_tmp_mdrun.ndx	結果処理のためのインデックスファイル です。
gmx_tmp_mdrun.edr	温度・圧力・エネルギー等が納められた エネルギーファイルです。
gmx_tmp_mdrun.gro	最終構造の gro ファイルです。
gmx_tmp_mdrun.trr	トラジェクトリファイルです。
gmx_tmp_mdrun.xtc	圧縮されたトラジェクトリファイルです。
gmx_tmp_mdrun.log	mdrun のログファイルです。
- 作業ディレクトリとは、メインウィンドウで開かれているファイルの名前に接尾辞 を加えた名前のフォルダです。
  - 接尾辞はソルバの種類により変わります。
  - 例えば Gromacs の場合は、メインウィンドウで開かれているファイルが aaa.gro で、接尾辞が \_gmx\_tmp の場合、作業ディレクトリの名前は aaa\_gmx\_tmp と なります。
- メインウィンドウで開かれているファイルと同じ階層に置かれている必要があります。
- 継続ジョブの時も同名の作業ディレクトリで処理が流れますが、デフォルトでは継続ジョブの実施直前に、直前のジョブの作業ディレクトリのバックアップが作成されます。
  - バックアップの名前は、重複する名前が存在しない範囲で一番小さい番号が付 いたものになります。例えば、作業ディレクトリが aaa\_gmx\_tmp のときは aaa\_gmx\_tmp1 となります。
  - 番号が付いていないディレクトリが常に最新のものとなります。

ジョブは Winmostar Job Manager を通じて実行されます。

## 6.11.4 ログを表示 (log)

gmx mdrun のログファイル(\*\_gmx\_tmp\gmx\_tmp\_mdrun.log)をテキストエディタで開きます。

## 6.11.5 標準出力を表示

Gromacs 実行時のシェルスクリプトの標準出力(\*.out)をテキストエディタで開きます。

## **6.11.6** アニメーション

gro ファイルと trr ファイルを選択し、MD 計算のトラジェクトリをアニメーション表示します。 メインウィンドウのファイル名は変化しません。

アニメーション表示の操作方法はAnimation ウィンドウを参照してください。

# 6.11.7 エネルギー変化

Gromacs が出力した edr ファイルを選択し、エネルギー、温度、圧力などの各種熱力学量のグラフ を表示します。内部的には gmx energy コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx energy のマ ニュアルをご確認ください。

サブウィンドウの操作方法は Energy Plot ウィンドウ を参照してください。

## 6.11.8 最終構造を読み込み

\*\_gmx\_tmp\gmx\_tmp\_mdrun.gro を開きます。

本機能を使うとメインウィンドウのファイル名は変化しません。

# 6.11.9 連続ジョブ設定

Gromacs を連続実行するための設定を行います。プリセット以外の設定で実行したい場合は、あらかじめ実行したい計算条件を キーワード設定 にて入力し Save ボタンで gmxset 形式で保存してください。

## 6.11.10 連続ジョブ実行

連続ジョブ設定の内容に基づき Gromacsを連続実行します。

# 6.11.11 結果解析

### 動径分布関数

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、動径分布関数を表示します。内部的には gmx rdf コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx rdf のマニュアルをご確認ください。動径分布関数は *Reference Group と Target Group* の間でを計算されます。

### Definition

Atom 計算対象を原子座標にします。

Center of geometry 計算対象を分子の幾何平均座標にします。

Center of mass 計算対象を分子の重心位置にします。

#### Output

RDF 動径分布関数を計算します。

Cumulative Number RDF 積算配位数を計算します。

- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target Group* と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow グループを ndx ファイルに追加 を使用してください。$ 

*Create Group* ウィンドウでは、*Extracted Atom Names* にチェックを入れて *New group Name* を入力し *Create* ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。*Close* ボタンを押す と *Target Group* や *Reference Group* に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

自己拡散係数/平均二乗变位

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、平均二乗変位と自己拡散係数を表示します。内 部的には gmx msd コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx msd のマニュアルをご確認くだ さい。

- Diffusion Constant gmx msd コマンドを使用して時間-平均二乗変位のグラフの傾きから計算され た自己拡散係数を表示します。
- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target Group* と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は *MD* → *Gromacs* → グループを *ndx* ファイルに追加 を使用してください。

*Create Group* ウィンドウでは、*Extracted Atom Names* にチェックを入れて *New group Name* を入力し *Create* ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。*Close* ボタンを押す と *Target Group* や *Reference Group* に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 散乱関数

- Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、散乱関数を表示します。内部的には gmx saxs コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx saxs のマニュアルをご確認ください。
- Interval 散乱関数の計算に用いるスナップショットを取得する間隔を指定します。小さくしすぎる と膨大な計算が必要となるため注意が必要です。
- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target Group* と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は *MD* → *Gromacs* → グループを *ndx* ファイルに追加 を使用してください。

*Create Group* ウィンドウでは、*Extracted Atom Names* にチェックを入れて *New group Name* を入力し *Create* ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。*Close* ボタンを押す と *Target Group* や *Reference Group* に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 速度相関/振動スペクトル

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、速度相関関数および振動スペクトルを表示しま す。内部的には gmx velacc コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx velacc のマニュアルを ご確認ください。

Velocity Autocorrelation 速度相関関数を出力します。

Vibration Spectrum 振動スペクトルを出力します。

Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。

**Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target* Group と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow$ グループを ndx ファイルに追加 を使用してください。

*Create Group* ウィンドウでは、*Extracted Atom Names* にチェックを入れて *New group Name* を入力し *Create* ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。*Close* ボタンを押す と *Target Group* や *Reference Group* に追加したグループが追加されます。

- First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。
- Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 比誘電率/双極子モーメント

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、比誘電率または双極子モーメントの分布・ヒス トグラムを表示します。内部的には gmx dipoles コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx dipoles のマニュアルをご確認ください。

Dielectric constant 比誘電率をプロットします。グラフ中の最終時刻における epsilon の値が、その 計算から得られた比誘電率となります。グラフの下にはその値が出力されます。

- Histogram of total dipole moment Target Group に所属する分子の双極子モーメントの分布をプロットします。
- Autocorrelation functino of dipole moment 双極子モーメントの自己相関関数をプロットします。双 極子モーメントの定義は Definition で選択します。
- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target* Group と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow グループを ndx$ ファイルに追加を使用してください。

Create Group ウィンドウでは、 Extracted Atom Names にチェックを入れて New group Name を入力し Create ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。 Close ボタンを押す と Target Group や Reference Group に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

粘度

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、粘度を表示します。内部的には gmx tcaf コ マンドが実行されます。詳細な挙動は gmx tcaf のマニュアルをご確認ください。

- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target Group* と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow グループを ndx ファイルに追加 を使用してください。$ 

*Create Group* ウィンドウでは、*Extracted Atom Names* にチェックを入れて *New group Name* を入力し *Create* ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。*Close* ボタンを押す と *Target Group* や *Reference Group* に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 密度分布

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、密度分布を表示します。内部的には gmx density コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx density のマニュアルをご確認ください。

Group ここでチェックを入れた成分について密度分布が出力されます。

- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target Group* と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow グループを ndx ファイルに追加 を使用してください。$ 

*Create Group* ウィンドウでは、*Extracted Atom Names* にチェックを入れて *New group Name* を入力し *Create* ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。*Close* ボタンを押す と *Target Group* や *Reference Group* に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

### 自由体積

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、密度分布を表示します。内部的には gmx freevolume コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx freevolume のマニュアルをご確認く ださい。

Radius of probe 自由体積算出時に系にランダムに挿入される仮想プローブ粒子の半径を指定します。

# of probe insertions 仮想プローブ粒子の挿入回数を指定します。

Random seed 仮想プローブ粒子を挿入する位置を決める乱数の種を指定します。

- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target* Group と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow グループを ndx ファイルに追加 を使用してください。$ 

Create Group ウィンドウでは、 Extracted Atom Names にチェックを入れて New group Name を入力し Create ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。 Close ボタンを押す と Target Group や Reference Group に追加したグループが追加されます。

- First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。
- Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### Hildebrand 溶解度パラメータ

Gromacs が出力した edr, gro ファイルから、Hildebrand 溶解度パラメータを算出します。気相と液 相それぞれの計算結果が必要です。Hildebrand 溶解度パラメータの算出に必要な凝集エネルギー、 密度(比体積) 圧縮率の取得には、gmx energy コマンドが実行されます。

χ/**DPD** パラメータ

Gromacs が出力した edr, gro ファイルから、 $\chi$ パラメータ・DPD aij パラメータを算出します。2 つの成分の気相と液相それぞれの計算結果が必要です。内部的には *Hildebrand* 溶解度パラメータ で計算した値を用います。

距離/角度/二面角分布

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、選択グループ間の距離、角度、または二面角の分布を表示します。内部的には gmx distance コマンド(距離)または gmx angle コマンド(角度、二面角)が実行されます。詳細な挙動は gmx distance、 gmx angle のマニュアルをご確認ください。

- **Type** プロットする値の種類 (bond, angle, dihedral, improper または ryckaert-bellmemans)を選択します。
- Calculate for marked atoms メインウィンドウでマーカーが付いた原子間で距離、角度、または二 面角を計算します。
- **Calculate for target group** Target Group で選択した ndx ファイルを使用して距離、角度、または二 面角を計算します。

**Calculate for** 選択した angletype または dihedraltype に関して角度または二面角を計算します。

- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target Group* と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow グループを ndx ファイルに追加 を使用してください。$ 

Create Group ウィンドウでは、 Extracted Atom Names にチェックを入れて New group Name を 入力し Create ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。Close ボタンを押す と Target Group や Reference Group に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

### RMSD

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、RMSD(主にタンパク向け)を表示します。内 部的には gmx rms コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx rms のマニュアルをご確認くだ さい。

Group ここでチェックを入れた成分について結果が出力されます。通常は Backbone を選択します。

- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target Group* と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow グループを ndx ファイルに追加 を使用してください。$ 

Create Group ウィンドウでは、 Extracted Atom Names にチェックを入れて New group Name を入力し Create ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。 Close ボタンを押す と Target Group や Reference Group に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

慣性半径

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、回転半径(主にタンパク向け)を表示します。 内部的には gmx gyrate コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx gyrate のマニュアルをご確 認ください。

Group ここでチェックを入れた成分について結果が出力されます。通常は Backbone を選択します。

- Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。
- **Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target* Group と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow$ グループを ndx ファイルに追加 を使用してください。

*Create Group* ウィンドウでは、*Extracted Atom Names* にチェックを入れて *New group Name* を入力し *Create* ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。*Close* ボタンを押す と *Target Group* や *Reference Group* に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

### Ramachandran プロット

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、各アミノ酸残基の Ramachandran プロットを表示します。内部的には gmx rama コマンドが実行されます。詳細な挙動は gmx rama のマニュアル をご確認ください。

Residue ここで選択した残基の Ramachandran プロットが出力されます。

Target Group ここで選択したグループに属する分子・原子に対して物理量を計算します。開いた ndx ファイルに書かれているグループがここで選択可能です。

**Reference Group** 動径分布関数などの原子対について計算する物理量の場合だけ出現します。*Target Group* と *Reference Group* の間で物理量が計算されます。

Create Group gro ファイルに書かれている原子名から新たなグループを登録します。

メインウィンドウでグループ選択されている原子をグループとして定義する場合は  $MD \rightarrow Gromacs \rightarrow$ グループを ndx ファイルに追加 を使用してください。

*Create Group* ウィンドウでは、*Extracted Atom Names* にチェックを入れて *New group Name* を入力し *Create* ボタンを押すと、ndx ファイルにグループが追加されます。*Close* ボタンを押す と *Target Group* や *Reference Group* に追加したグループが追加されます。

First Frame トラジェクトリを読み込む際の開始時間を ps 単位で指定します。

Last Frame トラジェクトリを読み込む際の終端時間を ps 単位で指定します。 Maximum にチェックが入った場合は、最終フレームが指定されます。

Draw 結果解析用プログラムを実行してグラフを表示します。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

# 6.11.12 トラジェクトリを編集

Gromacs が出力した trr または xtc ファイルのトラジェクトリデータについて、間引き、回転、空間 分布関数の算出などの操作を行います。内部的には gmx trjconv コマンドが実行されます。詳細 な挙動は gmx trjconv のマニュアルをご確認ください。*Execute* ボタンで処理を開始します。

Output interval トラジェクトリを間引いて何フレームごとに出力するか指定します。

**Postprocess** 処理後の動作を指定します。 *Spatial distribution function* を選択した場合は gmx spatial を使います。

Target group 出力するグループを指定します。

**Rotate and Trans** *Reference group* で指定したグループが固定されるよう:guilabel:*Target group* で指定したグループを回転・並進移動させます。

**Reference group** *Roate and Trans* における refernce を指定します。

**Group for SDF** *Postprocess* にて *Spatial distribution function* (SDF) を選択した際に計算される SDF をどのグループに対し計算するか指定します。

# 6.11.13 ER 法実行

エネルギー表示 (ER) 法を使用して溶媒和自由エネルギーを計算します。

- 1. 事前に以下 3 つ系の計算を Gromacs で実行し、それぞれの作業ディレクトリを残しておきま す。エネルギー最小化などの平衡化を終えた後の、平衡状態のデータのみ使用します。
  - A. Solution system (溶質分子1個+溶媒分子多数)
  - B. Solvent system (溶媒分子多数)
  - C. Solute system (溶質分子1個)
- 2. *Solution* タブで A. Solution system の作業ディレクトリをドラッグアンドドロップします。また は、xtc, log, top ファイルそれぞれの欄で... ボタンを押して個々のファイルを読み込みます。
- 3. 同様に Solvent タブで B. Solvent system のファイルを選択します。
- 同様に Solute タブで C. Solute system のファイルを選択します。xtc ファイルを指定した場合 は、溶質がフレキシブルモデル、pdb または gro ファイルを指定した場合は、剛体モデルとし て扱われます。
- 5. Solute Name において溶質の分子名を選択します。

- 6. 必要に応じて、 Options ボタンから自由エネルギー計算時の MPI 並列数など指定します。
- 7. 自由エネルギー計算をローカル環境で実施する場合は *Start* ボタンを押します。結果を出力するフォルダを指定すると計算が始まります。Cygwin 上で ermod が流れます。
- 8. リモート環境で実施する場合は一旦 *Close* ボタンを押します。そして リモートジョブ にて *Program* に ermod を指定し実行します。リモートサーバ上では、 ermod および slvfe コマ ンドに \$PATH が通っている必要があります。(リモートサーバへの ERmod のインストールは こちら を参照)計算が終わり、 リモートジョブ で get ボタンを押すと、 winmostar.exe が置かれたフォルダ以下に ermod\_remote\_\* というフォルダが生成され、結果がリモート サーバから転送されます。
- 9. 自由エネルギー計算終了後、結果の表示するには ER 法結果読み込み メニューを選択します。

ヒント: Winmostar ではサポートされていない ERmod の機能を用いて解析を行う場合は、以下の 手順で解析することも可能です。

- 1. まずは、溶液、溶媒のみ、溶質のみの MD を Winmostar で計算します。それらの手順は、ER 法を用いたチュートリアルを参考にしてください。
- ERmod 公式 HP の Quick Start Guide の「Generate input configuration for running ermod」以降 の手順に従って操作をします。Winmostar の [ツール]-[Cygwin] をクリックすると、Cygwin の ターミナルが起動し、そこでは Gromacs, ERmod 等のインストールが完了しています。手順中の 「(ERmod directory)」は Cygwin 上では /usr/local/ermod となります。 etohsolution. top は溶液の計算開始時に保存された top ファイルとなります。 solution\_run.xtc や solution\_run.log などの xtc, log ファイルは、それぞれ溶液、溶媒のみ、溶質のみの MD の working directory に収められているものをご使用ください。

# 6.11.14 ER 法結果読み込み

ER 法実行 にて処理した結果を表示します。選択後、 ER 法実行 にて指定した出力先フォルダを指定してください。 Unit にてエネルギーを表示する際の単位を指定できます。 Log ボタンを押すと、 ERmod のログファイルを表示します。

# 6.11.15 BAR 法実行

Bennett Acceptance Ratio(BAR)法を使用して溶媒和自由エネルギーを計算します。

- 1. Gromacs を用いて溶液系(溶質分子1個+溶媒分子多数)の計算を実施します。平衡化の各ス テップおよび平衡状態の計算の全ての作業ディレクトリを残しておきます。
- 2. BAR法実行を選択します。
- Integration Path タブにて、溶質が溶媒と相互作用していない状態(λ=0)から相互作用してい る状態(λ=1, Full Coupling)をどのような経路で積分するか指定します。 Insert ボタン左の2 つの欄にファンデルワールスポテンシャルのカップリング係数(左)とクーロンポテンシャル のカップリング係数(右)を入力し Insert を押すと、積分経路が追加されます。 Delete を押す ことで、積分経路を削除できます。
- 4. Procedure タブにて、積分経路上の各状態のシミュレーション手順を指定します。あらかじめ 用意した溶液系(λ=1)の平衡化の手順を、フォルダ単位で指定します。Add ボタンまたはリ ストへのドラッグアンドドロップで、フォルダを追加します。Delete ボタンでフォルダを削除 します。リストの最後の手順で実施された計算が、自由エネルギー計算に用いられます。
- 5. *Start* を押すと、各 $\lambda$ の MD 計算が実行されます。

6. 各 λ の MD 計算の終了後、結果の表示するには BAR 法結果読み込み を選択します。

### 6.11.16 BAR 法結果読み込み

BAR 法実行 にて処理した結果を表示します。メニュー選択後、BAR 法実行 にて指定した出力先フォ ルダを指定してください。

バックグラウンドで gmx bar が実行され、結果が表示されます。詳細な挙動は gmx bar のマニュ アルをご確認ください。

Unit にてエネルギーを表示する際の単位を指定できます。 Log ボタンを押すと、 gmx bar のログファイルが表示されます。表示されるグラフは、溶質が溶媒と相互作用していない状態( $\lambda$ =0)から相互作用している状態( $\lambda$ =1)の間で自由エネルギーが変化する様子を示しています。

# **6.12** $MD \rightarrow LAMMPS \checkmark \exists \exists \neg \neg$

LAMMPS に関するメニューです。

LAMMPS をインストールする方法は インストール に記載しています。

### 6.12.1 力場を割り当て

力場を設定します。ソルバの種類に応じて、選択肢が変化します。

自動で割り当てられるパラメータをテキストファイル上で編集してから計算したい場合は、まず自動でパラ メータを割り当てで一旦パラメータを割り当て、その後のキーワード設定ウィンドウの Options タブで Dump all files for remote をクリックしファイルを保存してください。その後、そのファイルを編集し、編集後のファ イルを Winmostar で開いてください。そして、再度力場を割り当て機能を起動し、トポロジファイルに書か れたパラメータを使用または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を選択してください。

自動でパラメータを割り当て 新たに力場パラメータを割り当てます。

- (一般) タンパク質、水分子以外の分子の力場を指定します。内部では、GAFF, GAFF2, OPLS/AA-L+GAFF の場合は acpype、 Dreiding の場合は内製プログラム、UFF の場合は OpenBabel を独自に拡張し たプログラムが使用されます。Dreiding の設定は polymer/dreiding.lib.txt に書かれていま す。UFF の詳細は Universal Force Field を確認してください。
  - Exception 特定の分子に対し、(General) にて選択した力場を使わず、ユーザが指定する LJ パラメー タを割り当てます。サブウィンドウの左の欄にて LJ パラメータを指定したい分子にチェックを 入れ、右の欄で LJ パラメータを入力します。

注釈: 例えば固液界面系において固相の原子に LJ パラメータを割り振りたい時などに使用します。

(タンパク質/イオン)タンパク質、単原子の力場を指定します。ここで、PDBやgroフォーマットにおいてアミノ酸残基の名前が割り当てられている原子がタンパク質として認識されます。内部的にはgmx pdb2gmxが使用されます。

警告:残基名を含まないファイルから分子構造を読み込んだ場合は本機能を使用できません。

- (水分子)水分子の力場を指定します。 溶媒を配置/セルを構築 で選択した水モデルを指定する必要があり ます。内部的には Cygwin にインストールされた Gromacs のトポロジのライブラリからパラメータ を取得します。
- タンパク質向けに [position\_restraints] を追加 タンパク質が存在する場合は Advanced タブにおける -POSRES で位置を拘束するための情報([position\_restraints] セクション)をトポロジファ イルに書き込みます。タンパク質が存在しない場合は無視されます。
- 選択原子向けに [position\_restraints] を追加 ユーザが指定する分子に対し、 Advanced タブにおける -POSRES で位置を拘束するための情報([position\_restraints] セクション)をトポロジファ イルに書き込みます。例えば固液界面系に於いて固相を固定する場合などに使用します。
- 選択原子向けに [distance/angle/dihedral\_restraints] を追加 ユーザが指定する分子に対し、 Advanced タ プにおける -POSRES で距離・角度・二面角を拘束するための情報をトポロジファイルに書き込み ます。

Dump Now 現在の設定に基づき、力場が割り当てられたファイルを生成します。

#### 注釈:

- 力場の情報をテキストエディタ等で編集してカスタマイズしたい場合は、まず本機能を使用してファ イルを保存し、Gromacsの場合は top、LAMMPSの場合は data ファイルをテキストエディタ等で編 集してください。
- 次に、Gromacsの場合は、トポロジファイルに書かれたパラメータを使用を選択して OK ボタン をクリックしてください。そして、topファイルの場所を聞かれるので、先ほど保存・編集した top ファイルを開いてください。
- LAMMPS の場合は、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を選択し Next > ボ タンをクリックしてください。そして、力場の種類を選択してください と出るので、使用する汎用 力場の種類を選択して OK ボタンをクリックしてください。
- 電荷はメインウィンドウに表示されている構造から取得されます。メインウィンドウに複数種類の電荷が設定されている場合は(例えばGAMESSのログファイルを開き Mulliken 電荷と Lowdin 電荷が設定されている場合など)(高優先)User 電荷 > NBO 電荷 > Lowdin 電荷 > ESP 電荷 > Mulliken 電荷(低優先)の順番に優先され使用されます。
- パラメータファイルを使用(無機物、ReaxFF、DPD向け)(LAMMPS向け)無機物用ポテンシャル、ReaxFF または DPDを使用したい場合に選択します。 Next > ボタンを押した後に、実際に使用する力場の種類を 指定します。
- トポロジファイルに書かれたパラメータを使用 (Gromacs向け)既に存在している top ファイルを用いて MD 計算を実行する場合に選択します。メインウィンドウには対応する gro ファイルを開いておく必要があり ます。
- 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 (LAMMPS 向け)既に存在している data ファイル を用いて MD 計算を実行する場合に選択します。メインウィンドウには使用する data ファイルを開いて おく必要があります。 Next > ボタンを押した後に、使用する力場の種類を指定します。

## 6.12.2 キーワード設定

LAMMPSの計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は*Run*ボタン、一旦メインウィンドウに戻る場合はOKボタンを押してください。

Run をクリックしたときの挙動は LAMMPS 実行 を参照してください。

電荷が割り当てられていない分子がある場合は、 自動で電荷を割り当て が自動で立ち上がります。 力場が割り当てられていない場合は、 力場を割り当て が自動で立ち上がります。 *Reset* ボタンでデフォルトの状態に戻ります。*Save* ボタンで Force Field を除く設定を保存します。 *Load* ボタンで *Save* にて保存した設定を読み込みます。

## Extending Simulation 継続ジョブを実行します。

詳細はLAMMPS 実行を参照してください。

Preset 計算条件のプリセットを指定します。各プリセットは以下のキーワードを変更します。

	Minimize	NVT	NPT	NVE
	(fast)	(fast)	(fast)	(fast)
				· · ·
Pair style	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long	lj/cut/coul/long
Time step		2.0	2.0	2.0
# of time steps	5000	5000	5000	5000
Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
		True	False	False
Generate				
initial velocity				
Temperature		300	300	
Pressure			1.0	
Boundary Con-	ррр	ррр	ррр	ррр
dition				
Reset COM mo-	linear	linear	linear	linear
tion				
Tchain		3	3	
Pchain			3	
Shake tolerance		1e-5	1e-5	1e-5
	100	100	100	100
Dump interval				
(dump)				
(dump)				
	100	100	100	100
<b>D</b>				
Dump interval				
(xtc)				
L	10	10	10	10
Cutoff (udW)	10	10	10	10
	10.	10.	10.	10.
Cutoff	10	10	10	10
(Coulomb)	10.	10.	10.	10.
PPPM order	4	4	4	4
K-space accu-	1e-5	1e-5	1e-5	1e-5
racy				

	Minimize	NVT	NPT	NVE
Doir style	li/out/coul/long	li/out/coul/long	li/out/coul/long	li/out/coul/long
Time step	IJ/Cut/Coul/Iolig			
# of time stops	20000	20000	20000	20000
# of time steps	20000	20000	20000	20000
Eliseindie	mmmze	True	IIpt Falsa	The Felse
		Irue	Faise	False
Generate				
initial velocity				
Temperature		300	300	
Pressure			1.0	
Boundary Con-	ррр	ррр	ррр	ррр
dition				
Reset COM mo-	linear	linear	linear	linear
tion				
Tchain		1	1	
Pchain			1	
Shake tolerance		1e-9	1e-9	1e-9
	400	400	400	400
D 1				
Dump interval				
(dump)				
	100	100	100	100
	400	400	400	400
Dump interval				
(xtc)				
(Atte)				
Log interval	40	40	40	40
Cutoff (vdW)				
	15.	15.	15.	15.
Cutoff	15.	15.	15.	15.
(Coulomb)	101	101		101
PPPM order				
K-space accu-				
racy				

	Minimize (vapor,fast)	NVT (vapor,fast)	NPT (vapor,fast)	NVE (vapor,fast)
Pair style	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut
Time step		2.0	2.0	2.0
# of time steps	5000	5000	5000	5000
Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
		True	False	False
Generate initial velocity				
Temperature		300	300	
Pressure		500	10	
Roundary Con	fff	fff	1.0 fff	fff
dition				111
Reset COM mo-	angular	angular	angular	angular
Tahain		2	2	
I chain Dahain		3	3	
Penalin Shalva talaranga		1.5	3 125	1.5
Shake tolerance	100	100	100	100
	100	100	100	100
Dump interval				
(dump)				
	100	100	100	100
Dump interval				
(vtc)				
(AC)				
Log interval	10	10	10	10
Cutoff (vdW)	10	10	10	10
	10.	10.	10.	10.
Cutoff				
(Coulomb)	10.	10.	10.	10.
(Couloind)				
PPPM order				
K-space accu-				
racy				

Minimize (vapor)NVT (vapor)NPT (vapor)NVE (vapor)Pair stylelj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutTime step0.50.50.5# of time steps200002000020000EnsembleminimizenvtnptminimizenvtnptnveGenerate initial velocityImage: State St					
Image: step(vapor)(vapor)(vapor)(vapor)(vapor)Pair stylelj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutTime step0.50.50.50.5# of time steps20000200002000020000EnsembleminimizenvtnptnveTrueFalseFalseFalseGenerate initial velocity		Minimize	NVT	NPT	NVE
Pair stylelj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutTime step0.50.50.5# of time steps200002000020000EnsembleminimizenvtnptminimizenvtnptTrueFalseFalseGenerate initial velocity300300Pressure1.0Boundary Con- ditionff fff fff fff fff fff f1Pchain1Pchain1Shake tolerance1e-9400400Dump interval (xtc)400Log. interval (xtc)40Log. interval (xtc)40		(vapor)	(vapor)	(vapor)	(vapor)
Pair stylelj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutlj/cut/coul/cutTime step0.50.50.50.5# of time steps20000200002000020000EnsembleminimizenvtnptnveGeneratenuminizeNumeFalseFalseinitial velocity300300		(1400)	(tapel)	(tapel)	(rapol)
Time step $0.5$ $0.5$ $0.5$ $0.5$ # of time steps20000200002000020000EnsembleminimizenvtnptnveGenerate initial velocityTrueFalseFalseTemperature300300300Pressure1.01Boundary Conditionf f ff f fditionangularangularangularreset COM motion11The state11Prebain11Shake tolerance1e-91e-9400400400400Dump interval (xtc)400400400Log interval (xtc)404040	Pair style	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut	lj/cut/coul/cut
# of time steps200020002000020000EnsembleminimizenvtnptnveTrueFalseFalseFalseGenerate initial velocity300300 $\cdot$ Temperature300300 $\cdot$ Pressure1.0 $\cdot$ Boundary Conditionff fff fditionangularangularangularangularangularTchain1 $\cdot$ Shake tolerance1e-91e-9Ump interval (dump)400400400Dump interval 400400400Lag-integral404040	Time step		0.5	0.5	0.5
EnsembleminimizenvtnptnveGenerate initial velocityTrueFalseFalseGenerate initial velocity300300-Temperature300300-Pressure1.010Boundary Con- ditionff fff fReset COM mo- 	# of time steps	20000	20000	20000	20000
Generate initial velocityTrueFalseFalseGenerate initial velocity300300-Temperature300300-Pressure1.0-Boundary Con- ditionff fff fReset COM mo- tionangularangularangularReset COM mo- tionangularangularangularReset COM mo- tion11-Pchain11-Shake tolerance1e-91e-9400400400400Dump interval (dump)400400400Log interval (xtc)400400400	Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
Generate initial velocityImage: Second seco			True	False	False
Initial velocity300300Temperature300300Pressure1.0Boundary Conditionff fff fff fff fff ffillangularangularangularangularangularangularangularCommon1Pchain1Shake tolerance1e-9400400Dump interval (dump)400400400Auto <td>Generate</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	Generate				
Initial velocity300300Temperature300300Pressure1.0Boundary Con- ditionff fff fff fff fff fReset COM mo- tionangularangularangularangularangularangular1Pchain1Shake tolerance1e-9400400Dump interval (dump)400400400Log interval (xtc)404040Log interval40	initial velocity				
Temperature300300Pressure1.0Boundary Conditionff fff fff fff fff fReset COM motionangularangularangularangularangularangular1Pchain1Shake tolerance1e-9400400Dump interval (xtc)400400400Log interval (xtc)40	Initial velocity				
Pressure1.0Boundary Con- ditionff fff fff fReset COM mo- tionangularangularangularReset COM mo- tionangularangularangularTchain11Pchain11Shake tolerance1e-91e-9400400400400Dump interval (dump)400400400Dump interval 400400400Log interval (xtc)404040	Temperature		300	300	
Boundary Conditionff fff fff fff fditionangularangularangularangularReset COM motionangularangularangularangularTchain111Pchain111Shake tolerance1e-91e-91e-9400400400400400Dump interval (dump)400400400400Dump interval 400400400400	Pressure			1.0	
ditionImage: constraint of the sector COM mo- tionangularangularangularangularTchain111Pchain111Shake tolerance1e-91e-91e-9400400400400400Dump interval (dump)400400400400Dump interval (xtc)400400400400	Boundary Con-	fff	fff	fff	fff
Reset COM mo- tionangularangularangularangularTchain11Pchain11Shake tolerance1e-91e-9400400400Dump interval (dump)400400400400400Log interval (xtc)4040	dition				
tionImage: second	Reset COM mo-	angular	angular	angular	angular
Tchain11Pchain11Shake tolerance1e-91e-9400400400Dump interval (dump)400400400400400Dump interval (xtc)400400Log interval (xtc)4040	tion	_			
Pchain1Shake tolerance1e-91e-9400400400Dump interval (dump)400400400400400Dump interval (xtc)400400Log interval (xtc)4040	Tchain		1	1	
Shake tolerance1e-91e-91e-9400400400400Dump interval (dump)400400400Dump interval (xtc)400400400Log interval (xtc)404040	Pchain			1	
400400400400Dump interval (dump)400400400Dump interval (xtc)400400400Log interval (xtc)404040	Shake tolerance		1e-9	1e-9	1e-9
Dump interval (dump)400400400Dump interval (xtc)400400400		400	400	400	400
Dump interval (dump)400400400Dump interval (xtc)400400400	Dump interval				
(dump)400400400Dump interval (xtc)400400400	(dump)				
400400400400Dump interval (xtc)40400400	(dump)				
Dump interval (xtc)     40     40     40		400	400	400	400
Dump interval (xtc)     40     40					100
(xtc) 40 40 40	Dump interval				
Log interval 40 40 40	(xtc)				
1  or interval $10$ $10$ $10$					
Log interval 40 40 40 40	Log interval	40	40	40	40
Cutoff (vdW) 15. 15. 15. 15.	Cutoff (vdW)	15.	15.	15.	15.
Cutoff 15 15 15	Cutoff	15	15	15	15
(Coulomb) 15. 15. 15. 15.	(Coulomb)	15.	15.	15.	15.
PDPM order 6 6 6	DDDM order	6	6	6	6
FFFW Oluci         0         0         0         0           K space         accu         1a.0         1a.0         1a.0         1a.0			0 1a 0	0 1a 0	
racy 10-9 10-9 10-9 10-9	racy	10-9	10-9	10-9	10-9

	Minimize	NVT	NPT	NVF
	(BeaxEE)	(BeaxEE)	(BeaxEE)	(BeaxEE)
				(IICaxII)
Pair style	reax/c	reax/c	reax/c	reax/c
Time step		0.5	0.5	0.5
# of time steps	20000	20000	20000	20000
Ensemble	minimize	nvt	npt	nve
		True	False	False
Generate				
initial velocity				
mininar verocity				
Temperature		300	300	
Pressure			1.0	
Boundary Con-	ррр	ррр	ррр	ррр
dition				
Reset COM mo-	linear	linear	linear	linear
tion				
Tchain		1	1	
Pchain			1	
Shake tolerance		1e-9	1e-9	1e-9
	400	400	400	400
Dumn interval				
(dump)				
(dump)				
	400	400	400	400
	+00	+00	400	400
Dump interval				
(xtc)				
Log interval	40	40	40	40
Cutoff (vdW)	15	15	15	15
	15.	15.	15.	15.
Cutoff				
(Coulomb)	15.	15.	15.	15.
PPPM order				
K-space accu-				
racy				

**MPI** MPI 並列数を指定します。

Basic

Units 単位系を指定します。

real 主に分子系で指定します (A, fs, Kcal/mol)。

metal 主に結晶系で指定します (A, ps, eV)。

lj 主に DPD 計算で指定します (無次元単位)。

Atom Style 計算する系の種類を指定します。 Units に応じて変化します。

Pair Style 相互作用計算の方法を選択します。

Force Field/Potential File Units が real の場合には、力場の種類を指定します。special\_bonds, bond\_style, angle\_style, dihedral\_style, improper\_style キーワードに影響します。

*Units* が real 以外の場合には、ポテンシャルファイルを選択します。LAMMPS 本体をイン ストールしたフォルダ直下の Potential フォルダ内のファイルをリストアップします。 選択肢は *Units* および *Pair Style* に応じて変わります。

Time Step 時間積分の刻み幅を指定します。単位は選択した Unit により変わります。

# of Time Steps 時間積分ステップの最大数を指定します。

**Ensemble** 時間積分の種類を指定します。 nvt (温度一定のカノニカルアンサンブル), npt (温度、圧力一定のアンサンブル), nve (体積とエネルギー一定のミクロカノニカルアン サンブル), minimize (CG 法によるエネルギー最小化)のいずれかを選択します。

Generate Velocity チェックをした場合は初速度が与えられます。

Random Seed 初速度発生時の擬似乱数の種を指定します。

Temperature 目標温度を指定します。アニーリング計算時には始状態の温度を指定します。

Tdamp 温度制御の時定数パラメータを指定します。

Pressure Control 圧力制御の際のセルの動かし方を指定します。

Pressure 目標圧力を指定します。

Pdamp 圧力制御の時定数パラメータを指定します。

Advanced

Boundary X Y Z 周期境界条件を指定します。 p (periodic), f (non-periodic and fixed), s (non-periodic and shrink-wrapped), m (non-periodic and shrink-wrapped with a minimum value)のいずれかを選択します。

Energy Tolerance minimize 計算時のエネルギーに関する打ち切り誤差を指定します。

Force Tolerance minimize 計算時の力に関する打ち切り誤差を指定します。

Reset COM Motion MD 計算時に系全体の重心の運動を凍結する方法を選びます。

Reset Interval Reset COM Motion の頻度をタイムステップで指定します

Tchain Nose-Hoover chain の段数を指定します。

Pchain 圧力制御の段数を指定します。

Constrain hydrogen atoms 水素原子を SHAKE 法で拘束します。

SHAKE tolerance SHAKE 法の打ち切り誤差を指定します。

Automatically disable Shake if CH4-like molecule exists メタン状の分子が含まれている時に 自動で SHAKE 法を無効にします。

Calculate as rigid body 分子を剛体として扱います。

Set "box tilt large" シミュレーションセルの変形の許容度合を指定します。

Output

Dump Interval (dump) dump 形式で座標を出力する頻度をタイムステップ数で指定します。

Dump Interval (xtc) xtc 形式で座標を出力する頻度をタイムステップ数で指定します。

Dump Interval (xyz) xyz 形式で座標を出力する頻度をタイムステップ数で指定します。

Log Interval log ファイルにエネルギー変数を書き出す頻度をタイムステップ数で指定します。

Print log in high precision log ファイルに書き出すエネルギー変数の桁数を増やします。

- Sort dump file by id dump ファイル内の粒子の並びを id (通し番号) でソートされた形にし ます。
- **Calculate Fluctuation Properties** 熱力学量の揺らぎから比熱と等温圧縮率を on-the-fly で計算 し出力します。
- **Calculate Thermal Conductivity** 原子の流速の自己相関関数と Green-Kubo 式から熱伝導率を on-the-fly で計算し出力します。
- Calc Interval 熱伝導率計算における自己相関関数の算出頻度を指定します。
- ACF Length 熱伝導率計算における自己相関関数の長さを指定します。
- **Calculate viscosity** 圧力テンソルの自己相関関数と Green-Kubo 式から粘度を on-the-fly で計算 し出力します。
- Calc Interval 粘度計算における自己相関関数の算出頻度を指定します。
- ACF Length 粘度計算における自己相関関数の長さを指定します。

### Interaction

- **Modify cutoff radii not to exceed L/2** チェックを入れた場合は、Cutoff (vdw), Cutoff (Coulomb) が格子定数の半分を超えないように自動調整します。
- Neighbor Search 近接粒子探索時のアルゴリズムを指定します。
- Neighbor Skin 近接粒子探索時の探索半径の余分を指定します。
- Cutoff(vdw) vdw(LJ) ポテンシャルのカットオフ半径を指定します。
- Enable Long Range Correction vdw ポテンシャルのカットオフ補正項の有無を指定します。
- Cutoff(Coulomb) Coulomb(静電)ポテンシャルのカットオフ半径を指定します。
- **Disable Ewald(PPPM) if no charge exists** 系が電荷を持たない場合に、自動で Ewald (PPPM) 法を無効にします。
- Automatically set Nmesh *Pair Style* = lj/cut/coul/long の際に使用される PPPM 法のメッ シュ数を K-space accuracy から自動的に設定します。
- Nmesh for kx, ky, kz PPPM 法のメッシュ数を指定します。
- **PPPM Order** PPPM 法の Spline 補間次数を指定します。
- K-space accuracy PPPM 法の許容相対誤差を指定します。

### Non-equiliibrium (1)

- Enable Elongation 伸長計算を有効にします。 *Ensemble* が minimize 以外の時に指定できます。
- Affine Transformation 伸長計算時に原子位置をシミュレーションセルに合わせてアフィン(相似)変形するか指定します。
- **Eng. Strain Rate** 伸長計算時の伸長速度を工業ひずみで指定します。 *Max Eng. Strain* には最終ステップにおけるひずみの予測値が表示されます。
- Preserve Volume 伸長計算時に、シミュレーションセルの体積を一定に保つよう伸長方向に垂 直な方向のセルサイズを変形させます。
- **Enable Pulling** 指定した原子群を一定速度で移動させる Pull 計算を有効にします。 *Ensemble* が minimize 以外の時に指定できます。

**Pulled Atoms** 予め 登録グループを選択 で Pull したい原子を登録しておいた状態で Select Group ボタンを押し、そのグループを選択します。

Pull Velocity Pull 計算時の、Pull 速度を指定します。

**Enable Simulated Annealing** アニーリング計算(温度を一定速度で変化させる計算)を有効 にします。 *Ensemble* が nvt, npt の時に指定できます。 *Temperature* の値が始状態の温 度、 *Final Temperature* の値が終状態の温度となります。

Final Temperature アニーリング計算時の終状態の温度を指定します。

Annealing Rate アニーリング計算時の加熱または冷却速度が表示されます。

**Enable pressurization** 圧縮計算(圧力を一定速度で変化させる計算)を有効にします。*Ensemble* が npt, nph の時に指定できます。*Pressure* の値が始状態の圧力、*Final Pressure* の値が 終状態の圧力となります。

Final Pressure 圧縮計算時の終状態の圧力を指定します。

- **Enable electric field** 外部電場を与えます。 *Sine wave* を選ぶと、正弦波的に電場を与えます。 *Constant* を選ぶと、定常的に電場を与えます。
- **Amp & Freq** 各方向の強度(Amp)と周波数(Freq)を与えます。 *Enable electric field* で *Sine wave* を選んだ時は下式で電場が与えられ、A が強度、f が周波数となります。 *Constant* を 選んだ時は強度のみが使われます。

 $A\sin(2\pi ft)$ 

#### Restraint

- **Enable Restraint** 指定した 2 原子間の距離を拘束した計算を実施します。*Ensemble* が minimize 以外の時に指定できます。
- **Restrained Atoms** *Set* ボタンをクリックすると、マーカーが付いた2原子が拘束のターゲット となります。
- Bond Length 拘束計算時の、2原子間の拘束距離を指定します。
- Initial Strength 拘束計算時の、始状態における拘束ポテンシャルのバネ係数を指定します。
- Final Strength 拘束計算時の、終状態における拘束ポテンシャルのバネ係数を指定します。
- Enable Position Restraint 指定した原子の絶対座標を固定した計算を実施します。固定されて いない原子の温度は log に TempFree として出力されます。
- **Restrained Atoms** 予め 登録グループを選択 で拘束したい原子を登録しておいた状態で *Select Group* ボタンを押し、そのグループを選択します。
- **Use spring potential** *Restrained Atoms* に指定した原子を初期位置からのばねポテンシャルで拘束します。*Reset positions of restrained atoms after run* にチェックが入った場合は、計算終了後は初期位置に戻されるため、Extending simulation を繰り返しても最初に指定した位置から離れて移動することはありません。
- Spring constant ばねポテンシャルを使う際のばね係数を指定します。
- Reset positions of restrained atoms after run ばねポテンシャルを使う際、計算終了後に拘束 した原子の位置を初期位置に戻します。

### Automatic

Rescale velocities to.. NVE アンサンブルにおいて目標温度に系の温度を近づけたい時に使い ます。計算中の平均温度とここで入力した温度からスケーリング係数を算出して、最終構 造の各粒子の速度をスケーリングします。

- Rescale box size to.. NPT アンサンブルで計算した後に、設定圧力に近い状態で NVE または NVT アンサンブルで計算した場合に使用します。最終構造を、計算中の平均セルサイズ にスケーリングします。
- Manual entry 生成される LAMMPS のインプットスクリプト (in ファイル) の中身が表示されます。 この場所で直接編集することも可能です。

### Options

- Make a Backup of Working Directory 作業ディレクトリのバックアップを行う際に選択します。
- **Restore Working Directory** 継続ジョブが異常終了時など、作業ディレクトリを実行前の状態 に戻す際にクリックします。
- **Dump all files for remote** Linux 環境でのジョブ実行に必要なファイルを出力します。 リモートジョブ 機能で生成されるファイルと同じファイルが出力されます。
- **Generate gro & ndx files every time** チェックが入っていない場合は、継続ジョブの時に gro と ndx ファイルを生成しません。

# 6.12.3 LAMMPS 実行

LAMMPS を実行します。状況に応じて実行方法が異なります。

- (デフォルト) Extending Simulation にチェックがなく、力場を割り当てにおいて自動でパラメータを割り当てま data ファイル(座標とトポロジを含むファイル)を新規に生成してからジョブを開始し ます。
- Extending Simulation にチェックがなく、力場を割り当てにおいてメインウィンドウのファイルに書かれたパラメ-メインウィンドウで開かれている data ファイルを使用してジョブを開始します。
- Extending Simulation にチェックがある場合 メインウィンドウで開かれている data ファイル に紐づけられた作業ディレクトリの中にある lmp\_tmp\_final.data 用いてジョブを開 始します。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが water.dataの時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	説明
outファイル water.log	LAMMPS のログファイルです。
<b>batファイル</b> water.bat	LAMMPS とそのプリ・ポスト処理を実 行するための バッチファイルです。
作業ディレクトリ water_lmp_tmp\	作業ディレクトリです。

作業ディレクトリには以下のファイルが生成されます。ここでは主要なファイルのみ示しています。

種類	説明
lmp_tmp.data	read_data で指定される計算の初期状態の ファイルです。
lmp_tmp.in	計算条件を指定するファイルです。
lmp_tmp.log	ログファイルです。 water.log と同じものです。
lmp_tmp.dump	dump 形式のトラジェクトリファイル です。
lmp_tmp.restart	最終状態の情報を含む restart ファイル です。
lmp_tmp_final.data	最終状態の情報を含む data ファイル です。 restart ファイルから生成されます。
postproc.sh	LAMMPS が生成する lmp_tmp_final.data が、 そのままでは LAMMPS の実行には不十 分なため、 不十分な情報を補うための処理を行うス クリプトです。
lmp_tmp.xtc	結果処理に Gromacs ツールを使用するた めの、 xtc 形式のトラジェクトリファイルです。
lmp_tmp.xtc	結果処理に Gromacs ツールを使用するた めの、 xtc 形式のトラジェクトリファイルです。
lmp_tmp.gro	結果処理に Gromacs ツールを使用するための、
	gro 形式の座標ファイルでを 入力ファイルとして指定された data ファ イルから変換して 作成されます。

128

ヒント: 作業ディレクトリ

- 作業ディレクトリとは、メインウィンドウで開かれているファイルの名前に接尾辞 を加えた名前のフォルダです。
  - 接尾辞はソルバの種類により変わります。
  - 例えば Gromacs の場合は、メインウィンドウで開かれているファイルが aaa.gro で、接尾辞が \_gmx\_tmp の場合、作業ディレクトリの名前は aaa\_gmx\_tmp と なります。
- メインウィンドウで開かれているファイルと同じ階層に置かれている必要があります。
- 継続ジョブの時も同名の作業ディレクトリで処理が流れますが、デフォルトでは継続ジョブの実施直前に、直前のジョブの作業ディレクトリのバックアップが作成されます。
  - バックアップの名前は、重複する名前が存在しない範囲で一番小さい番号が付 いたものになります。例えば、作業ディレクトリが aaa\_gmx\_tmp のときは aaa\_gmx\_tmp1 となります。
  - 番号が付いていないディレクトリが常に最新のものとなります。

ジョブは Winmostar Job Manager を通じて実行されます。

### 6.12.4 ログを表示

LAMMPS のログファイル(\*.log)をテキストエディタで開きます。

# **6.12.5** アニメーション

data ファイルと dump ファイルを選択し、MD 計算のトラジェクトリをアニメーション表示します。

メインウィンドウのファイル名は変化しません。

アニメーション表示の操作方法はAnimation ウィンドウを参照してください。

# 6.12.6 エネルギー変化

ログファイルを選択し、エネルギー、温度、圧力などの各種熱力学量のグラフを表示します。 thermo\_style で指定した値をプロットすることができます。

サブウィンドウの操作方法は Energy Plot ウィンドウ を参照してください。

### 6.12.7 最終構造を読み込み

\*\_lmp\_tmp\lmp\_tmp\_final.gro を開きます。

本機能を使うとメインウィンドウのファイル名は変化しません。

### 6.12.8 結果解析

### 動径分布関数

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx ファイルを選択し、動径 分布関数を表示します。

詳細は 動径分布関数 を参照してください。

#### 自己拡散係数/平均二乗变位

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx ファイルを選択し、平均 二乗変位と自己拡散係数を表示します。

詳細は自己拡散係数/平均二乗変位を参照してください。

### 散乱関数

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx ファイルを選択し、散乱 関数を表示します。

詳細は 散乱関数 を参照してください。

### 比誘電率/双極子モーメント

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、散乱関数を表示します。mdp, top ファイルは GAFF などの汎用力場使用時のみ生成可能なため、パラメータファイルの使用時などは本機能を利用できません。

詳細は比誘電率/双極子モーメントを参照してください。

### 密度分布

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、密度分布を表示します。mdp, top ファイルは GAFF などの汎用力場使用時のみ生成可能なため、 パラメータファイルの使用時などは本機能を利用できません。

詳細は 密度分布 を参照してください。

#### 自由体積

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択し、自由体積を表示します。mdp, top ファイルは GAFF などの汎用力場使用時のみ生成可能なため、 パラメータファイルの使用時などは本機能を利用できません。

詳細は 自由体積 を参照してください。

### 各種自己相関関数

Green-Kubo 式を用いた熱伝導率、粘度算出時に出力される自己相関関数を表示します。

距離/角度/二面角分布

LAMMPS が出力した xtc ファイルと Winmostar が自動生成した gro, ndx, mdp, top ファイルを選択 し、選択グループ間の距離、角度、または二面角の分布を表示します。mdp, top ファイルは GAFF などの汎用力場使用時のみ生成可能なため、パラメータファイルの使用時などは本機能を利用でき ません。

詳細は距離/角度/二面角分布を参照してください。

### 6.12.9 散逸粒子動力学

DPD セルビルダ

散逸粒子動力学用のシミュレーションセルを作成します。

Monomers Available ポリマー鎖を構成するモノマー(粒子)を選択します。

# of Monomers 選択したモノマーの数を指定します。

>> Add >> 選択したモノマーを追加します。

Branch

Start 分岐開始位置を指定します。

End 分岐終了位置を指定します。

Monomers Used 追加したモノマー種と数がリスト表示されます。

Clear リストアップされたモノマー種を全て削除します。

<< Delete << 追加したモノマーを削除します。

# of Polymers ポリマー鎖の数を指定します。

>> Add >> リストアップされたポリマー鎖を計算対象に追加します。

Polymers Used 追加したポリマー鎖の構成と本数がリスト表示されます。

<< Delete << 追加したポリマー鎖を削除します。

Density 系の密度(無次元)を指定します。

Build シミュレーションセルを構築します。

Reset すべての設定をデフォルトに戻します。

Close ウィンドウを閉じます。

### ポテンシャル編集

Winmostar 独自形式の散逸粒子動力学用のポテンシャルファイルを作成・編集します。
Potential Files 散逸粒子動力学に用いるポテンシャルファイルを選択します。
New 新たにポテンシャルファイルを作成します。
Delete 選択したポテンシャルファイルを削除します。
Mass タブ
Species モノマー(粒子)名が表示されます。
Mass 質量(無次元)を設定します。

Bond タブ

R\_0 結合(ボンド)ポテンシャルパラメータR\_0(平衡距離、無次元)を設定します。

K 結合(ボンド)ポテンシャルパラメータK(バネ定数、無次元)を設定します。

Nonbond タブ

Aij 非結合ポテンシャルパラメータ Aij (無次元)を入力します。

Rcut 非結合ポテンシャルパラメータ Rcut (カットオフ半径、無次元)を入力します。

Set 設定したポテンシャルパラメータがリストに反映されます。

OK 設定したポテンシャルパラメ-タをポテンシャルファイルに保存してウィンドウを閉じます。 Close 設定内容を破棄してウィンドウを閉じます。

# **6.13** $MD \rightarrow Amber \nearrow \Box \neg \neg$

Amber に関するメニューです。

Winmostar では Amber を Cygwin 環境上で実行するため、本機能を利用するためには *CygwinWM* の セットアップ が必要です。

### 6.13.1 LEaP キーワード設定

tLEaPを用いて座標(crd)、トポロジ(prmtop)ファイルを作成する条件を設定します。各項目を 選択して指定し、[OK] ボタンをクリックします。

Force Field 力場の種類を選択します。

Add Na+ Na イオンを追加するか指定し、その数を指定します。

Add Cl- Cl イオンを追加するか指定し、その数を指定します。

Solvate 水分子を追加するか指定します。

Box/Octahedron ボックスタイプを指定します。

Solvent 溶媒の種類を指定します。

Distance 溶質とボックス境界の距離を指定します。

Other LEaP Commands その他の LEaP コマンドを記述します。

# 6.13.2 LEaP 実行

tLEaPを用いて座標(crd)ファイルおよびトポロジ(prmtop)ファイルを作成します。(拡張子を除く crd ファイル名)\_leap\_tmpという名前の作業フォルダを作成して、そのフォルダで処理が行われます。

### 6.13.3 sander キーワード設定

sander による計算を実行するための条件を設定します。各項目を選択して指定し、[OK] ボタンをク リックします。

Basic

imin エネルギー最小化を行うか指定します。

igb 溶媒モデルを指定します。

ntb 周期境界条件かどうか指定します。

ntt 温度スケーリングを指定します。

tempi 初期温度を指定します。

temp0 参照温度を指定します。

nstlim MD ステップの数を指定します。

#### Advanced

maxcyc 最大サイクル数を指定します。

ncyc 最大勾配法のアルゴリズムを使用するサイクル数を指定します。

 $gamma_ln$  衝突頻度  $\gamma$  を指定します。

dt 時間ステップを指定します。

cut カットオフ距離を指定します。

ntpr エネルギー値、温度などの出力頻度を指定します。

ntwx 座標をトラジェクトリファイルに出力する頻度を指定します。

### QM/MM

Use qmmm ifqnt=1 にし、&qmmm namelist を加え、QM/MM/MD 計算のための設定を有効に します。

qm\_theory QM 領域で用いる計算手法を選択します。

**qmcharge** QM 領域の net charge を指定します。

qmshake QM 領域の H 原子への SHAKE 法の適用を指定します。

**qm\_ewald** QM 領域への Ewald 法の適用を指定します。

**qm\_pme** QM 領域への PME 法の適用を指定します。

qmmask [Set] ボタンを押すと、メイン画面で選択された原子を QM 領域として設定します。 メイン画面において Ctrl+ドラッグにより選択された青色の原子が対象となります。

Misc

Other Settings その他の設定を記述します。

## 6.13.4 sander 実行

sander を実行します。(拡張子を除く crd ファイル名)\_amb\_tmp という名前の作業フォルダを作成 して、そのフォルダで処理が行われます。

ジョブは Winmostar Job Manager を通じて実行されます。

## **6.13.5** アニメーション

mdcrd ファイルを ptraj で変換した PDB ファイルからトラジェクトリの座標をインポートします。

アニメーション表示の操作方法はAnimation ウィンドウを参照してください。

### 6.13.6 エネルギー変化

計算結果の log ファイルからエネルギーのグラフを表示します。

サブウィンドウの操作方法は Energy Plot ウィンドウ を参照してください。

## 6.13.7 座標ファイル読み込み

Amber 形式の座標 (crd)ファイルとトポロジ (prmtop)ファイルを読み込みメインウィンドウに表示します。

# 6.14 *MD* → ポリマー メニュー

ポリマー系を作成する手順は以下のとおりである。

- 1. モノマーをモデリングし、 モノマー登録 を実行する。
- 2.1 で登録したモノマーを用いてホモポリマービルダ,ブロックポリマービルダ,ランダムポリ マービルダを用いてポリマーを登録する。
- 3. ポリマーセルビルダにて、2. で登録したポリマーを用いてセルを構築する。

低分子・ポリマー混合系を作成したい場合は、上記手順でポリマー系を作成した後に 分子を挿入 で 低分子を追加する。

# 6.14.1 モノマー登録

ホモポリマービルダ、 ブロックポリマービルダ、 ランダムポリマービルダ で使用するためのモノ マーを登録します。設定 で設定したモノマーファイルの保存先に、 wmo という拡張子で保存され ます。wmo ファイルは Winmostar 独自のコメントが付加した mol2 ファイルです。

- 1) メインウィンドウにおいて登録したいモノマー(繰り返し単位)の構造を作成します。
- 2) Head と Tail の 2 原子を左クリックして、赤丸の マーカー が付いた状態にし、本機能を呼び出 します。

[Head], [Tail] 選択した Head 原子と Tail 原子の番号が表示されます。

[Name] 登録するモノマーの名前を入力します。

[OK] モノマーを登録しウィンドウを閉じます。モノマーファイルが作成されます。

[Cancel] 設定を破棄してモノマー登録画面を閉じます。

### 6.14.2 ホモポリマービルダ

ポリマーセルビルダで使用するためのホモポリマーを、モノマー登録で登録されたモノマーから 作成し登録します。設定で設定したポリマーファイルの保存先に、wpoという拡張子で保存され ます。wpoファイルはWinmostar独自のコメントが付加したmol2ファイルです。ポリマー全体の 電荷は、使用したモノマー(繰り返し単位)の電荷と重合度の積になります。重合により削除され た原子の分の電荷はポリマー全体の原子に均等に割り当てられます。

[Polymer Name] 登録するポリマーの名前を入力します。

[Degree of Polymerization] 重合度を指定します。

[Monomer List] 使用するモノマーを選択します。

[Display] 選択したモノマーをメインウィンドウに表示します。

[Delete] 選択したモノマーファイルを削除します。

[Tacticity]

[Isotactic] アイソタクチックポリマーを作成します。

[Syndiotactic] シンジオタクチックポリマーを作成します。

[Atactic] アタクチックポリマーを作成します。

[Racemo Ratio] アタクチックポリマー選択の際、ラセモ率 (0 < x < 1.0) を指定します。

[Head/Tail Configulation]

[Head to Tail] モノマーの Head 原子と Tail 原子を重ねて結合します。

[Head to Head] モノマーの Head 原子と Head 原子を重ねて結合します。また、モノマーの Tail 原子と Tail 原子を重ねて結合します。

[Build] ポリマーを登録します。ポリマーファイルが作成されます。

[Close] ウィンドウを閉じます。

## 6.14.3 ブロックポリマービルダ

ポリマーセルビルダで使用するためのブロックポリマーを、 モノマー登録で登録されたモノマー から作成し登録します。設定で設定したポリマーファイルの保存先に、 wpo という拡張子で保存 されます。wpo ファイルは Winmostar 独自のコメントが付加した mol2 ファイルです。電荷の割り 当て方は ホモポリマービルダ と同じです。

[Polymer Name] 登録するポリマーの名前を入力します。

[Degree of Polymerization] 重合度を指定します。

[First Monomer] 先頭モノマーをモノマーリストから選択します。

[Last Monomer] 末尾モノマーをモノマーリストから選択します。

[Internal Monomer] 中間のモノマーをモノマーリストから選択します。[Number] にモノマー数を 入力します。

[Number] 中間のモノマー数を指定します。

[Add] 設定した中間モノマー名と数を Internal Monomer List に反映させます。

[Display] 設定した中間モノマーをメインウィンドウに表示します。

[Delete wmo File] 指定したモノマーファイルを削除します。

[Delete From List] リスト内で選択された中間モノマーをリストから削除します。

[Build] ポリマーを登録します。ポリマーファイルが作成されます。

[Close] ウィンドウを閉じます。

# 6.14.4 ランダムポリマービルダ

ポリマーセルビルダ で使用するためのランダムポリマーを、 モノマー登録 で登録されたモノマー から作成し登録します。設定 で設定したポリマーファイルの保存先に、 wpo という拡張子で保存 されます。wpo ファイルは Winmostar 独自のコメントが付加した mol2 ファイルです。電荷の割り 当て方は ホモポリマービルダ と同じです。

[Polymer Name] 登録するポリマーの名前を入力します。

[Degree of Polymerization] 重合度を指定します。

[First Monomer] 先頭モノマーをモノマーリストから選択します。

[Last Monomer] 末尾モノマーをモノマーリストから選択します。

[Internal Monomer] 中間のモノマーをモノマーリストから選択します。[Number] にモノマー数を 入力します。

[Ratio] 選択した中間モノマーの出現率 (0 < x < 1.0) を指定します。

[Add] 設定した中間モノマー名と出現率を Internal Monomer List に反映させます。

[Display] 設定した中間モノマーをメインウィンドウに表示します。

[Delete wmo File] 指定したモノマーファイルを削除します。

[Sum of Ration] Internal Monomer List にリストアップされた Ratio の合計値が表示されます。

[Delete From List] Internal Monomer List 内で選択した中間モノマーをリストから削除します。

[Definition of Ratio]

- [Probability of Each Monomer] 出現率 [Add] に従って中間モノマー発生させます。最終的な 中間モノマーの比率は出現率に一致するとは限りません。
- [**Proportion in Total Monomers**] 最終的に得られる中間モノマーの比率は出現率 [Add] に比例 します。

[Number of Patterns] ポリマーのパターンの数を指定します。

[Number of Patterns] ポリマーのパターンの数を指定します。

- [Use Specific Random Seed] 特定の乱数種を使用する場合は、チェックして値を指定します。指定しない場合は違う構造のパターンが得られます。
- [Build] ポリマーを登録します。ポリマー名のフォルダの下にポリマーファイルがパターンの数だ け作成されます。

[Close] ウィンドウを閉じます。

# **6.14.5** ポリマーセルビルダ

ホモポリマービルダ、 ブロックポリマービルダ、 ランダムポリマービルダ において登録したポリ マーを用いてシミュレーションセルを構築します。溶媒を配置/セルを構築 を用いると各分子を剛 体的にシミュレーションセルに配置するため高密度で作成することが困難ですが、本機能を使用す ると LAMMPS を使用してエネルギー最小化計算を実行しながら配置するため比較的高密度で作成 することができます。

[Box Configulation]

[Density] 密度を指定します。

- [X-Axis Length] 直方体セルの X 方向の長さを 単位で指定します。または長さが 単位で表示されます。
- [Y-Axis Length] 直方体セルの Y 方向の長さを 単位で指定します。または長さが 単位で表示されます。

[Z-Axis Length] 直方体セルの Z 方向の長さが 単位で表示されます。

[Cubic Cell] 立方体セルを指定します。

[Periodic Boundary Condition]

[X],[Y],[Z] 周期境界条件を課す方向にトグルを入れます。

[Polymer Available]

[Number] 選択したポリマーの本数を指定します。

[Display] 選択したポリマーをメインウィンドウに表示します。

[Delete] 指定したポリマーのファイル削除します。

[Add] 選択したポリマーを Polymers Used リストに反映させます。

[Delete] 選択したポリマーを Polymers Used リストから削除します。

[MPI] 作成時の最適化に使用する LAMMPS を MPI 並列で計算します。

[Processes] MPI 並列数を指定します。

- [non-bonded inter-atomic distance tolerance] 非結合原子間距離の最小値の許容値を指定します。指 定した許容値で作成できなかった場合は、徐々に許容値を小さくして作成するので、必ず許容 値に収まっているとは限りません。許容値の変化はログに出力されます。
- [Randomly select random polymers to be used] ランダムポリマーの場合は、使用するポリマーをランダムに選択します。チェックされていない場合は、順番に使用します。
- [Use Specific Random Seed] 特定の乱数種を使用する場合はチェックして値を指定します。指定しない場合は毎回違う構造が得られます。

[Build] シミュレーションセルを作成します。

[Close] ウィンドウを閉じます。

## 6.14.6 モノマー割り付け

DPD 粒子に対し登録したモノマーを割り付け、全原子 MD の分子構造を取得します。

### 6.14.7 設定

モノマーおよびポリマーを登録するフォルダを指定します。

[Monomer(\*.wmo)Folder] モノマーファイルの保存先フォルダを指定します。

[Polymer(\*.wpo)Folder] ポリマーファイルの保存先フォルダを指定します。

[OK] 設定内容を保存してウィンドウを閉じます。

[Cancel] 設定内容を破棄してウィンドウを閉じます。

# 6.15 MD → 界面ビルダ メニュー

あらかじめ用意された二つのシミュレーションセルのファイル(mol2または cif 形式)を接合して 界面モデルを作成します。 ツール → 環境設定 メニュー で新仕様と旧仕様の機能を切り替えられま す。新仕様の機能は次の通りです。

Cell タブ 界面を挟む2相(Cell1とCell2)を指定します。

Use displayed cell メインウィンドウに表示されているモデルを相に指定します。

Load from file CIF または mol2 形式で保存されたモデルを相に指定します。

### Direction タブ

Axis perpendicular to interface 界面垂直方向の軸を指定します。

**Order** Cell1 と Cell2 を接合する順番を指定します。

Interval Cell1 と Cell2 の間隔を指定します。

Specify interval between cell boundaries 入力した値は、セル境界間の距離となります。

- **Place atoms on cell boundaries on both sides** チェックを入れると、セル境界直上に置かれ た原子を、界面垂直方向の両サイドにコピーして配置します。*Axis perpendicular to interface* が c-axis の場合、c 軸上(直方体セルの場合は z 軸)の分率座標が0または 1 の原子は、分率座標がそれぞれ1または0の位置にコピーされます。
- **Specify interval on selected axis between outermost atoms** 入力した値は、*Axis perpendic-ular to interface* で選択した軸上のもっとも外側の原子間の距離となります。

Adjusting cell size parallel to interface 界面水平方向のセルサイズの調整方法を指定します。

- Scale both cells to average size 作成される界面モデルの界面水平方向のセルサイズが、 Cell1 と Cell2 のセルサイズの平均値となるよう、原子位置をアフィン変形します。
- Scale to size of... 選択したセルサイズに、他方のセルサイズを合わせるよう、原子位置を アフィン変形します。
- Extend size of smaller cell while keeping atomic positions 原子位置は変更せず、小さい方のセルサイズを大きい方のセルサイズに変更します。

- Number of cells 界面モデルの作成時に、Cell1 および Cell2 のスーパーセルの個数を指定しま す。 Suggest ボタンをクリックすると、Cell1、Cell2 それぞれどの個数にするとセルサイ ズの比がいくつになるかを表示します。 Ratio が1 に近い組み合わせを選ぶことが推奨さ れます。
- Operation for atoms outside each cell セルの外側に位置する原子があった場合の扱いを指定します。
  - Wrap for each molecule 周期境界を考慮して、分子単位でセルの内側に位置を移動させます。
  - Wrap for each atom 周期境界を考慮して、原子単位でセルの内側に位置を移動させます。

Do nothing 何もしません。

Build ボタン 設定された内容に基づき界面モデルを作成します。

旧仕様の機能は次の通りです。

**Cell Files** 接合させる2つのセル(Cell 1 および2)の情報を指定します。各項目を設定後[Next] ボ タンをクリックします。

Cell 1 および Cell 2

[Browse] 接合させるファイル (mol2 または cif 形式)を指定します。ファイルをドラッ グアンドドロップして指定することも可能です。

[Lattice Constants]

[a],[b],[c],[Alpha],[Beta],[Gamma] セル定数が表示されます。

Repeat タブ

Direction セルを接合させる方向およびセル間の間隔を指定します。各項目を設定後 [Next] ボタン をクリックします。

Direction

[a-axis] a 軸方向に沿って2つのセルを結合します。

[b-axis] b 軸方向に沿って2つのセルを結合します。

[c-axis] c 軸方向に沿って2つのセルを結合します。

Order

[Normal] Cell 1 に Cell 2 を重ねます。

[Reverse] Cell 2 に Cell 1 を重ねます。

[Interval] セル間の間隔を指定します。2面間の距離ではなく、軸に沿った長さとなります。

[Scaling cells to average size] セルの大きさに違いがある場合、平均サイズに伸縮します。

[Padding small cell to the size of large cell] セルの大きさに違いがある場合、小さい方のセル に真空を入れて、大きい方のセルに合わせます。

Repeat 各セルのリピート数を指定します。最後に [Build] ボタンをクリックします。

Number of Cell 1 および Cell 2

[a-axis] セル1またはセル2のa軸方向のリポート数を指定します。

[b-axis] セル1またはセル2のb軸方向のリピート数を指定します。

[c-axis] セル1またはセル2のc軸方向のリピート数を指定します。

[Suggest] Cell 1 と Cell 2 のサイズが近くなるようなリピート数の組み合わせを提示しま す。Ratio が 1 に近い組み合わせほど両セルの歪みが少なくなります。列をクリックし て Set ボタンを押すか、ダブルクリックすると反映されます。

### Lattice Constrants

[a],[b],[c],[Alpha],[Beta],[Gamma] 接合後のセルの格子定数が表示されます。

[Build] 接合したセルを保存します。系のサイズが大きいと処理時間が長くなる場合があり ます。

# 6.16 固体メニュー

第一原理(バンド)計算に関するメニューです。

固体メニューの機能を利用するには Solid パックが必要です。

# 6.16.1 結晶ビルダ

結晶構造を作成します。主に以下の目的で使用します。

- 空間群、格子定数、非対称要素を入力して結晶構造を作成します。
- 結晶ビルダ上で CIF ファイルを開き a, b, c 軸を交換します。
- 非整数の occupancy を含む CIF ファイルを開き、原子を割り当てる。

File メニュー

New 結晶構造を新規作成します。

Open CIF ファイルを開きます。

Save As 結晶ビルダに表示されている結晶構造を CIF 形式または XYZ 形式で保存します。

Save As P1 CIF チェックした場合は CIF 形式で保存する際に P1 で保存します。

Edit メニュー

- Exchange Axis 軸 (a, b, c) と非対称要素の座標 (x, y, z) を交換します。詳しくは International Tables vol.A をご覧ください。
- Discard symmetry 対称操作を破棄し、空間群は P1 とします。この時、既存の対称操作によっ て再生された全ての対称要素は非対称要素として認識されます。
- Assign Atoms to Non-Integer Occupancy Sites 読み込んだ CIF ファイル内で定義された占有率 の項目(\_atom\_site\_occupancy)を元にして、各サイトに対してランダムな原子を発生さ せます。占有率に応じたスーパーセルを作成したい場合、リピート機能を用いて十分に大 きなスーパーセルを作成してからこの機能を使用してください。

View メニュー

Show Multi-View 三面図による描画を行います。三面図では左上の画面のみが自由回転に対応しており、残りの三方向のカメラは結晶の a, b, c 軸に固定されるため回転しません。

Always View Center チェックが付いている場合は、常に重心に注視点を合わせます

Orbit/Roll 回転方法を指定します。

Orbit 自由回転を行います。

Roll around a-, b-, c-axis a, b, c 軸回りの回転を行います。

Show Bond 結合を表示します。

Show Element Name 元素記号を表示します。

Show Atoms on Boundary in Duplicate 境界上の原子を表示します。

Show Unit Cell 単位格子を表示します。

Make Replicated Atoms Transparent 対称操作によって生じた原子を透明表示します。

Crystal System 結晶系を選択します。

Space Group 空間群を番号もしくは Hermann–Mauguin 記号から選択します。

Lattice Constant 格子定数を設定します(選択した空間群によって入力できるフィールドが変わり ます)。

Add 非対称要素となる原子を追加します。

Remove リスト上で選択した非対称要素となる原子を削除します。

Atom 元素記号を入力/修正します。

X, Y, Z 原子サイトを分率座標 (fractional coordinate) で設定します。

OK 作成した結晶構造をメインウィンドウに読み込みます。

読み込みを取り消したい場合は、メインウィンドウで 編集 → 元に戻す をクリックしてくだ さい。

Cancel 結晶ビルダで入力した構造を破棄しメインウィンドウに戻ります。

# 6.16.2 スラブを作成

(バルクの)結晶の CIF ファイルを読み込んだ状態で本機能を呼び出すと、スラブを作成することができます。 内部的には pymatgen を利用しています。

まず、Generate Slab ボタンをクリックした後、OK ボタンをクリックします。

Miller indices スラブ表面のミラー指数を入力します。

Minimum slab size 表面垂直方向 (c-axis) のセルサイズを入力します。

Supercell 表面水平方向 (a または b-axis) のスーパーセルの個数を入力します。

Force c-axis to be perpendicular to a and b axes c 軸が a および b 軸に垂直になるようにします。

Convert hexagonal to orthorhombic Hexagonal を Orthorhombic に変換します。

Generate Slab ボタン 本ボタンより上の項目に基づき表面構造の候補を作成します。

Surface configurations 表面構造を候補の中から選択します。

**Slab, Vacuum, Total width** 表面垂直方向のサイズを入力します。 *Vacuum* あるいは *Total width* のど ちらかを入力したら、他方が自動で決定されます。

Position 表面垂直方向のスラブの位置を指定します。

OK ボタン スラブモデルを作成しメインウィンドウに表示します。

警告: 本機能を利用するためには CygwinWM のセットアップ が必要です。

# **6.16.3** スーパーセルを作成

メインウィンドウで表示されているセルを複製しスーパーセルを作成します。 *a*,*b*,*c*に繰り返し数を入力し、*OK*ボタンをクリックします。

# 6.16.4 表面を切り出し

ミラー面の指定して単位格子の再定義します。

スラブモデルを作成する際は、この機能を実行した後に 真空層を挿入 を実行してください。

View メニュー 結晶ビルダ と同じです。

Step 1/2 Cutting

Cleave Plane 表面のミラー指数 (h k l) を定義します。

Offset ユニットセルの上端から下端までの相対位置(百分率)により、表面の位置を指定します。

Next >> Step 2/2 Transform Unit Cell に進みます。

Step 2/2 Transform Unit Cell

View Configuration 描画範囲を設定します。

Lattice Choice 格子の定義を選択します。

**Manual** 原点、a軸、b軸、c軸上の原子を *Set* ボタンで指定します。

Filter (Ortho) Lattice の中から選択します。Lattice には長方形状の候補のみ出現します。

Filter (All) Lattice の中から選択します。

Lattice 格子の定義の選択肢が表示されます。

Filter Lattice の絞り込み条件を指定します。

OK 処理を実行します。

6.16.5 真空層を挿入

結晶構造の上下に真空層を挿入し、スラブモデルの構築します。

本機能を使って真空層を挿入すると、真空層に接する面の両側に原子がコピーされますが、 手動でセルを編集 を使って真空層を作成してもそのようにならず原子数は変化しません。

View メニュー 結晶ビルダ と同じです。

**Axis** 真空層を挿入する方向を X, Y, Z 軸から選択します。

Bulk 元のセルの厚さを 単位で示します。(表示のみ)

Vacuum 真空層の厚さを 単位で定義します。

Total Width Bulk と Vacuum の合計値を示します。(表示のみ)

- Automatically shift to center このチェックボックスがチェック状態のとき、元の結晶構造はスラブ モデルの中心に固定されます。チェック状態でないとき、Shift 機能が利用できるようになり ます。
- Shift 拡張されたセル内での表面構造の位置を指定できます。エディットボックス内の数値は基準面の位置を分率座標で示しています。
- Reference Plane 基準面の位置を指定します。Base のとき、基準面は結晶構造の底面になります。 Center のとき基準面は結晶構造の中央となります。
- Terminate dangling bonds with hydrogen atoms 真空に接する面において、ダングリングボンドを 水素でキャップします。官能基で修飾したい場合は、本機能にチェックを入れた後、メインウィ ンドウに戻ってから フラグメントで置換 を使用して水素を任意の官能基に置換してください。

OK 処理を実行します。

## 6.16.6 クラスタを作成

結晶構造からナノクラスターを切り出します。

元のユニットセルの原子は不透明、ユニットセル外の原子は半透明で表示されます。

View メニュー 結晶ビルダ と同じです。

Center クラスタの中心点を分率座標で指定します。グラフィック画面上の原子を選択した状態で、 Set をクリックすると選択した原子位置を中心点に指定できます。 Cluster Radius クラスター の半径をオングストローム単位で指定します。

Hydrogen 真空層の厚さを 単位で定義します。

OK 処理を実行します。
## 6.16.7 格子を変換

メインウィンドウで表示されているセルについて、プリミティブセル-コンベンショナルセル間の変換を行い ます。

警告:本機能を利用するためには CygwinWM のセットアップ が必要です。

## 6.16.8 Quantum ESPRESSO

固体  $\rightarrow$  *Quantum ESPRESSO* メニュー を参照してください。

## 6.16.9 OpenMX

固体 → OpenMX メニュー を参照してください。

## 6.16.10 FDMNES

固体  $\rightarrow$  *FDMNES* メニュー を参照してください。

# 6.17 固体 $\rightarrow$ *Quantum ESPRESSO* メニュー

Quantum ESPRESSO に関するメニューです。

Quantum ESPRESSO をインストールする方法は インストール に記載しています。

## 6.17.1 キーワード設定

Quantum ESPRESSOの計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は Run ボタン、 一旦メインウィンドウに戻る場合は OK ボタンを押してください。

Run をクリックしたときの挙動は実行を参照してください。

*Reset* ボタンでデフォルトの状態に戻ります。*Save* ボタンで Force Field を除く設定を保存します。 *Load* ボタンで *Save* にて保存した設定を読み込みます。

キーワード表示エリア に表示されている Quantum ESPRESSO のキーワードと本機能のウィンドウ に設定された内容が異なる場合は、キーワード表示エリアからキーワードを読み込むか尋ねられ ます。

本機能を呼び出すときに、メインウィンドウに表示された構造がプリミティブセルに変化できる場 合は、自動で 格子を変換 が実行されます。

Output Directory データの出力先フォルダ (outdir) を指定すると同時に、ジョブの新規・継続実行 を指定します。

Create 新規にデータの出力先フォルダを作成します。outdir は新規フォルダに設定されます。

Continue メイン画面に読み込まれている、直前に実行された QE のジョブを継続します。outdir は直前に実行されたジョブの outdir に設定されます。

Select 開いたダイアログで指定したフォルダを出力先に指定し、そのフォルダのデータから ジョブを継続します。outdir はここで指定したものに設定されます。

Preset 設定のプリセットを選択します。各プリセットは以下のキーワードを変更します。

		SCF	SCF+Ba +DOS	n <b>&amp;</b> CF+Ba (Fermi surf)	nds <sup>elax</sup>	Relax (variable cell)	BOMD	CPMD	Phonopy
-	calculatio	scf n	scf	scf	relax	vc- relax	md	ср	scf
	Use nbnd	False	True	True	False	False	False	False	False
-	K_POIN	gamma TS	automatic	automatic	gamma	automatic	gamma	gamma	gamma
			4 4 4 1 1 1	4 4 4 1 1 1		4 4 4 1 1 1			
	tstress	False	False	False	False	False	True	False	False
	Set ibrav and celldm	False	True	True	False	False	False	False	False
-	occupatio	ns		smearing					
-	ion_dyna	mics			bfgs	bfgs	verlet	none	
-	cell_dyna	mics				bfgs			
-	tprnfor	False	False	False	True	True	True	True	True
-	tstress	False	False	False	False	True	False	False	True
<b>7 () ()</b>	Use cell_facto	False	False	False	False	True	False	False	False
17. 固体	ightarrow Quant	um ESPF	12550 火					1	
	pot_extra	polation					second_c	prder	

Use MPI QE の実行時に MPI を用いて並列計算を実行するか指定します。横の欄には MPI プロセス数を入力します。

#### Basic タブ

calculation 計算の種類を選択します。

- Use nbnd バンド数を指定します。チェックを入れない場合は自動で設定されます。括弧内に 選択されたは擬ポテンシャルを使用したときの価電子数が表示される。価電子数の自動計 算に失敗した場合は N/A と表示される。
- K\_POINTS K 点の指定方法をプルダウンから選び、下のテキストボックスに QE の書式で K 点を指定します。gamma の場合は Γ 点のみで計算されます。automatic の場合は「(kx 方向の分割数)(ky 方向の分割数)(kz 方向の分割数)(kx 方向のシフトフラグ)(ky 方向のシフトフラグ)(ky 方向のシフトフラグ)(kz 方向のシフトフラグ)」(スペース区切り)を入力します。シフトフラグ は 0 のときにシフトなし(k 点が Γ 点を含む) 1 のときにシフトあり(k 点が Γ 点を跨ぐ)となります。その他詳細は pw.x のマニュアルまたは QE インストールフォルダ以下 の doc/brillouin\_zones.pdf をご参照ください。
  - Set default k-path メインウィンドウに表示されている結晶について検出されたブラベー 格子(ibrav)のデフォルトのk点パスをUserPref/kpath\_default.txtから取得して設定 します。

nosym 空間対称性の利用の有無を指定します。

noinv 時間反転対称性の利用の有無を指定します。

- Set ibrav = ... and celldm メインウィンドウにプリミティブセルが表示されていて、チェック が入っている場合は、適当な ibrav と celldm を設定します。チェックが入っていない場合 は、ibrav=0 とし、CELL\_PARAMETERS を設定します。
- ecutwfc 波動関数の計算時の平面波のカットオフエネルギーを指定します。

ecutrho 電子密度およびポテンシャル計算時の平面波のカットオフエネルギーを指定します。

tot\_charge シミュレーションセル内の系全体の電荷を指定します。

occupations 金属の場合は smearing, DOS 計算の場合は tetrahedron を指定します。

ion\_dynamics イオン(原子核)位置を変化させるアルゴリズムを指定します。

cell\_dynamics シミュレーションセルを変化させるアルゴリズムを指定します。

tprnfor 力を計算します。

tstress 圧力テンソルを計算します。

### Advanced タブ

conv\_thr SCF 計算時のエネルギーの許容誤差を指定します。

etot\_conv\_thr 構造最適化 (relax) 計算時のエネルギーの許容誤差を指定します。

forc\_conv\_thr 構造最適化 (relax) 計算時の力の許容誤差を指定します。

press\_conv\_thr セルの構造最適化 (relax-vc) 計算時の圧力の許容誤差を指定します。

electron\_maxstep SCF 計算の最大反復数を指定します。

nstep 構造最適化 (relax) 計算の最大ステップ数および MD 計算のステップ数を指定します。

upscale 構造最適化 (relax) 計算の最中に conv\_thr を自動的に小さくする際の係数を指定します。

diagonalozation 対角化アルゴリズムを指定します。

lspinorb ノンコリニア計算時にスピン軌道相互作用付きの擬ポテンシャルファイルを使える ようにします。 **smearing** 占有平滑化 (smearing) の方法を指定します。

degauss 占有平滑化のパラメータを指定します。

mixing\_beta SCF 計算における新旧の KS 軌道の混合比を指定します。1 に近いほど予測値の 割合が大きくなります。

mixing\_mode 新旧の KS 軌道の混合アルゴリズムを指定します。

- vdw\_corr ファンデルワールス(分散)力の補正方法を指定します。
- Use input\_dft チェックを入れた場合は、汎関数の設定を擬ポテンシャルファイルに書かれた 設定に対し上書きします。

cell\_dofree シミュレーションセルを動かす際の自由度(方向)を指定します。

Use cell\_factor 擬ポテンシャルテーブルの構築パラメータを明示的に指定します。vc-relax(セ ルサイズの変化を伴う構造最適化計算)の際に大きい値を設定した方がいい場合があり ます。

Spin/DFT+U タブ

- nspin スピン分極計算の設定をします。
- Use tot\_magnetization チェックを入れた場合は、ここで系全体の磁化を指定します。チェック しない場合は starting\_magnetization を指定します。
- starting\_magnetization 各原子種の磁化の初期値を与えます。
- lda\_plus\_u LDA+U 計算を実行します。

Hubbard\_U/alpha 各原子種の Hubbard の U および alpha パラメータを指定します。

Phonon タブ

Run Phonon Calculation as Postprocess フォノン計算を実行します。具体的には、pw.x を実行した後に ph.x を実行します。この項目を有効にするためには、Calculation に SCF また は relax を選ぶ必要があります。ph.x などの入出力ファイルは作業ディレクトリ内に作成 されます。

Threshold フォノン計算の打ち切り誤差を指定します。

Calc Macroscopic Dielectric Constant フォノン計算から得られる誘電率を計算します。

Calc Non-resonant Raman Raman スペクトルの計算を含めます。

- Acoustic Sum Rule フォノン計算後のスペクトル算出時(dynmat.x)の Acoustic Sum Rule の 与え方を指定します。フォノン計算そのものには影響を与えません。
- Calc Phonon Dispersion フォノン分散を計算します。フォノンバンド構造、フォノン状態密度 を取得するためにはこれを指定する必要があります。
- K Points (Dispersion) フォノン分散の計算時の K 点の数を指定します。

Dynamics タブ

Simulation Package MD 計算に使用する計算パッケージを指定します。cp.x の場合は CPMD 法を使います。

**dt** MD 計算の時間刻みを atomic unit で指定します。

tempw MD 計算で温度制御を指定した際の目標温度を指定します。

press MD 計算で圧力制御を指定した際の目標圧力を指定します。

ion\_temperature MD 計算のイオン(原子核)の温度制御方法を指定します。

ion\_velocities MD 計算のイオンの初速度を指定します。

- tolp 温度制御時の温度の許容値を指定します。
- pot\_extrapolation Born-Oppenheimer MD 使用時のポテンシャルの外挿方法を指定します。
- wfc\_extrapolation Born-Oppenheimer MD 使用時の波動関数の外挿方法を指定します。
- electron\_dynamics Car-Parrinello MD 使用時の KS 軌道を変化させるアルゴリズムを指定します。
- electron\_velocities Car-Parrinello MD 使用時の電子の初速度を指定します。
- emass Car-Parrinello MD 使用時の電子の仮想質量を指定します。
- emass\_cutoff Car-Parrinello MD 計算時の電子の仮想質量のカットオフ値を指定します。
- orthogonalization 行列計算(正規直交化)の方法を指定します。
- Dipole Corr タブ
  - tefield ノコギリ型の外部電場を印加します。
  - dipfield ダイポール補正を使用します。
  - edir tefield と dipfield が適用される方向を設定します。
  - **emaxpos** tefield と dipfield を適用する際の、外部電場が最大値となる場所を分率座標(0から 1の範囲)で与えます。
  - **eopreg** tefield と dipfield を適用する際の、外部電場が減衰する領域のサイズを分率座標で与え ます。

eamp tefield と dipfield を適用する際の、外部電場の大きさを与えます。

#### ESM タブ

- assume\_isolated=esm ESM(Effective Screening Medium, 有効遮蔽媒質) 法を使用する場合は チェックを入れます。
- esm\_bc ESM 法で使われる境界条件の種類を指定します。
- esm\_efield 電場を指定します。
- **Ifcpopt** 化学ポテンシャルー定 (constant mu) 計算を実施します。初期の系全体の電荷は Basic タブの tot\_charge で指定されます。
- fcp\_mu 化学ポテンシャルー定計算でのフェルミエネルギーの目標値を設定します。
- **Enter Relative Potential** Target Fermi Energy の入力をサポートします。まず、電圧0での計算 のログファイルを指定し、電圧0でのフェルミエネルギーを取得します。次に、印加電圧 を入力します。これら2つの情報から、Target Fermi Energy を算出します。

RISM(1) タブ

- trism=.True. RISM 計算を有効にします。ESM-RISM 計算を実行する際は、ここにチェックを 入れ、 ESM タブの assume\_isolated=esm にもチェックを入れてください。この機能を利用 するには、ESM-RISM 機能が有効になったバージョンの Quantum ESPRESSO を別途イン ストールする必要があります。
- closure RISM 計算で使用するクロージャを選択します。
- tempv RISM 計算の温度を指定します。
- ecutsolv RISM 計算のカットオフエネルギーを指定します。
- **solute\_lj** 溶質 (DFT 領域) の LJ パラメータを指定します。 *none* を選択した場合は、その下 の *solute\_epsilon* と *solute\_sigma* に LJ パラメータを入力してください。

nsolv 溶媒の分子種の数を指定します。

SOLVENTS Density の単位をプルダウンから選択し、各溶媒分子種の密度(濃度)と MOL ファイルの名前を指定します。MOL ファイルは下の Directory for MOL Files で指定した フォルダに収められている必要があります。

**Directory for MOL Files** *SOLVENTS* で選択できる MOL ファイルを収めたフォルダを指定します。

RISM(2) タブ

laue\_expand\_right/left ESM-RISM 計算における溶媒領域の遠方側の端の位置を指定します。

laue\_starting\_right/left ESM-RISM 計算における溶媒領域の開始位置を指定します。

laue\_buffer\_right/left ESM-RISM 計算における溶媒のバッファ領域の位置を指定します。

- Run only 1D-RISM ここをチェックした場合は、pw.x の代わりに 1drism.x を実行します。DFT 計算は実行されません。溶媒原子間相関関数や溶媒間の化学ポテンシャルのみを知りたい ときに有効です。
- **rism3d\_conv\_level** SCF 計算の各ステップにおける 3D-RISM 計算の打ち切り誤差を、動的に 変化させる際のパラメータを指定します。

rism1d/rism3d\_maxstep 1D および 3D-RISM の最大反復回数を指定します。

rism1d/rism3d\_conv\_thr 1D および 3D-RISM の打切り誤差を指定します。

mdiis1d/3d\_size MDIIS アルゴリズムによる RISM 計算の収束パラメータを指定します。

mdiis1d/3d\_step MDIIS アルゴリズムによる RISM 計算の収束パラメータを指定します。

**Other** タブ QEの入力ファイルの書式 (FORTRANの namelist 形式) で、その他の設定を記入しま す。記入例は、ポインタを重ねると表示されます。

Options

Verbosity QE が出力する情報量を指定します。

- atomic\_position unit ATOMIC\_POSITIONS および CELL\_PARAMETERS の単位を指定します。
- Use max\_seconds チェックを入れた場合、ここに入力した秒数の経過後 QE の処理が中断されます。
- **Make a Backup of Working Directory** Output Directory が Create の際に、作成される\_qe\_data フォルダが既に存在する場合、フォルダ名末尾に数字を付加して既に存在するフォルダを バックアップします。
- Dump all files for remote Linux 環境でのジョブ実行に必要なファイルを出力します。リモートジョブ投入機能で生成されるファイルと同じファイルが出力されます。
- **Open k-path file** ibrav (ブラベ格子)の種類ごとにデフォルトで指定する k 点パスを記述する 設定ファイル (UserPref/kpath\_default.txt)を開きます。UserPref/kpath\_default.txt が存在し ない場合は wmx/kpath\_default.txt からコピーされます。

Use RISM-enabled QE RISM が実装された QE を使う場合にチェックを入れます。

Properties タブ

Calculate these properties after pw.x pw.x 実行直後に実行されるポスト処理を選択します。こ こで選択した処理の各種パラメータは右の Parameter/Value 欄にて指定します。

Pseudo Potentials タブ

Mass 各元素の質量を指定します。

Default 標準的な質量を設定します。

Light 全元素の質量を1に設定します。イオンの構造緩和の促進などの目的で使われます。

Manual 下のリスト内で、各元素に対し、ユーザーが個別に質量を設定します。

- Pseudo Potential 系内の全元素に共通して存在する種類の擬ポテンシャルをプルダウンで選択 できます。(Manual)を選んだ場合は、下のリスト内で、各元素に対し、ユーザーが個別に 擬ポテンシャルを設定します。擬ポテンシャルファイルは、pseudo Directory で指定した フォルダの中から検索されます。UserPref/qe\_pseudo\_priority\_list.txt の先頭に書かれたも のが優先的に選択されます。
- **Reload pseudo Files** pseudo Directory で指定したフォルダに配置された擬ポテンシャルファイ ルを再度読み込みます。
- **pseudo Directory** 擬ポテンシャルファイルを配置するフォルダを指定します。*pseudo in QE's directory* の場合は、QE のインストールディレクトリ以下の pseudo フォルダを用います。 (*select...*)の場合は、ダイアログで選択したディレクトリを用います。

**Open Pseudo Directory** pseudo Directory で指定したフォルダを開きます。

- Download Pseudo Files 擬ポテンシャルファイルをダウンロードしてインストールします。
- **Open Priority List** UserPref/qe\_pseudo\_priority.txt を開きます。存在しない場合は wmx/qe\_pseudo\_priority.txt からコピーされます。

## 6.17.2 実行

Quantum ESPRESSO を実行します。状況に応じて実行方法が異なります。

CPMD を選択したときは cp.x、それ以外の時は pw.x が実行されます。

- (デフォルト) Output Directory = Create の時は、作業ディレクトリを新規に作成して計算を 実行します。
- Output Directory = Continue の時は、その時メインウィンドウで開いている入力ファイルの outdir を作業ディレクトリとして使用します。
- Output Directory = Select の時は、選択したフォルダを作業ディレクトリ(outdir)として使用 します。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが si.pwin の時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	説明
	計算のログファイルです。
pwout ファイル si.pwout	
<b>batファイル</b> si.bat	Quantum ESPRESSO を実行するためのバ ッチファイルです。
作業ディレクトリ si_qe_data\	作業ディレクトリです。

作業ディレクトリには以下のファイルが生成されます。ここ	ここでは主要なファイルのみ示しています。
-----------------------------	----------------------

種類	説明
擬ポテンシャルファイル *.UPF	計算に使用する擬ポテンシャルファイ ルは ここにコピーされ、 ESPRESSO_PSEUDO 環境変数は 作業ディレクトリに設定されます。
gmx_tmp.mdp	計算条件を指定するファイルです。
pw_bands.in	ポスト処理で bands 計算を実行する際の 入力ファイルです。
pw_bands.out	pw_bands.inのログファイルです。
pw_dos.in	ポスト処理で dos 計算を実行する際の入 カファイルです。
pw_dos.out	pw_dos.inのログファイルです。
ph.in	ポスト処理で ph.x を用いてフォノン計 算を 実行する際の入力ファイルです。
ph.out	ph.in <b>のログファイルです。</b>

## ヒント: 作業ディレクトリ

- 作業ディレクトリとは、メインウィンドウで開かれているファイルの名前に接尾辞 を加えた名前のフォルダです。
  - 接尾辞はソルバの種類により変わります。
  - 例えば Gromacs の場合は、メインウィンドウで開かれているファイルが aaa.gro で、接尾辞が \_gmx\_tmp の場合、作業ディレクトリの名前は aaa\_gmx\_tmp と なります。
- メインウィンドウで開かれているファイルと同じ階層に置かれている必要があります。

- 継続ジョブの時も同名の作業ディレクトリで処理が流れますが、デフォルトでは継続ジョブの実施直前に、直前のジョブの作業ディレクトリのバックアップが作成されます。
  - バックアップの名前は、重複する名前が存在しない範囲で一番小さい番号が付 いたものになります。例えば、作業ディレクトリが aaa\_gmx\_tmp のときは aaa\_gmx\_tmp1 となります。
  - 番号が付いていないディレクトリが常に最新のものとなります。

ジョブは Winmostar Job Manager を通じて実行されます。

### 6.17.3 ログを表示

ログファイルをテキストエディタで開きます。

## **6.17.4** アニメーション

#### 構造最適化/BOMD(pwout)

ログファイルの情報から構造最適化、BOMD 計算等のアニメーションを作成し表示します。 CPMD の場合は *CPMD(pos)* を使用してください。

アニメーション表示の操作方法はAnimation ウィンドウを参照してください。

#### CPMD(pos)

CPMD の pos ファイルと cel ファイルを指定し、アニメーションを表示します。 pw.x の結果を表示する場合は 構造最適化/BOMD(pwout) を使用してください。 アニメーション表示の操作方法は Animation ウィンドウ を参照してください。

## 6.17.5 エネルギー変化

#### SCF エネルギー変化 (pwout)

ログファイルを選択し、total energy のグラフを表示します。 CPMD の場合は *CPMD* エネルギー変化 (*evp*) を使用してください。 **Draw** グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。 Close ウィンドウを閉じます。 グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### CPMD エネルギー変化 (evp)

CPMD の evp ファイルを指定し、各種エネルギーの時間変化を表示します。 Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。 Close ウィンドウを閉じます。 グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

### 6.17.6 結果解析

#### 電子密度

作業ディレクトリ (outdir)を指定し、等電子密度面を表示します。 バックグラウンドでは pp.x が流れ、cube ファイルが生成されます。 サブウィンドウの操作方法は *MO Plot* ウィンドウ を参照してください。

#### Lowdin 電荷

作業ディレクトリ (outdir) を指定し、点電荷を算出・表示します。 バックグラウンドで projwfc.x が流れます。

#### ポテンシャルエネルギー分布

作業ディレクトリ (outdir) と SCF 計算のログファイルを指定し、z 軸方向のポテンシャルエネルギー 分布を表示します。

SCF 計算のログからはフェルミエネルギーを取得します。フェルミエネルギーとポテンシャルエネルギー分布の最大値の差を、仕事関数の推定値として表示します。バックグラウンドで pp.x と average.x が流れます。

Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### バンド構造

作業ディレクトリ (outdir) と SCF 計算のログファイルを指定し、バンド構造を表示します。

事前に calculation=bands で計算が終了している必要があります。SCF 計算のログファイルからは フェルミエネルギーを取得します。バックグラウンドで bands.x が流れます。

Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

### 状態密度

作業ディレクトリ (outdir) と SCF 計算のログファイルを指定し、状態密度を表示します。

SCF 計算のログファイルからはフェルミエネルギーを取得します。バックグラウンドで dos.x が流 れます。

Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 部分状態密度

作業ディレクトリ (outdir) と SCF 計算のログファイルを指定し、部分状態密度 (PDOS) を表示します。 SCF 計算のログからはフェルミエネルギーを取得します。バックグラウンドで projwfc.x が流れます。 Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。 Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### フェルミ面

SCF 計算と bands 計算のログファイルを指定し、フェルミ面を表示します。

フェルミ面の表示には FermiSurfer を使用します。# of K Points に bands 計算時の k 点分割数を指定し、 Calc ボタンを押すとフェルミ面が表示されます。

#### 誘電関数

誘電関数計算後の作業ディレクトリを指定し、誘電関数を表示します。

Direction 取得する誘電関数の方向を指定します。

Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

IR/ラマンスペクトル

フォノン計算後の作業ディレクトリと SCF 計算のログを指定し、IR およびラマンスペクトルを表 示します。

サブウィンドウの操作方法は IR Spectrum ウィンドウ を参照してください。

#### フォノン分散曲線

フォノン分散計算後の作業ディレクトリを指定し、フォノン分散曲線を表示します。

ASR 適用する Acoustic Sum Rule の種類を指定します。

K Points 取得する分散曲線のパスを指定します。各行には、x, y, z 成分をそれぞれ 2pi/a の単位で 記述し、その横に次の点までの間の分割数を記述します。(合計 4 カラムをスペース区切りで 入力)

Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### フォノン状態密度

フォノン分散計算後の作業ディレクトリを指定し、フォノン状態密度を表示します。

ASR 適用する Acoustic Sum Rule の種類を指定します。

**K Points** フォノン DOS 計算時の K 点の分割数を指定します。

Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 電荷/エネルギー分布 (esm1)

ESM 計算(assume\_isolated=esm)で出力される esm1 ファイルを指定し、z 軸方向の電荷またはエネルギーの分布を表示します。

2 つの esm1 ファイルの差をプロットすることもできます。

Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 1D-RISM RMS 变化 (pwout)

RISM 計算(trism=.True.)の最初に実行される 1D-RISM 計算の RMS の変化をプロットします。

Draw グラフを表示します。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 3D/Laue-RISM RMS 变化 (pwout)

RISM 計算 (trism=.True.) 実行時の、最後の SCF ステップにおける 3D-RISM または ESM-RISM 計 算の RMS の変化をプロットします。

Draw グラフを表示します。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 溶媒原子間相関関数 (1drism)

RISM 計算(trism=.True.) で出力される 1drism ファイルを用いて RISM 領域の原子間相関関数 (動 径分布関数) を算出します。

Obtain Chemical Potentials 溶媒分子間の化学ポテンシャルを csv 形式で出力します。

Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 溶媒密度/エネルギー分布 (rism1)

RISM 計算(trism=.True.) で出力される rism1 ファイルを用いて、DFT 領域-RISM 領域が接する方向(界面垂直方向)の溶媒密度・エネルギー・電荷を算出します。

Draw グラフを表示します。必要に応じて結果解析用プログラムが実行されます。

Close ウィンドウを閉じます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

## 6.17.7 MOL ファイルを作成

RISM 計算(trism=.True.)で使用される溶媒の MOL ファイルを作成します。溶媒分子を1分子メ インウィンドウに作成した上で本機能を呼び出してください。LAMMPS の data 形式を入力にする 際には Use parameters in displayed file にチェックを入れてください。

作成したファイルは MOL ファイルのキーワード設定ウィンドウの RISM(1) タブの Directory for MOL Files で指定したフォルダに配置してください。

### 6.17.8 Nudged Elastic Band

#### キーワード設定

NEB 計算の条件を設定します。

始状態と終状態それぞれの構造最適化計算を終えた状態で設定してください。

#### 実行

neb.x を用いて NEB 計算を実行します。

### 遷移状態

NEB 計算後のファイルを指定し、反応座標に沿ったエネルギーと原子構造の変化を表示します。 アニメーション表示の操作方法は Animation ウィンドウ を参照してください。

### 6.17.9 BoltzTraP

BoltzTraP では、QuantumESPRESSO での nscf 計算のアウトプットをもとに熱電特性の計算を行います。

#### キーワード設定・実行

BoltzTraPを用いたプリ・ポスト処理の計算条件を設定し、プリ処理の実行を行います。 *Create .intrans* ファイルボタン Quantum ESPRESSOのnscf 計算のアウトプットファイル (*.pwout*)を読み込み、*BoltzTraP* 設定ファイル(.intrans)を生成します。アウトプットファイルを仮に mg2si\_nscf.pwout とすると、同じ階層に mg2si\_nscf という名前の作業ディレクトリを生成します。mg2si\_nscf.intrans は mg2si\_nscf 内に生成されます。

intrans ファイルの作成に成功した場合、ファイルの内容を読み込み、下記キーワードの 入力欄に反映します。

Fermilevel (Ry) pwout ファイルから読み込んだフェルミエネルギーが設定されています。

energy grid 設定エネルギーの間隔を指定します。

energy span フェルミレベル周辺の計算に考慮に入れるバンドエネルギーの範囲を指定します。

number of electrons 単位格子内の電子の個数を指定します。

lpfac バンドエネルギーをフーリエ展開によって補完する際の因子を指定します。

efcut 化学ポテンシャルを変えて計算する範囲を指定します。

Tmax 設定温度の上限値を指定します。

temperature grid 設定温度の間隔を指定します。

energy of bands DOS から得られたバンドのエネルギー幅を指定します。

Calculate expansion coeff チェックが入っている場合、膨張係数を計算を計算します。

Start BoltzTraP ボタン

設定条件を元に intrans ファイルを再作成し、BoltzTraP を実行します。このとき、以下の ファイルとフォルダが生成されます。

下記では、計算終了時点での作業ディレクトリ(mg2si\_nscf)内の主なファイルを記載します。

種類	前明
	BoltzTraP のインプットファイルです。
.intfans ファイル	
mg2si_nscf.intrans	
	BoltzTraP で計算された熱電特性のエネル
	ギー、温度依存性に関する情報が出力さ
	れたファイルです。BoltzTraP 結果読み込
mg2si_nscf.trace	みメニューではこのファイルを読み込み
	可視化を行います。

Cancel ボタン

何もせずにキーワード設定・実行ウィンドウを閉じます。

#### 結果読み込み

BoltzTraP によって計算された下記の熱電特性を読み込み、可視化を行います。

- ゼーベック係数 (Seebek coefficient)
- 電気伝導度 (Electrical conductivity)
- 熱伝導率 (Electrical thermal conductivity)

- 出力因子 (Power factor)
- 性能指数 (Figure of merit)

各温度における特性値のエネルギー依存性を表示したい場合はコンボボックスから T [K] を選択し、 リストから目的の温度を選択します。各エネルギーにおける特性値の温度依存性を表示したい場合 はコンボボックスから E-Ef [eV] を選択し、リストから目的のエネルギーを選択します。

## 6.17.10 Phonopy

Phonopy では、以下の3つの工程で計算を行います。

- 1. 与えられた Quantum ESPRESSO インプットファイルを元にスーパーセルを作成する。 (プリ 処理)
- 2. 生成された全てのスーパーセルに対し、Quantum ESPRESSO を実行する。
- 3. Quantum ESPRESSO のアウトプットファイルから、ForceSets ファイルを作成し、Phonon バンド、DOS、熱物性などの計算を行う。(ポスト処理)

### キーワード設定・実行

Phonopy を用いたプリ・ポスト処理の計算条件を設定し、プリ処理の実行を行います。

- *Open* ボタン Quantum ESPRESSO のインプットファイル (\*.in,\*.pwin)を読み込みます。Phonopy でのポスト処理では、応力の情報を必要とします。このため読み込むファイルは tprnfor, tstress キーワードを含んでいる必要があります。Phonopy 用の Quantum ESPRESSO のインプットファ イルは、Quantum ESPRESSO キーワード設定の Preset=Phonopy を使用することで設定でき ます。
- DIM スーパーセルの x, y, z 方向のリピート回数を半角スペース区切りで指定します。

MP Phonopy で Phonon DOS や熱物性の計算を行う際の逆格子を半角スペース区切りで指定します。

ATOM\_NAME 単位格子に含まれる元素を半角スペース区切りで指定します。Open ボタンでイン プットファイルを開いた時点で自動的に入力されます。

Start ボタン

設定条件を元に Phonopy を実行し、プリ処理であるスーパーセルの作成を実行します。このとき、以下のファイルとフォルダが生成されます。

種類	説明
	Phonopyのプリ処理を実行するためのバッ チコュイルです
bat ファイル	<i>F J <i>F J F J F J F J F J F J F J F J F J <i>F J <i>F J F J F J F J <i>F J F J F J F J F J F J F J F J F J F J F J F J F J F J F J F J F J F J <i>F J F J F J F J <i>F J F J F J F J <i>F J F J <i>F J F J <i>F J F J F J <i>F J F J <i>F J F J F J <i>F J <i>F J F J <i>F J F J <i>F J F</i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i></i>
si.bat	
	Phonopy のフリ処理を実行するためのシェ
sh ファイル	ルスクリフトファイルです。
si.sh	
	計算の作業ディレクトリです。
si_ph_data フォルダ	
 si_ph_data	

種類	前明
<b>mesh.conf ファイル</b> mesh.conf	Phonopyのポスト処理にて、状態密度や熱物性を計算するときに使用されます。
band.confファイル	Phonopyのポスト処理にて、バンド構造を
band.conf	計算するときに使用されます。
<b>headerファイル</b>	si.pwin で指定された構造情報以外のキー
header.in	ワード情報が記載されています。
supercellファイル supercell-*.in	Phonopy により生成されたスーパーセル の情報が Quantum ESPRESSO のイン プットファイル形式で記載されています。 スーパーセルのパターンは複数生成され るため、*の部分には 1, 2, などの数字が 入ります。
<b>tmpファイル</b>	header.inと supercell-*.inを結合したファ
tmp-*.in	イルです。

作業ディレクトリ si\_ph\_data には以下のファイルが生成されます。

Cancel ボタン

何もせずにキーワード設定・実行ウィンドウを閉じます。

### conf ファイル編集

conf ファイルをテキストエディタで開きます。キーワード設定画面で設定したキーワードを編集したい場合に用います。

#### Quantum ESPRESSO 連続実行

キーワード設定・実行画面で生成された、全てのスーパーセルに対し、Quantum ESPRESSO を実行 します。このメニューを用いた場合、Quantum ESPRESSO はローカル環境で実行されます。

### **Phonopy** 実行

Phonopy のポスト処理を実行します。

この時、作業フォルダ:file: si\_ph\_data に以下のファイルが生成されます。

種類	説明
	Phonopy のポスト処理を実行するための
shファイル phonopy.sh	シェルスクリプトです
<b>band.yamlファイル</b> band.yaml	Phonopy のポスト処理で計算されたバン ド構造の情報が出力されています。
dos.dat ファイル dos.dat	Phonopy のポスト処理で計算された状態 密度の情報が出力されています。
thermal_properties.yamlファイル thermal_properties.yaml	Phonopy のポスト処理で計算された熱物 性の情報が出力されています。

## バンド構造

作業フォルダに含まれる band.csv をもとにバンド構造を表示します。

### 状態密度

作業フォルダに含まれる toal\_dos.csv をもとに状態密度を表示します。

### 熱物性

作業フォルダに含まれる thermal\_properties.csv をもとに熱物性を表示します。

# 6.18 固体 → *OpenMX* メニュー

OpenMX に関するメニューです。

## 6.18.1 キーワード設定

OpenMXの計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は*Run*ボタン、一旦メインウィンドウに戻る場合はOKボタンを押してください。

Run をクリックしたときの挙動は実行を参照してください。

*Reset* ボタンでデフォルトの状態に戻ります。*OK* ボタンで設定内容を反映してメイン画面に戻ります。*Cancel* ボタンで何もせずに Window を閉じます。

本機能を呼び出すときに、メインウィンドウに表示された構造がプリミティブセルに変化できる場 合は、自動で 格子を変換 が実行されます。 Preset 設定のプリセットを選択します。

- Use MPI OpenMX の実行時に MPI を用いて並列計算を実行するか指定します。横の欄には MPI プロセス数を入力します。
- **Use OpenMP** OpenMX の実行時に OpenMP を用いて並列計算を実行するか指定します。横の欄に は OpenMP スレッド数を入力します。

SCF タブ

- **XcType** 交換相関ポテンシャルを指定します。「LDA」、「LSDA-CA」、「LSDA-PW」、「GGA-PBE」が指定できます。ここで「LSDA-CA」は Ceperley-Alder の局所スピン密度関数、「LSDA-PW」は、その GGA 形式において密度勾配をゼロとした Perdew-Wang 局所スピン 密度関数です。「GGA-PBE」は Perdew らが提案する GGA 汎関数です。
- SpinPolarization 電子系の非スピン分極あるいはスピン分極を指定します。スピン分極の計算を行う場合は「ON」を指定し、非スピン分極の計算を行う場合は「OFF」を指定します。前述の2つのオプションの他、ノンコリニアDFT計算を行う場合には「NC」というオプションを指定して下さい。
- **EigenvalueSolver** 固有値問題の計算手法を「scf.EigenvalueSolver」で指定します。O(N) 分割 統治法は「DC」、O(N) クリロフ部分空間法は「Krylov」、数値厳密な低次スケーリング法 は「ON2」、クラスタ計算は「Cluster」、バンド計算は「Band」を指定します。
- Kgrid OpenMX では等間隔メッシュにより k 空間の第 1 ブリルアンゾーンを離散します。その際、「scf.EigenvalueSolver」キーワードにて「Band」を指定する場合、k 空間の第 1 ブリルアンゾーンを離散化するための 格子の数 (n1, n2, n3)を「scf.Kgrid」キーワードで指定しなければなりません。k 空間の逆格子ベクトルを離散化するために「n1 n2 n3」のように指定して下さい。

**ElectronicTemperature** 電子温度(K)を設定します。

- energycutoff 積分グリッド間隔を定義するカットオフエネルギーを指定します。この積分グ リッドは差電子クーロンポテンシャルと交換相関ポテンシャルに対する行列要素の計算、 および高速フーリエ変換(FFT)を用いた Poisson 方程式の 解法のために使用されます。
- maxIter SCFの最大反復回数を設定します。SCF反復ループは、収束条件が満たされない場合でもこのキーワードで指定した回数で終了します。
- ProExpn.VNA 中性原子ポテンシャル VNA を射影演算子で展開する場合には、「ON」に設定 し、それ以外の場合は「OFF」を設定して下さい。「OFF」と設定されている場合、VNA ポテンシャルの行列要素は実空間の離散グリッドを用いて計算されます。
- Mixing.Type SCF 計算の次の反復ステップに入力される電子密度(もしくは密度行列)を生成 するための電子密度混合法を指定します。単純混合法(「Simple」)、Guaranteed-Reduction Pulay 法(「GR-Pulay」)、RMM-DIIS 法(「RM-DIIS」)、Kerker 法(「Kerker」)、あるい は RMM-DIISK 法(「RMM-DIISK」)、RMM-DIISH 法(「RM-DIISH」)のいずれかを指 定することができます。OpenMX の単純混合法は収束の速度を上げるために収束履歴を 参照するように改良されています。「GR-Pulay」、「RMM-DIIS」、「Kerker」あるいは 「RMM-DIISK」を使用する際には、以下の点に注意することで SCF 計算の高速化が可能 です。\* Pulay 法に準拠する方法で混合を開始する前にある程度の収束が必要です。そのた め、やや大きめの「scf.Mixing.StartPulay」の値を使用します。「scf.Mixing.StartPulay」の 適切な値は 10~30 です。\* 金属系の場合は高い「scf.ElectronicTemperature」の値を使用し ます。「scf.ElectronicTemperature」が小さいと数値的に不安定な挙動がよく見られます。\* 「scf.Mixing.History」の値を大きくします。ほとんどの場合、「scf.Mixing.History=30」が 妥当な値です。また前述した混合法のうち、一番ロバスト性が高いのは「RMM-DIISK」 です。
- Init.Mixing.Weight 単純法、GR-Pulay 法, RMM-DIIS 法、Kerker 法、RMM-DIISK 法 および RMM-DIISH 法で使用する初期の混合比を指定します。 有効な範囲は

0<Init.Mixing.Weight<1 です。

Min.Mixing.Weight 単純および Kerker 混合法における混合比の下限を指定します。

Max.Mixing.Weight 単純および Kerker 混合法における混合比の上限を指定します。

- Mixing.History GR-Pulay 法、 RMM-DIIS 法、 Kerker 法、 RMM- DIISK 法及び RMM-DIISH 法では、 SCF の次の反復ステップにおける入力電子密度(ハミルトニアン)を、過去の SCF 反復の電子密度(ハミルトニアン)に基づき推定します。「 scf.Mixing.History」キーワードは、この推定に使用する過去の SCF 反復ステップ数を指定します。例えば、「 Mixing.History」が3に設定されている場合、6回目の SCF 反復では過去の第5、4、3 ステップの電子密度が考慮されます。
- Mixing.StartPulay GR-Pulay 法、RMM-DIIS 法、Kerker 法、RMM-DIISK 法および RMM-DIISH 法を開始する SCF ステップを指定します。 これらの方法を開始するまでの SCF ステップでは単純あるいは Kerker 混合法が使用されます。
- **criterion** SCF 計算の収束条件を指定します(Hartree 単位)。 SCF 反復は dUele < scf.criterion という条件が満たされると終了します。ここで dUele とは、現在の SCF 反復とひとつ前の反復とのバンドエネルギーの絶対差です。 デフォルト値は 1.0e-6 (Hartree 単位)です。

SCF.Hubbard タブ

Hubbard.U LDA+U および GGA+U 計算の場合、「ON」に設定します。

**Hubbard.Occupation** LDA+U 法では、「onsite」、「full」および「dual」の3つの占有数演算子 から選択することができます。

OrderN タブ

- HoppingRanges 各原子を中心とする球の半径 (ÃĚ) を定義します。DC 法および O(N) クリロ フ部分空間法では、この球内に含まれる原子を選択することで切り取られたクラスタが構 成されます。
- KrylovH.order 切り取られた各クラスタのハミルトニアンに対し、クリロフ部分空間の次元 を指定します。
- KrylovS.order 後述のキーワードで「Exact.Inverse.S=off」に設定した場合、重なり積分の逆行 列は クリロフ部分空間法を用いて近似されます。 この時、切り取られた各クラスタに対 する重なり行列のクリロフ部分空間法の次元を指定します。
- Exact.Inverse.S 「on」に設定すると、切り取られた各クラスタの重なり行列の逆行列は厳密 に評価されます。「off」に設定する場合は前述のキーワード「KrylovS.order」の項を参 照して下さい。
- **Recalc.Buffer** 「on」に設定すると、バッファ行列は各 SCF 反復毎に再計算されます。「off」の場合にはバッファ行列は初回の SCF ステップで計算され、その後の SCF 反復では固定 されます。
- Expand.Core 「on」に設定すると、コア領域は半径 1.2 × r<sub>min</sub> の球の中にある 原子から構成 されます。ここで r<sub>min</sub> は、中心原子と最隣接原子間の距離です。このコア領域はクリロフ 部分空間を生成するときの第1ステップで使用されるベクトル群を定義します。「off」の 場合、中心の原子がコア領域と見なされます。

MD タブ

Type 分子動力学計算あるいは構造最適化のタイプを指定します。現在使用できるオプション は以下の通りです。MD 無し(「Nomd」)、原子座標の構造最適化(「Opt」)、ユニットセ ルの自由度も含めた構造最適化(「RFC5」)、NVE アンサンブル MD(「NVE」)、速度ス ケーリング法による NVT アンサンブル MD(「NVT\_VS」)、Nose-Hoover 法による NVT アンサンブル MD(「NVT\_NH」)

maxIter MD 計算や構造最適化計算における最大の反復回数を指定します。

TimeStep 時間ステップ(fs)を指定します。

- **Opt.criterion**「Type」キーワードによって構造最適化の方法を選択している場合には、 「Opt.criterion」キーワードでその収束条件(Hartree/Bohr)を設定します。原子にかかる 力の最大絶対値が、ここで指定した値より小さくなった場合に、構造最適化は終了します。
- **Opt.DIIS.History** 「DIIS」、「EF」、「RF」による構造最適化を行う場合、「Opt.DIIS.History」 キーワードは構造最適化のために参照する過去のステップ数を指定します。
- **Opt.StartDIIS**「DIIS」、「EF」、「RF」による構造最適化を開始するステップを「Opt.StartDIIS」 キーワードで指定します。DIIS タイプの構造最適化を開始する以前のステップでは最急 降下法が使用されます。
- **NH.Mass.HeatBath**「Type」キーワードによって「NVT\_NH」を選択した場合、このキーワードで熱浴の質量を設定します。単位は統一原子質量単位です(炭素原子の主同位体の質量 を 12.0 とする単位)。
- TempControl MD および NVT アンサンブルにおける原子運動の温度を指定します。 「NVT\_VS」を選択した場合、原子運動の温度を下記の例のように制御できます。:

```
<MD.TempControl

3

100 2 1000.0 0.0

400 10 700.0 0.4

700 40 500.0 0.7

MD.TempControl>
```

記述は「<MD.TempControl」で開始し、「MD.TempControl>」で終わります。最初の数字「3」は、続く温度指定の行数を指します。例では3行あります。後続する行の第1列はMDステップ数を指し、第2列は速度スケーリングを行うMDステップの間隔を指定します。例では、100ステップ目までは2ステップ毎に、100~400ステップ間は10ステップ 毎に、400~700ステップ間は40ステップ毎に速度スケーリングを行います。第3、4列 はそれぞれ温度(K)とスケーリングパラメータ $\alpha$ を指定します。詳細は「分子動力学」の章を参照して下さい。一方、NVT\_NHの場合、以下の記述で原子運動の温度を制御で きます。:

```
<MD.TempControl

4

1 1000.0

100 1000.0

400 700.0

700 600.0

MD.TempControl>
```

記述は「<MD.TempControl」で開始し、「MD.TempControl>」で終わります。 最初の数字 「4」は、続く温度指定の行数を指します。 この例では 4 行あります。 後続する行の第 1、 2 列は、それぞれ MD ステップ数と原子運動の温度を指定します。 指定された MD ステッ プ間の温度は線形補完されます。

```
File タブ
```

- level.of.stdout 標準出力への出力情報のレベルを指定します。「0」を指定した場合、最小限の 情報が出力されます。「1」の場合、最小限の出力に加えて追加の情報が出力されます。「2」 は開発者向けのオプションです。
- level.of.fileout 出力ファイルへの出力情報のレベルを指定します。「0」を指定した場合、最小 限の情報が出力されます(Gaussian cube およびグリッドファイルの出力無し)。「1」は標 準的な出力情報レベルです。「2」の場合、標準の出力に加えて追加の情報が出力されます。

Bands/DOS タブ

#### Band

dispersion バンド分散を評価するには「ON」に設定します。

#### DOS

- **fileout** 全状態密度(DOS)および射影した部分状態密度(PDOS)を評価する場合は「ON」 に設定します。
- Erange DOS 計算におけるエネルギー範囲(下限値と上限値)を半角スペース区切りで指定します。
- **Kgrid** DOS 計算を行う上で、第1ブリルアンゾーンを離散化するために (n1, n2, n3) の格 子点を指定します。

#### MOタブ

fileout 分子軌道をファイルに出力したい場合は、「ON」を指定します。

num\_HOMOs 出力する最高被占分子軌道(HOMO)の数を指定します。

num\_LUMOs 出力する最低空分子軌道(LUMO)の数を指定します。

Nkpoint 「fileout」を「ON」および SCF タブの「EigenvalueSolver」を「Band」を設定してい る場合、「Nkpoint」キーワードで MO を出力する k 点の数を指定します。

### Species タブ

Atom 原子種の名前を指定します。

- Basis プリミティブ軌道の数および縮約された軌道の数を指定します。
- PAO 擬原子基底軌道の拡張子無しのファイル名を指定します。
- VPS 擬ポテンシャルの拡張無しファイル名を指定します。

Atoms.Coord.Unit 原子座標の単位を指定します。

## 6.18.2 実行

OpenMX を実行します。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが dia.mxin、System.Name が wm のときのファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	説明
bat ファイル	OpenMX を実行するためのバッチファイ ルです。CygwinWM 経由で dia.sh を実行 します。
dia.bat	
<b>shファイル</b> dia.sh	OpenMX を実行するためのシェルスクリ プトファイルです。
	dia.sh のログファイルです。
log ファイル	
dia.log	
<b>mxout ファイル</b> dia.mxout	計算の出力ファイルです。作業ディレクト リ内の wm.out のコピーです。
作業ディレクトリ dia_mx_data\	作業ディレクトリです。

作業ディレクトリには以下のファイルが生成されます。ここでは主要なファイルのみ示しています。

166

種類	説明
tmp.dat	計算条件を指定するファイルです。 dia.mxin のコピーです。
tmp.std	OpenMX の標準出力をリダイレクトした ファイルです。
wm.out	SCF 計算の履歴、構造最適化の履歴、 Mulliken 電荷、全エネルギー、および双 極子モーメントが保存されます。
vm.xyz	MD または構造最適化により得られた最 終的な幾何学的構造が保存されます。
wm.bulk.xyz	「scf.EigenvalueSolver=Band」の場合、 コピーされたセルの原子を含む原子座標 が出力されます。
vm.md	各 MD ステップごとの原子座標が保存さ れます。
vm.md2	最終 MD ステップにおける原子座標が保 存されます。指定した原子種記号を用い て原子が指定されています。
m.ene	MD ステップごとの計算値が保存されま す。保存されている各数値の内容は 「iterout.c」ルーチン中で確認できます。
m.Band	バンド分散のデータファイルが保存され ています。
m.Dos.val	状態密度を計算するための固有値のデー タファイル。
m.Dos.vec	<del>状態密度を計算するための固有ベクトル</del> のデータファ <b>朶りppter 6</b> . 各種メニュー・
wm.tden.cube	Gaussian cube 形式の全電子密度が保存さ

ヒント: 作業ディレクトリ

- 作業ディレクトリとは、メインウィンドウで開かれているファイルの名前に接尾辞 を加えた名前のフォルダです。
  - 接尾辞はソルバの種類により変わります。
  - 例えば Gromacs の場合は、メインウィンドウで開かれているファイルが aaa.gro で、接尾辞が \_gmx\_tmp の場合、作業ディレクトリの名前は aaa\_gmx\_tmp と なります。
- メインウィンドウで開かれているファイルと同じ階層に置かれている必要があります。
- 継続ジョブの時も同名の作業ディレクトリで処理が流れますが、デフォルトでは継続ジョブの実施直前に、直前のジョブの作業ディレクトリのバックアップが作成されます。
  - バックアップの名前は、重複する名前が存在しない範囲で一番小さい番号が付 いたものになります。例えば、作業ディレクトリが aaa\_gmx\_tmp のときは aaa\_gmx\_tmp1 となります。
  - 番号が付いていないディレクトリが常に最新のものとなります。

ジョブは Winmostar Job Manager を通じて実行されます。

### 6.18.3 ログを表示 (mxout)

ログファイルをテキストエディタで開きます。

## 6.18.4 アニメーション (md)

md ファイルの情報から構造最適化、分子動力学計算等のアニメーションを作成し表示します。 アニメーション表示の操作方法は Animation ウィンドウ を参照してください。

#### 6.18.5 結果解析

#### 電子密度/スピン密度/エネルギー分布

cube ファイルを指定し、電子密度、スピン密度、エネルギー分布を表示します。 サブウィンドウの操作方法は *MO Plot* ウィンドウ を参照してください。

バンド構造

作業ディレクトリ (dia\_mx\_data\)を指定し、バンド構造を表示します。 Band.dispersion=on で計算が終了している必要があります。

#### 状態密度

作業ディレクトリ (dia\_mx\_data\)を指定し、状態密度を表示します。 Dos.fileout=on で計算が終了している必要があります。 グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### 部分状態密度

作業ディレクトリ (dia\_mx\_data\)を指定し、部分状態密度 (PDOS)を表示します。 Dos.fileout=on で計算が終了している必要があります。 グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

#### フェルミ面

作業ディレクトリ (dia\_mx\_data\) を指定し、フェルミ面を表示します。

フェルミ面の表示には FermiSurfer を使用します。# of K Points に bands 計算時の k 点分割数を指定し、 *Calc* ボタンを押すとフェルミ面が表示されます。

## 6.19 固体 → *FDMNES* メニュー

FDMNES に関するメニューです。

FDMNES をインストールする方法は インストール に記載しています。

### 6.19.1 キーワード設定

FDMNESの計算条件を設定します。設定後、すぐに計算を実行する場合は*Run*ボタン、一旦メインウィンドウに戻る場合はOKボタンを押してください。

Run をクリックしたときの挙動は実行を参照してください。

Reset ボタンでデフォルトの状態に戻ります。

**Target Atom** XANES スペクトルの測定対象の原子 (Absorber) を指定します。*Set Atom* ボタンをクリックすると、メインウィンドウでマーカーが付いた原子が設定されます。。

Edge 取得したい XANES スペクトルの電子殻を選択します。

Range 取得したい XANES スペクトルの範囲を指定します。

Cluster Radius FDMNES 内部にてシミュレーションセル(スーパーセル)を展開して作成される クラスタの半径を指定します。この値が大きいほどバルクの状態に近づきますが、処理速度は 低下します。

Method 計算手法を選択します。

Convolution ローレンツ関数で畳み込みブロードニングしたスペクトルを取得します。

Calc LDOS 局所状態密度(LDOS)を、ファイル名末尾が\_sd\*.txt となっているファイルの中に出力します。

Definition for Energy XANES スペクトルを表示する際の横軸(エネルギー)の定義を指定します。

## 6.19.2 実行

FDMNES を実行します。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。(主要なファイルのみ表示)例として入力ファイルが cu.fdmnesの時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	前明
	計算のログファイルです。
logファイル cu.log	
<b>bat ファイル</b> cu.bat	FDMNES を実行するためのバッチファイ ルです。
convファイル cu_conv.txt	XANES スペクトルなどのデータが記録さ れたテキストファイルです。

ジョブは Winmostar Job Manager を通じて実行されます。

## 6.19.3 ログを表示 (log)

ログファイルをテキストエディタで開きます。

## 6.19.4 結果解析

#### XANES スペクトル

conv ファイル(\*\_conv.txt)を選択し、XANES スペクトルを表示します。

## 6.20 ツールメニュー

## 6.20.1 環境設定

環境設定ウィンドウを開きます。詳細は ツール → 環境設定 メニュー を参照してください。

## 6.20.2 フラグメントを登録/削除

### フラグメントを登録

メインウィンドウに表示されている分子構造を部品として登録します。マーカー(太赤丸)の付い た原子が置換時に接続部分に設定されます。

#### フラグメントを削除

### 6.20.3 構造式を入力

構造式を入力することにより分子を作成します。内部では JSME が使用されます。

## 6.20.4 配座探索 (Balloon)

Balloon を用いて配座探索を行います。 Search ボタンをクリックすると処理が開始されます。 \*\_balloon\_tmp という作業フォルダに中間ファイルが生成されます。

本機能は以下のように動作しています。

1. 初期構造に対し、GA を使わず配座探索

Ballon オプション: -v 1 -c 10 -noGA -i 300 -randomSeed 51277

2.1の最もエネルギーが低い構造に対し、GAを使い配座探索

Ballon オプション: -v 1 -b -k -c 400 –full -R 0.25 –nGene 20 –random 51277

3.2のエネルギーが低い構造から4個に対し、GAを使わず配座探索

Ballon オプション: -v 1 -c 25 –noGA -i 300 –randomSeed 51277

- 4.3のエネルギーが低い構造から100個を抽出
- 5. Cluster similar structures にチェックが入っていた場合は、100 個の構造をクラスタリングし、 RMSD tolerance 以下の類似構造を集約して Winmostar で表示(ただし、簡易的なクラスタリ ングのため、候補が効率よく削減できない場合があります)

警告:本機能は、結合次数に影響を受けます。

### 6.20.5 点群解析

モデリングした分子の点群対称性を判定します。

本機能は主に以下の目的で使用されます。

- (1) モデリングした分子の点群解析を行います。
- (2) 判定された点群情報を元に分子の構造の歪みを解消します。(対称化)
- (3) 対称単位 非対称単位の変換を行えます。

金属を含まない有機分子であれば、一度クリーンを行った構造の方が点群解析が成功しやすくなり ます。

以下の機能を用いて点群解析を解析し可視化します。

Analyze 点群解析を開始します。

Accuracy 点群解析の解析精度を指定します。精度を上げると対称性の判定が厳しくなり、下げる と判定が甘くなります。 Shoenflies 分子の対称性を Shoenflies 記号で表示します。

i 点対称要素がリスト表示されます。

Cn Axis 回転対称要素がリスト表示されます。

Sn Axis 回映対称要素がリスト表示されます。

Mirror 鏡映対称要素がリスト表示されます。

Select リストされている全て対称要素が選択されグラフィック画面に表示されます。

Deselect リストされている全て対称要素の選択が解除されグラフィック画面で非表示になります。

Select All 全ての対称要素が選択されグラフィック画面に表示されます。

Deselect All 全て対称要素の選択が解除されグラフィック画面で非表示になります。

点群解析終了後、以下の操作で分子構造の対称化と、非対称単位と対称単位の間の切り替えが可能 になります。ただし、C1 以外の点群対称性だった場合に限ります。

Symmetrize 予測された点群情報に基づき、構造の歪み(完全な対称構造からのずれ)を解消します。

Show Symmetric Unit にチェックが入っていると対称単位を表示します。Asymmetric Unit にチェック が入っていると非対称単位のみを表示します。(非対称単位だけが表示された状態で GAMESS キーワード設定に進むと点群情報を引き継いでインプットを作成できます。)

右下のテキストエリア 分子の座標情報を XYZ 形式で表示します。

### 6.20.6 分子表面積,体積

分子表面積、体積、卵形度を計算します。

分子の表面積と体積の計算には函館高専の長尾先生のプログラムを使用しています。(長尾輝夫,分 子表面積及び体積計算プログラムの改良,函館工業高等専門学校紀要,第27号,p111-120,1993.)

- (1) van der Waals Moleuclar Surface (VMS): 原子を van der Waals 半径の球に置き換えた場合の表面
- (2) Accessible Molecular Surface: VMS 表面の周りを溶媒分子でなぞった際の溶媒分子の中心の面
- (3) Molecular Surface: VMS 表面の周りを溶媒分子でなぞった接触表面と凹角表面 (Solvent-excluded surface、または、Connolly surface とも呼ばれる)

卵形度 (Ovality) は以下の式で計算しています。

分子表面積/最小表面積 = S/4 $\pi$ (3V/4 $\pi$ )\*\*(2/3) 最小表面積 = 4 $\pi$ (3V/4 $\pi$ )\*\*(2/3) (分子体積が等しい真球の表面積)

## 6.20.7 アスペクト比

分子のアスペクト比を計算します。アスペクト比は、分子が内接する最小直径の円筒の長さLと直 径 D の比 L/D として定義しています。

### 6.20.8 慣性半径

分子の慣性半径を計算します。

## 6.20.9 Sterimol パラメータ

メインウィンドウ上でグループ選択した部分構造に対して、Sterimol パラメータを計算します。 *Calculate* ボタンをクリックすると計算が開始されます。

6.20.10 環構造の単位法線ベクトル

NICS 計算などにおいて必要な、環構造の単位法線ベクトルを表示します。対象となる環構造をグループ選択した上で本機能を呼び出してください。

例えばベンゼン環の場合は、ベンゼン環を構成する炭素6つをグループ選択します。

出力されるベクトルは以下のように計算されます。

- 1. グループされた原子のうち、共有結合する2原子のリストを作成します。
- 2.1 で作成されたリストの各2原子について、その2原子とグループ選択の幾何中心の3点で張られる平面に垂直なベクトルを算出します。
- 3.2 で算出したベクトルの平均を本機能で最終的に表示します。

## 6.20.11 プロジェクトブラウザ

プロジェクト内のファイルの管理を行うウィンドウを開きます。

## **6.20.12** ジョブマネージャ

ローカルジョブを管理する Winmostar Job Manager を起動します。

### **6.20.13** リモートジョブ投入

リモートジョブの実行、管理を行うウィンドウを開きます。詳細は Submit Job ウィンドウの各機能 を参照してください。

## 6.20.14 Cygwin

CygwinWM の端末画面 (ターミナル)を起動します。

### 6.20.15 単位を変換

原子・分子系に特化した単位の変換ツールを開きます。

### **6.20.16** 文字列を検索

各種ログファイルの中で文字列を検索し、ヒットした行を Excel またはテキストファイルに出力し ます。

## **6.20.17 bat** ファイル連続実行

Gaussian と GAMESS の bat ファイルを連続で実行します。

- 1. まず、通常の操作方法で Gaussian や GAMESS を実行します。実行中にコンソール画面 (DOS 画面)でエラーが出ていないことを確認してから、コンソール画面の×ボタンを押して処理を 途中で強制終了します。
- 2. 次に本機能を起動します。ウィンドウの左側のリストには 1. で実行されたジョブの bat ファイ ルが表示されます。
- 3. bat ファイルを選択して => ボタンを押すと、ウィンドウの右側のリストに追加されます。
- 4. *Run* ボタンを押すと右側のリストに登録されたジョブの連続実行が始まります。*Run at* ボタンを 押すと、指定した時刻に連続実行が始まります。連続実行ジョブは、winmos\_batjob\*.bat に保存されます。 *Save* および *Load* ボタンを押すと設定の保存、読み込みができます。

## 6.20.18 分子の重ね合わせ表示

複数の分子を重ね合わせて表示します。

- まず、Add ボタンでファイルを選択して、重ね合わせる分子を選択します。ファイルの種類は Winmostar で読み込める各種入力ファイルと MOPAC、GAMESS、NWChem、Gaussian の出力 ファイルです。複数のファイルを同時に選択することもできます。ドラッグ&ドロップでファ イルを読み込ませることもできます。Import From Main Window ボタンではメインウィンドウ に表示されている分子を取り込むことができます。
- 2. リストに表示されたファイル名を選択するとその分子が青くハイライトされます。
- 3. Delete ボタンで選択した分子を削除、 Clear ボタンで全ての分子を削除します。
- 4. *Align All* ボタンで各分子の配向を揃えることができます。それぞれの分子について3原子をクリックして指定すると、1点目を原点に、2点目をX軸上に、3点目をxy平面上に設定します。
- 5. 分子の構造が近い場合は、*X*,*Y*,*Z*ボタンを押して重ね合わせる面をずらします。
- 6. Open Viewer ボタンを押すと、Winmostar Viewer で表示することができます。

## 6.20.19 複数ファイルを SDF 形式に集約

複数のファイルを1つの SDF 形式のファイルに集約して保存します。選択されたフォルダの中に含まれる全てのファイルについて集約します。開く で開くことができるファイルの以外は読み込まれません。(拡張子で判断されます)

# 6.21 ツール → 環境設定 メニュー

Winmostar の各種の設定を行います。

### 基本タブ

言語 言語を選択します。

- ライセンスコード ライセンスコードを設定します。
- 内部 UNIX 環境 内部で使用する UNIX 環境に cygwin を使用するか Windows Subsystem for Linux(Bash on Ubuntu on Windows) を使用するか選択します。

- [ファイル]-[テキストエディタで開く] メニューにて旧エディタを使用 チェックが入っていた 場合は、 ファイル → テキストエディタで開く をクリックした際に、V8 までの 編集 → 直接編集 機能を使用します。入っていない場合は、 環境設定 → プログラムパス で Editor に設定したプログラムを使います。
- Zip の解凍に旧式 (V8 以前)のコードを使用 リモートジョブにおいて、リモートサーバから作 業ディレクトリの zip ファイルを get し解凍する際に使うコードを指定します。旧式のコー ドは巨大なファイル (数百 MB 以上)の解凍時にエラーを出します。
- **Xyz** ファイルの保存に旧式 (**V9**以前)のフォーマットを使用 xyz ファイル形式で保存する場合 に、V9以前でデフォルトとしていたヘッダのない xyz ファイルとして保存します。
- ChemDrawの MOL 形式を読み込み後結合長と水素を自動調整 ChemDrawの MOL 形式を読み込み後結合長と水素を自動調整します。

編集タブ

- 結合判定係数 原子間距離から共有結合の有無を判定する際の閾値を設定します。
- 編集中に Z-Matrix の結合関係を保持 チェックされている場合は、分子構造の編集時に Z-Matrix の結合関係が変わらないようにします。
- MOL 保存時に芳香環を単+二重結合に変換 MOL ファイルの保存時に、芳香環を単結合と二 重結合の組み合わせに変更してから出力します。
- 結合除外リスト 結合を自動生成する機能において、特定元素間の結合を生成したくない場合 に本機能を使います。まず Add ボタンを押します。次に、リストの下にある2つのプル ダウンメニューで結合を除外したい2つの元素を選択し、 Apply ボタンを押します。その 後、結合を再生成などを適用すると指定した元素間の結合が切断されます。元に戻す場 合は、リストの中から設定を解除したい行を選択して Delete ボタンを押します。
- ペーストした原子にマーカーを移動する。 チェックした場合は、 グループを貼り付け を使用 した際に、ペーストした原子にマーカーを移動します。
- 座標表示エリアに表示する最大原子数 座標表示エリアに座標を表示する最大原子数を設定し ます。

Z-Matrix を自動生成する最大原子数 Z-Matrix を自動生成する最大原子数を設定します。

結合を自動生成する最大原子数 結合を自動生成する処理が動作する最大原子数を設定します。 計算タブ

MOPAC をジョブマネージャで実行 チェックが入っている場合は、MOPAC を実行する際に Winmostar Job Manager を使用します。入っていない場合は、MOPAC での計算が終わる まで Winmostar は待ち状態となり、MOPAC の出力結果は自動でメインウィンドウに読み 込まれます。

ジョブマネージャで実行 からも設定することができます。

- その他のプログラムをジョブマネージャで実行 MOPAC 以外のプログラムの実行に、 Winmostar Job Manager を使用するか指定します。
- タイムアウト時間 時間のかかる処理のタイムアウト時間を設定します。
- デフォルト拡張子 それぞれのソルバーの入力ファイルを作成する際にデフォルトで設定され る拡張子を設定します。
- Gnuplot を使用してグラフを描画 一部のグラフ描画機能において、チェックした場合はGnuplot を使用します。チェックしていない場合はGraceを使用します。Grace またはGnuplotを 用いるグラフ描画機能がWinmostarネイティブのグラフ描画機能に徐々に置き換わる予定 です。Gnuplotのファイルは、Winmostarネイティブのグラフ描画機能の*Export* ボタンか ら保存することができます。

- 計算を開始する前に確認を表示 チェックした場合は各ソルバを実行する際に、確認ダイアロ グを表示します。
- リモートサーバ上のディレクトリ名に"wm\_"を付ける チェックした場合はリモートジョブ実 行の作業ディレクトリにユーザ名に"wm\_"をつけたディレクトリ名を使用します。
- GAMESS 計算後に強制的にスリープ チェックが入っている場合は、ローカルマシンで GAMESS を実行した後に強制的に指定秒数スリープします。計算直後にログの内容を その場で確認したいときに便利な機能です。
- AmberTools で計算する電荷を自動調整 acpype または AmberTools を利用して AM1/BCC、 Gasteiger、RESP 電荷を算出する際に、分子全体の電荷を厳密に整数値にします。この 場合、分子内の最後の原子の電荷の値が微修正されます。

表示タブ

標準色 配色を、Winmostar、GaussView、Jmol、Rasmol、旧 Winmostar から選択します。

色の設定

選択原子 選択している粒子の原子種の色を変更します。

- 結合 結合の色を変更します。
- 背景 背景の色を変更します。

背景 (Viewer) Winmostar Viewer の背景の色を変更します。

文字 分子表示画面の文字の色を変更します。

- 選択原子の VDW 半径 分子表示エリアでマーカーが付いた原子の元素について、VDW 半径 を変更します。
- 電荷表示スケール ラベル/電荷 において電荷を表示する際の電荷の表示の大きさを調整します。 表示 → 表示項目 からも設定することができます。
- キーワード表示エリアの文字サイズ キーワード表示エリアのフォントの大きさを指定します。
- マウスのスクロールの速さ 分子表示エリアにおけるマウスホイールによる拡大・縮小の速度 を調整します。
- 奥行き表現 奥行き表現を使用するか設定します。

奥行き表現の強さ 奥行き表現に使用するフォグの濃さを調整します。

- 奥行き表現を有効にする最小原子数 設定した原子数以上の場合に奥行き表現を有効にします。
- 表示項目 分子表示エリアに表示する項目にチェックを入れます。

表示 → 表示項目 からも設定することができます。

ファイルを開いた後にセンタリング ファイルを開く際に自動で 選択原子を注視 にチェックを 入れます。

特許出願用表示 特許出願の際に使用できるような白黒で階調のない表示にします。

プログラムパスタブ 各種プログラムのインストールパスを指定します。

## 6.22 ウィンドウメニュー

各種サブウィンドウ間を移動します。Animation ウィンドウや Energy Plot ウィンドウなどについては、一旦閉じた後に本メニューから選択するともう一度開くことができます。

# 6.23 ヘルプメニュー

### 6.23.1 マニュアル

ローカルマシン上の本マニュアルを表示します。

## 6.23.2 オンラインマニュアル

ウェブブラウザを起動しウェブ上の本マニュアルを表示します。

### **6.23.3 Winmostar** ホームページ

ウェブブラウザを起動し Winmostar の HP を表示します。

## 6.23.4 周期表

Winmostar のインストールフォルダの下にある周期表の html ファイルを開きます。

## 6.23.5 CygwinWM を診断

*Check Now* ボタンをクリックすると、*CygwinWM* のインストールチェックを行います。本機能ではファ イルの有無のみを調べます。チェックをクリアした場合は Successfully finished. Close this window.と表示されます。

-部のセキュリティ対策ソフトの動作環境下では、CygwinWM をインストールする際に、CygwinWM の中の一部のファイルのインストールが阻害されることがあり、本機能で簡易的にチェックすることができます。

## 6.23.6 ユーザ設定フォルダを開く

Winmostar のインストールフォルダの下の UserPref フォルダを開きます。

## **6.23.7** デバッグモード

デバッグモードに切り替えます。

## 6.24 Animation ウィンドウ

ウィンドウ左のリストには、各フレームのステップ数、エネルギー、力などを表示します。リスト の各行をクリックするとその行に対応するフレームがメインウィンドウに表示されます。

ウィンドウ下部では、リスト内の *Column* プルダウンメニューで選択した列の値がグラフ表示されます。

アニメーション(トラジェクトリ)データについて本ウィンドウから直接結果解析することも可能で、詳細は Tools メニューを確認してください。

File メニュー

Realod アニメーションを再度元ファイルから読み込みます。

Reload ボタンからも操作できます。

- Export Current Frame 現在のフレームを別名で保存します。
- Export All Frames Separately 全てのフレームをそれぞれ個別のファイルに出力します。

例えば、SDFファイルの各分子構造を個々のファイルに分割し保存・編集したいときに便利です。分割したファイルを再びSDFファイルに集約する場合は複数ファイルをSDF形式に集約を使います。

Export GIF Animation GIF アニメーションファイルを書き出します。

Export ボタンからも操作できます。

Export JPEG Images 連番 JPEG ファイルを書き出します。

*Export* ボタンからも操作できます。

- Export SDF File 全てのフレームを含む SDF ファイルを書き出します。
- **Export Animated GRO File** アニメーション gro ファイルを出力します。VMD 等との連携に 使用できます *Export* ボタンからも操作できます。
- Export CSV File リストの表示されている数字を csv 形式で出力します。
- Close このウィンドウを閉じます。再度開く場合は ウィンドウメニュー  $\rightarrow$  Animation を選択します。

Close ボタンからも操作できます。

- Control メニュー
  - Go to First Frame 最初のフレームに移動します。

ウィンドウ内のボタンからも操作できます。

Play/Pause アニメーションを再生/一時停止します。

ウィンドウ内のボタンからも操作できます。

Go to Last Frame 最後のフレームに移動します。

ウィンドウ内のボタンからも操作できます。

#### Tools メニュー

- Invert Trajectory トラジェクトリを反転させます。順方向、逆方向の IRC 計算のトラジェクトリを、鞍点を中心に結合させたいときに便利な機能です。
- Skip Frames トラジェクトリを一定間隔で間引きます。長大なトラジェクトリのサイズを小さ くして解析の処理速度を軽くしたい場合などに便利な機能です。
- Translate All Atoms 全てのフレームの全ての原子を並進移動させます。計算済みのデータを 可視化する際、原子位置を微調整したい時に便利な機能です。
- Set Origin as Lower Bound Edge of Cell 各フレームのシミュレーションセルの各方向の始点 を、原点に設定します。 *Translate All Atoms* 機能と組み合わせて使用すると便利な機能 です。
- Distance/Angle Change トラジェクトリ内の指定した原子間の結合長・結合角・二面角を解析 します。
  - 1. Bond/Angle Change ウィンドウで、 Type を選択します。

- Target Atoms にコンマ区切りで計算したい結合長・結合角・二面角を定義する原子を 列挙します。Set ボタンをクリックすると、メインウィンドウでマーカーが付いた原 子を自動で入力することができます。
- 3. *Plot* において時間変化(*Time Change*)またはヒストグラム(*Histogram*)のどちらを出力するか選択する。
- 4. Draw ボタンをクリックします。
- Mean Square Displacement/Diffusion Constant 平均二乗変位および自己拡散係数を算出しま す。詳細は自己拡散係数/平均二乗変位を参照してください。Gromacs など一部のソルバ では本メニューが有効になりませんが、ソルバのメニューに同等機能が用意されている場 合があります。
- Radial Distribution Function 動径分布関数を算出します。詳細は 動径分布関数 を参照してく ださい。Gromacs など一部のソルバでは本メニューが有効になりませんが、ソルバのメ ニューに同等機能が用意されている場合があります。
- Extract Trajectory for Selected Group メインウィンドウでグループ選択した原子のみを取り 出したトラジェクトリファイルを作成します。
- Automation メニュー *File* → *Export All Frames Separately* などのファイル出力機能の実行時に、各 フレームの構造に対し操作を行います。操作はメニューの順に実行されます。
  - **Check All/Uncheck All** *Deleting Hydrogen* から *Quick Optimization* までの全ての項目のチェックします/チェックを外します。
  - Deleting Hydrogen 各フレームの構造に対し、水素原子を削除します。 水素を削除 と同じ操 作が実行されます。
  - Extracting One Molecule 各フレームの構造に対し、1分子だけ構造を残します。
  - Adjusting Coordinate 各フレームの構造に対し、結合長を自動で調整します。 結合長を自動 調整 と同じ操作が実行されます。
  - Adding Hydrogen 各フレームの構造に対し、水素を自動で付加します。 すべての原子に付加 と同じ操作が実行されます。
  - Quick Optimization 各フレームの構造に対し、簡易構造最適化を実行します。 簡易構造最適 化 と同じ操作が実行されます。

Running MOPAC 各フレームの構造に対し、MOPAC を実行します。

上下スライダー ドラッグするとフレーム間を移動します。

- Speed スライダー 再生速度を調整します。
- Loop チェックボックス チェックされている場合はループ再生されます。
- Dynamic Bond チェックボックス スナップショットごとに結合を毎回自動生成します。

化学結合が組み変わる MD 計算(第一原理 MD、CPMD、ReaxFF、DCDFTBMD など)の際 に有用です。

Open Viewer ボタン 現在開いているアニメーションを Winmostar Viewer を用いて表示します。

*Export* ボタン File メニュー以下の機能のショートカットです。

Close ボタン このウィンドウを閉じます。

- Plot Column リストの中で、このウィンドウ下部のグラフ表示部に表示する列を指定します。直接 値を入力することも可能です。
- Custom Plot ボタン リストの内容、原子間距離、角度、格子定数などを柔軟にプロットできるウィンドウを開きます。
## 6.25 Energy Level Diagram ウィンドウ

分子軌道のエネルギーを数値とダイアグラムで表示します。数値の並んだリスト内またはダイアグ ラム内でクリックすることでその分子軌道が選択され、 *MO Plot* ウィンドウ の *Selected MO* 欄に反 映されます。*HOMO:* に HOMO 準位の番号、 *HOMO-LUMO Gap:* に HOMO-LUMO ギャップが表 示されます。

スライダー ダイアグラムの原点と拡大率を調整します。

Excel ボタン エネルギー値を CSV ファイルに保存して、Excel で開きます。

Close ボタン ウィンドウを閉じます。

## 6.26 MO Plot ウィンドウ

分子軌道、静電ポテンシャル、各種 cube ファイルなどのボリュームデータの表示を調整します。

 $File \rightarrow Open$  メニュー 描画したい cube ファイルを選びます。

 $File \rightarrow Export VRML$  メニュー VRML 形式で出力し、そのファイルを開きます。

 $File \rightarrow Open Jmol メニュー$  Jmol で表示します。

 $File \rightarrow Close$  メニュー このウィンドウを閉じます。

Quantity プルダウンメニュー 描画する物理量を選択します。

- MO Selected MO で選択された分子軌道の3次元分布です。
- Surface VDW 半径程度の距離(厳密ではありません)に描画される分子表面です。
- ESP(Population Charge) ESP(Population Charge) は Population 解析後の点電荷から算出 する静電ポテンシャルの 3 次元分布です。 ESP よりも高速に動作します。複数種類の 電荷が存在する場合は(高優先) ESP 電荷 > Lowdin 電荷 > NBO 電荷 > User 電荷 > Mulliken 電荷(低優先)の順に使用されます。
- ESP(Population Charge)/Surface *ESP(Population Charge)*の情報を、分子表面上で表示します。複数種類の電荷が存在する場合はESP(Population Charge)と同様に振る舞います。
- MO/Surface MO の情報を、分子表面上で表示します。
- Density 電子密度の3次元分布です。
- ESP 電子状態計算で直接計算された静電ポテンシャルの3次元分布です。

ヒント:以下の手順で、 *ESP/Surface* に相当する、分子表面上での ESP を表示できます。(ただし、MOPAC では未対応)

- 1. Dump cube file にチェックを入れ、 Quantity で Density を選択する。
- 2. Draw ボタンを押と、 \*\_den.cube というファイルが生成される。
- 3. Quantity で ESP を選択する。
- 4. Draw ボタンを押と、 \*\_esp.cube というファイルが生成される。この処理員は数分掛 かることがある。
- 5. \*\_den.cube を Winmostar のメインウィンドウで開くと、 *Cube Plot* というウィンドウ が開く。
- 6. *File* 2 の横の... ボタンをクリックし、 \*\_esp.cube を開く。

7. Draw ボタンをクリックする。

ヒント: Windows 版 Gaussian に同梱されている Cubegen プログラムをお持ちの場合は、*ESP* の表示を高速化できます。Cube ファイルを開いた際に出現する *Cubegen* ウィンドウにおいて、 *Use Gaussian's cubegen* チェックボックスにチェックを入れてください。

Selected MO 描画する分子軌道の番号を指定します。 Energy Level Diagram ウィンドウ で分子軌道 を選択するとこの場所に値がセットされます。

Show Diagram ボタン Energy Level Diagram ウィンドウ を表示します。

alpha/beta ボタン スピンを選択します。

Draw Style プルダウンメニュー 等値面を格子 (Mesh) またはソリッド (Solid) モデルで表示します。

Transparency 透明度を指定します。(0: 不透明、1: 透明)

Isosurface Value 描画する等値面の値を指定します。

Points 各辺の格子点数を指定します。

Scale 描く範囲を指定するスケーリング係数を指定します。

*Draw boundary* チェックボックス cube ファイルの境界に線を描画します。Quantum ESPRESSO, OpenMX などのバンド計算で主に使用します。

Draw contour Map チェックボックス 指定した断面において等高線を描画します。

*Dump cube file* チェックボックス *Draw* ボタンを押したときに、描画と同時に cube ファイルを出力 します。

Draw ボタン ボリュームデータを Winmostar Viewer を用いて描画します。

Close ボタン このウィンドウを閉じます。

### 6.27 IR Spectrum ウィンドウ

IR スペクトルおよびラマンスペクトルを表示します。左側のリストには振動数、IR 強度、ラマン 強度、右側のグラフにはそれらがブロードニングされた上で表示されます。

GAMESS において、IR スペクトルを読み込んだ状態で追加でラマンスペクトルを読み込むと両方 のスペクトルを同時に表示することができます。グラフ上でクリックすると、その位置に近いピー クの行がリスト内で選択されます。

Freq. Scaling 系統的な誤差を補正するための周波数のスケーリングファクターを選択します。プル ダウンメニューから、計算に使用した手法・基底関数の値を選択します。 Edit ボタンを押すと スケーリングファクターの一覧を編集することができます。

Raman Raman Activity / Depolar (P) / Depolar (U) を選択します。

IR IR スペクトルを表示します。

Animation 選択されたピークの振動状態をアニメーション表示します。

Vector 選択されたピークの振動状態をベクトル表示します。

Magnitude アニメーション表示における振幅、ベクトル表示における長さを調整します。

X Range 横軸の範囲を指定します。

Reverse 横軸軸を反転して表示します。

YScale 縦軸の縮尺を変更します。

Reverse 縦軸の上下を反転して表示します。

Broadening ブロードニングの半値幅を設定します。

Export ファイル出力する形式を選択します。

**Open Excel** csv ファイルを出力して開きます。

Save Image グラフを GIF または JPEG で保存します。

Copy Image グラフをクリップボードにコピーします。

Close このウィンドウを閉じます。

## 6.28 UV-Vis Spectrum ウィンドウ

可視紫外スペクトルを表示します。左側のリストには各スペクトルの数値、右側のグラフにはブロー ドニングしたスペクトルが表示されます。

View メニュー

Draw Peak メニュー グラフ中にブロードニング前のスペクトルを描画します。

Draw Curve メニュー グラフ中にブロードニングされたグラフを描画します。

Export ファイル出力する形式を選択します。

**Open Excel** csv ファイルを出力して開きます。

Copy Image グラフをクリップボードにコピーします。

Broadening ブロードニングの幅を設定します。

Close ウィンドウを閉じます。

## 6.29 NMR ウィンドウ

NMR スペクトルを表示します。

Element NMR スペクトルを表示させたい原子を選択します。

Reference 化学シフトを計算する際のレファレンスを指定します。*Element* が All の時は選択肢が出現しません。レファレンスのリストは UserPref フォルダの wm\_nmr.ref ファイルで管理されています。*Edit* ボタンを押すと、レファレンスを追加することができます。

Shielding Reference で選択したレファレンスの値を表示します。

Selected スペクトルのグラフ内でクリックして選択したスペクトルの値を表示します。

Degeneracy Tolerance スペクトルを縮退しているとみなしてグルーピングする際の閾値です。

Export ファイル出力する形式を選択します。

**Open Excel** csv ファイルを出力して開きます。

Copy Image グラフをクリップボードにコピーします。

Close ウィンドウを閉じます。

### 6.30 PIO 解析ウィンドウ

GAMESS または Gaussian による PIO (Paired Interacting Orbitals) 解析の設定と実行を行います。

- (1) Click the fragment
  - Set フラグメントを指定します。A をクリックして選択した後 B をクリックし、[Set] ボ タンをクリックします。

Reset フラグメントの設定を解除します。

(2) Save ab.inp

Save 合体系 A-B および孤立系 A、B 用のデータファイルを出力し保存します。

Edit データファイルを編集します。

(3) Gamess/GAMESS Exec

Gauss/GAMESS Gaussian/GAMESS による計算を実行します。

GenG バッチ・ファイルを作成します。

GenP PIO 用のデータファイルを作成します。

(4) PIO

**PIO** PIO 計算を実行します。

- ISPC 指定した数のピークについて波長と振動子強度の値を図の中に記入します。(長波 長側から)
  - 0 A, B 両フラグメントの全分子軌道を使って PIO をつくります。
  - 1 A, B 両フラグメントの被占分子軌道のみを使って PIO をつくります。両フラグメ ント間に働く重なり反発 (overlap repulsion, closed-shell repulsion) を表現します。
  - **2** A の被占分子軌道と B の空分子軌道のみを使って PIO をつくります。A から B への電子の非局在化 (electron delocalization) を表現します。
  - **3** A の空分子軌道と B の被占分子軌道のみを使って PIO をつくります。B から A への電子の非局在化 (electron delocalization) を表現します。

Edit PIO による出力ファイル (拡張子 out) を編集します。

Sum. サマリを表示します。

Edit PIO による出力ファイル (拡張子 log) を編集します。

MO 分子軌道を表示するためのコマンド・ウィンドウを開きます。分子軌道の表示 機能については、 MO Plot ウィンドウ を参照してください。

Close このウィンドウを閉じます。

### 6.31 Energy Plot ウィンドウ

分子動力学計算の各種エネルギー、温度、圧力等の熱力学量の時間変化を表示します。

ソルバによって出現する UI は異なります。

Energy Terms で項目を選択し、Draw ボタンをクリックするとグラフが表示されます。

グラフ描画エリアの操作方法は グラフの操作方法 を参照してください。

- Block Average Size で指定したサイズでブロック平均した値をプロットします。瞬時値の揺らぎが 大きい物理量をプロットする際に有用です。
- Normalize by Nmol 分子数でエネルギーを規格化します。分子数を取得するために、座標ファイルを選択します。

Calc Ave 各項目の平均値をテキストファイルで出力します。

Gromacs の場合は、 gmx energy を実行し、比熱、bulk modulus などの揺らぎから求める物 性も出力されます。

Draw グラフを描画します。

Gromacs の場合は、gmx energy を実行します。

Close ウィンドウを閉じます。

## 6.32 グラフの操作方法

グラフ描画エリア内での操作

左ドラッグ グラフを並進移動させます。

Refresh ボタンで元に戻せます。

右ドラッグ グラフを拡大します。

Refresh ボタンで元に戻せます。

X/Y Axis

Autoscale 描画範囲を自動で設定します。

Min/Max Autoscale のチェックを外した時に、描画範囲を直接指定します。

Logarithm 対数で表示します。描画範囲は0より大きい必要があります。

Refresh グラフの描画をリセットします。

Options

Copy Image グラフを画像としてクリップボードにコピーします。

**Open Excel** csv ファイルを出力し Excel を開きます。

Export Gnuplot File Gnuplot ファイルを出力します。

### 6.33 Winmostar Viewer

Winmostar Viewer は分子軌道などを表示する、描画に特化した Winmostar の付属ソフトウェアです。 MD のような多成分系で特定の成分だけを表示させることも可能です。

#### 6.33.1 マウスの使い方

左ボタン+ドラッグ	
	視点を回転させます。 ドラッグしながらマウスボタンを離すと回転し続け ます。
右ボタン+上下ドラッグ	縮小・拡大します。
左ボタン+右ボタン+ドラッグ	上下 ï¡ě 左右に移動します。

#### 6.33.2 メニュー操作

File メニュー

Open gld 形式および MOLDA 形式のファイルを読み込みます。

Save GLD 現在開いている GLD 形式のファイルを名前を付けて保存します。

Save MOLDA ウィンドウに表示されている構造を MOLDA 形式で保存します。

Save JPEG ウィンドウに表示されている内容を JPEG ファイルとして保存します。

Save JPEG (Stereo) 立体視用の左右の画面を JPEG ファイルとして保存します。

StereoPhoto Maker StereoPhotomaker を起動します。

Exit Winmsotar Viewer を終了します。

View メニュー

Representations 描画の詳細な調整を行う Representations ウィンドウ を表示します。

Perspective 遠近法を使用します。

Background Color 背景の色を指定します。

Winmostar Viewer 背景の色を暗青色にします。

Winmostar 背景の色を Winmostar のデフォルトの背景色にします。

Black 背景の色を黒にします。

White 背景の色を白にします。

Model 表示するモデルを選択します。

Ball-and-Stick Model 球棒モデルを表示します。

Space-Filling Model 空間充填モデルを表示します。

Stick Model 棒モデルを表示します。

Wire Model ワイヤーモデルを表示します。

Show SPace-Filling Model Overlapping 空間重点モデルを半透明で重ね合わせ表示する。

Show Animation Control Panel アニメーション操作パネル を表示します。

Copy Image ウィンドウに表示されている画像をクリップボードにコピーします。

Help メニュー

Help マウスの使い方を表示します。 About Winmostar Viewer バージョンを表示します。 Debug メモリ使用量など、デバッグ用の情報を表示します。

#### 6.33.3 アニメーション操作パネル

Winmostar 3D でアニメーションを表示すると、Winmostar 3D のウィンドウの左上にアニメーション操作用の UI が表示されます。

スライダー フレームを移動します。

Once 最終フレームまで再生が到達したら再生をストップします。

Loop 最終フレームまで再生が到達したら最初のフレームに戻って再生を繰り返します。

Round 再生を往復で繰り返します。

JPEG チェックを入れた状態で再生すると表示されている内容が JPEG 形式で保存されます

GIF チェックを入れた状態で再生すると表示されている内容が GIF 形式で保存されます

Close このパネルを閉じます。

#### 6.33.4 Representations ウィンドウ

Orbit/Rotation 左ドラッグで視点を回転させる際の回転方法を指定します。

Orbit 自由に回転させます。

X,Y or Z 画面内水平方向、画面内垂直方向、または画面に垂直方向の軸周りで回転させます。

Periodic Boundary Condition セルの外側に存在する分子の表示方法を指定します。

None 元の座標のまま表示します。

Atom 原子単位でセル内に構造が収まるよう表示します。

Mol 分子単位でセル内に構造が収まるよう表示します。

Molecule 本ウィンドウ中部の1から9を各分子に割り当てます。

Composition 本ウィンドウ中部の1から9を(分子量が共通する)各分子種に割り当てます。

**1-9** チェックが付いた項目を表示します。プルダウンメニューの BS, SF, ST, WI はそれぞれ Ball-stick (棒球) モデル (デフォルト)、Space filling (空間充填)モデル、Stick (棒)モデル、ワイヤーモデルを意味し ます。

Rainbow 分子ごとに異なる色で表示します。

Gold 分子を金色で表示します。

Stereo 立体視表示します。

Enantiomer 元の構造とその鏡像体を表示します。

Para 平行法で表示します。

Cross 交差法で表示します。

Anag アナグリフで表示します。(赤青のメガネを使用)

Shift 分子間の距離を指定します。

Rot 分子の回転する大きさを指定します。

H チェックされている場合は、水素原子を表示します。

Dummy チェックされている場合は、ダミー原子を表示します。

Backbone チェックされている場合は、バックボーンのみを表示します。(タンパク質向け)

Atom 原子の表示倍率を設定します。

Bond 結合の表示倍率を設定します。

Z-Clip Z方向のクリッピング位置を指定します。

Surface Style 分子軌道などの等値面の表示方法を指定します。

Mesh 等値面をメッシュ(格子)モデルで表示します。

Solid 等値面をソリッドモデルで表示します。

SmoothSolid 等値面を滑らかなソリッドモデルで表示します。

Trans 等値面の透明度を指定します。(0: 不透明、1: 透明)

X, Y, Z 分子軌道などのメッシュ(スカラー場)情報が読み込まれた場合、チェックを入れた面に対しコンター マップ(等高線)を描画します。コンターマップの位置はスライダーで調整可能です。

#### 6.34 Winmostar Job Manager

Winmostar ジョブマネージャ(Winmostar/JM)は、マルチコアのWindows PCを対象にしたジョブ管理ソフトウエアです。

Winmostar の補助プログラムとして動作し、Winmostar をインストールした PC(ローカルマシン と呼ぶ) 上で GAMESS、Gaussian など各種ソルバの実行を自動でスケジューリングすることができます。

#### 6.34.1 基本動作

Winmostar でローカルマシン上でのジョブ(ローカルジョブと呼ぶ)を実行を選択すると、下図のような JM のウィンドウが立ち上がり、1 番目のキューに登録されます。キューに登録されたジョブの *Status* はまず WAIT (実行待ち)となり、登録順、*Priority*、実行 core 数を考慮して順次 *RUN* に切り替わり、そのジョブが 開始されます。処理が終了したジョブの *Status* は *END* に切り替わります。

JM は Winmostar でローカルジョブを実行する時に自動で起動されますが、自動で終了することはないので、 終了するときは x (閉じる)ボタンか *File*  $\rightarrow$  *Exit* から終了します。JM を終了すると、それ以降は *WAIT* 状態 のジョブは開始されません。

誤って JM を停止した場合など JM を任意のタイミングで起動したい場合は、Winmostar 本体の ツール → ジョブマネージャ をクリックします。

MaxCores は JM が使用できる最大コア数で、デフォルトではマシンのコア数に設定されます。この値が大きいと同時に多数のジョブが並列に実行されますが、ローカルマシンのコア数より多く設定しても効率は上がりません。

ヒント: Windows のタスクマネージャーを起動し、 パフォーマンス タブに移動すると、 論理プロセッサ数 という欄に使用しているマシンのコア数が表示されます。

ジョブは基本的に WAIT 状態の古いジョブから順に実行されますが、 Priority を変更することでその順序を 調整することができます。 Priority が小さい値のジョブほど高優先度で実行されます。

実行 core 数は、使用するソルバのキーワードで設定した値に設定されます。例えば、G03W の場合 は%nproc=の値、GAMESS の場合は NCPUS の値となります。G03W は並列計算版が必要で、最大4 コアまで の制限があります。

JM は二重に起動しないように調整されており、Winmostar を複数起動した場合、ジョブは一つの JM に対し て登録されます。

JM が管理可能なジョブの数(キューの数)は最大で200個です。この数を超えると、古いものから順に キューから削除されますが、実行中のジョブがキューから削除されても、ジョブの処理自体は続行されます。

👋 Wi	🕮 Winmostar Job Manager V10.0.0 — 🗆 🗙						
File E	dit Op	otion H	lelp				
Job							Machine
Job	Name	20200108	5_011201	Fo	older E:¥tmp	Open	MaxCores 4 🗸
Ct-4		D	Prior			5 💷   01:10   A	Running Jobs 0
0(a)	us ENI	U ~	Frior		art Time 2020/01/0	5 💷 🕈 🛛 🖓	Running Cores 0
Index	Status	Priority	Cores	Job Name	Start Time	End Time	Path
1	END	5	1	20200105_011201	2020/01/05 01:12	2020/01/05 01:12	E:¥tmp¥wat1000bat
2	END	5	1	20200101_222201	2020/01/01 22:22	2020/01/01 22:26	E:¥tmp¥sty_hess.inp.bat

注釈: MOPAC に対しては、Winmostar 本体の環境設定で JM の使用の有無を選択できます。JM を使わない場合は MOPAC 計算後に自動的に計算結果が Winmostar のメインウィンドウに読み込まれますが、JM を使う場合はジョブの終了後にユーザが明示的に計算結果を Winmostar 上で読み込ませる必要があります。

#### 6.34.2 ジョブを強制終了・キャンセルする方法

*RUN* 状態(実行中)のジョブを強制終了したい時は、そのジョブのプロンプト(DOS)ウィンドウの x (閉じる)ボタンを押します。JM 上で *RUN* 状態のジョブの行をクリックして *Status* を *END* に変更することで も終了できる場合もありますが、MOPAC2009 など一部のソルバではその操作が効きません。

JM で RUN 状態のジョブの行をクリックすると、そのジョブの DOS ウィンドウが前面に表示されます。

WAIT 状態のジョブをキャンセルしたい場合は、そのジョブの行を JM で選択し、 Edit  $\rightarrow$  Delete Job かキーボードの Delete キーを押してキューから削除します。キューから削除せずに実行させない場合は、 Status を WAIT から END に変更します。

#### 6.34.3 開始時刻の指定して実行する方法

ウィンドウに表示される開始時刻は、 WAIT の時は実行キューに登録された時刻ですが、 RUN になった時 にその時刻に変更されます。

開始時刻に未来の時刻を設定することで、実行を遅らせることが可能です。一旦 RUN 状態になったジョブ についても、ジョブを強制終了・キャンセルする方法の方法で強制終了した後、開始時刻を変更し Status を WAIT に変更すると、再度ジョブを実行することも可能です。(例えば、この方法を用いると、後で実行したい ジョブの動作を事前に確認することができます。)

#### **6.34.4** ジョブを強制的に開始する方法

WAIT 状態のジョブの Status を RUN に変更することで、その他の条件を無視して強制的に処理を開始する ことができます。同様に END 状態のジョブを RUN に変更して再開することもできます。

#### 6.34.5 省電力設定について

JMの起動中は、時間設定によって自動的にスタンバイ(スリープ)や休止状態に入ることを、JMが防止しています。手動操作でスタンバイ状態等に移行した後、テレビ録画ソフトのように自動的に復帰する機能はありませんので、ご注意ください。

AutoShutdown にチェックした場合は、全てのジョブが END 状態になった後に自動的にシャットダウンします。

## Chapter 7

# リモートジョブ

リモートジョブ投入機能を用いると、Winmostar をインストールしたマシンとは別の Linux マシン(\*\*リモートサーバ\*\* と呼ぶ) でソルバを実行することが可能になります。

## 7.1 対応するジョブスケジューラ

Winmostar が対応するジョブスケジューラは以下の通りです。 有償サポートにおけるカスタマイズ においてご 希望のジョブスケジューラに追加対応させることも可能です。

- TORQUE (PBS)
- SGE, UGE
- SLURM
- T2SUB
- llsubmit
- NQS
- NQS2
- ST
- NSUB
- Rescale
- Winmostar Job Manager

TSUBAME3.0 を利用する場合は SGE を選択する。

対応するジョブスケジューラがリモートサーバにインストールされていない場合は、以下の方法でリモートジョ ブを実行することができます。

- 1. **qsub**, **qstat** などのコマンドを模倣するコマンド、スクリプトを用意し、必要に応じてそれらのコマンドの接頭辞を *Prefix for Queueing Commands* で指定する。
- 2. Queue の設定で Run を選択する。

## 7.2 リモートジョブの実行手順

各機能の詳細は Submit Job ウィンドウの各機能 を参照してください。

- 計算を実行したいサーバに、ジョブスケジューラとソルバをセットアップしてください。
   これからインストールする場合は、こちらを参考にしてください。
   ジョブのスケジューリングを使わずにジョブを実行する場合、ジョブスケジューラのセットアップは不要
  - ジョブのスグジューリブグを使わりにジョブを実行りる場合、ジョブスグジューラのビッドアップは不要で、 Queue の設定において Run を選択してください。
- 2. 基本的な操作の流れの1,2の手順に従い初期条件の作成とキーワードの設定を行い、キーワード設定ウィンドウを OK ボタンを押して閉じます。



4. Submit Remote Job ウィンドウにおいて、すでに設定が済んでいる Profile が選択されているときは、 こちらに進みます。されていない場合は、 Manage  $\rightarrow$  Add Profile を選択します。

😻 Su	bmit Re	emote Job (Lo	cal ID:			)		-
<u>F</u> ile <u>F</u>	profile	<u>C</u> onnection	Ţор	<u>O</u> ue	ue	<u>O</u> ptions		
Profile	pbs_g	mstxt		$\sim$	Ma	nage 🔻		Т
» username@xxx.xxx.xxx.xxx				Add Pr	ofileN			
				Edit Pro	ofile 5			

- 5. Edit Profile ウィンドウ上部にて、以下の内容を入力します。
  - Profile Name
  - Connection
    - Hostname
    - Port (通常は 22 を使用)
    - Timeout (わからない場合はデフォルト値を使用)
    - Username
    - Password
    - SSH Key (必要に応じて設定)

🥮 Edit Profile			_		×
Profile Name	testserver				
Connection					
Hostname	192.168.1.100	Port	22 Timeout	15	
Username	user0001	Password	•••••		Show
SSH Key					

TSUBAME、FOCUS などに多段 SSH 接続する方法は リモートジョブの詳細設定 を参照してください。

6. 入力後、SSH 接続をテストするために、 *Edit Profile* ウィンドウ下の *Test Connection* ボタンをクリックします。

黒いターミナルウィンドウが開いて初回接続時は、Store key in cache? (y/n) と表示される場合があります。その場合は、 y とキー入力します。

P. C.	-	×
The server's host key is not cached in the registry. You		^
have no guarantee that the server is the computer you		
think it is.		
The server's rsa2 kev fingerprint is:		
ssh-rsa 2048		
If you trust this host, enter y to add the key to		
PuTTY's cache and carry on connecting.		
If you want to carry on connecting just once, without		
adding the key to the cache, enter "n".		
If you do not trust this host, press Return to abandon the		
connect ion.		
Store key in cache? (y/n)		

接続に成功した場合は、先ほどの Submit Remote Job ウィンドウの下部に Connection test succeeded.と表示されます。

🥨 Edit Profile					_		×			_		
Profile Name	estserver							😻 Su	bmit Re	mote Jo	b (Lo	cal I(
Connection								<u>F</u> ile <u>F</u>	profile	<u>C</u> onne	tion	Joł
Hostname	192.168.1.100		Port	22	Timeout	15		Profile	pbs_g	mstxt		
Username	user0001		Password	•••••	•		Show		≫ us	sername(	Dxxx.>	
SSH Key												
- Oueue & Solver									Remoti	e Directo	ry:	
Queue	PBS 🗸 🗸							Send	& Subm	it   Is	cat	gr
Remote Directory	%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/ qstat -a qdel qstat -s qst											
Solver	gamess		~					> <sft Connec &gt;</sft 	p test) tion te	> est succ	eeded:	I <b>.</b>
Shell Script	🖲 Use Default											
	O Use Template	gamess.foc2.tx	t		$\sim$							
		Add	Edit	. Rer	nove							
Options							$\sim$					
Prefix for Submissi	ion Commands											
Clear		Test	Connectior		ок		Cancel	<				

ユーザ設定等が間違っている場合はターミナルウィンドウで Access denied \*\*\*@\*\*\*'s password: などど表示されます。その場で正しいパスワードを入力した場合も、再度 Edit Profile ウィンドウでパス ワードを再入力してください。 その他、 Submit Remote Job ウィンドウの下部に ERROR: Connection timed out or an error occurred. と表示された場合は、接続設定を見直してください。

- 7. Edit Profile ウィンドウ下部にて、以下の内容を入力します。
  - Queue & Solver
    - Queue
    - Solver
    - Shell Script
    - Options ( qsub 等のジョブをサブミットするコマンドの引数 )

Queue & Solver					
Queue	PBS 🗸				
Remote Directory	%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/				
Solver	quantumespresso $\checkmark$				
Shell Script	🔾 Use Default				
	● Use Template quantumespresso.1.txt ~				
	Add Edit Remove				
Options	-q LO -l nodes=1:ppn=%WM_NUM_PARALLEL%				
Prefix for Submission Commands					
Clear	Test Connection OK Cancel				

まず接続するサーバ上にインストールされたジョブスケジューラを Queue を選択し、その上で使用する ソルバを Solver で選択します。次に、Shell Script の Use Template をクリックします。選択したソルバの テンプレートがない場合は、テンプレートの名前を入力すると、テンプレートがテキストエディタで開 かれます。ある場合は、Use Template の横のプルダウンメニューで使用したいテンプレートファイルを 選択し、その下の Edit... ボタンをクリックするとテンプレートファイルがテキストエディタで開きます。 テンプレートファイルには、module load ...、source ...、export PATH=... などのコマ ンドや、mpirun などの、そのサーバで選択したソルバを使用するための設定を書き入れます。

利便性を上げるため、テンプレートファイルや Options には、個々のジョブに依存する並列数やファイル 名などの設定がジョブ実行時に代入されるエイリアスの形で入力することを推奨します。詳細は リモー トジョブ機能で使用可能なエイリアス文字列 を参照してください。

- 8. OK ボタンを押して Edit Profile ウィンドウを閉じます。
- 9. Submit Remote Job ウィンドウで、 Queue → Show Usage of Each Queues メニューをクリックし、ウィンド ウ下部にリモートサーバの情報が表示されることを確認します。

正常に表示されない場合は、 $Manage \rightarrow Edit Profile$  で設定を見直します。

10. ジョブを開始するために、 *Send & Submit* ボタンをクリックします。ここでの操作方法は、通常のローカルジョブと同じです。



ウィンドウ下部には、サブミットしたジョブの ID が表示されます。ID はジョブをキャンセル(kill) するときに使用します。

リモートサーバでジョブが実行されたディレクトリは、 *Profile*  $\rightarrow$  *Edit Profile* の *Remote Directory* で設定することができ、 実際使用されたものは *Submit Remote Job* ウィンドウの *Remote Directory* 欄に表示されます。

ジョブがリモートサーバ上で開始されると、標準出力は winmos.o、標準エラーは winmos.e というファイルにそれぞれ出力されます。

11. サブミットしたジョブの状況は、 *Queue* → *List Submitted Jobs* で確認してください。全てのジョブが完了 した場合は --- と表示されます。

サブミットしたジョブがあまりに早く終了した場合は、サブミットした直後であっても --- と表示 されます。

- 12. リモートサーバ上の特定のジョブの状況を確認するときは、以下の操作を行ってください。
  - ls ボタン
  - *cat* ボタン
  - grep ボタン
  - *tail* ボタン
  - Get & Open ... ボタン

mit	ls	cat	grep	tail	Get & Open Log File	•	Gŧ
				1	1		

操作対象のジョブは、*Remote Directory*欄に表示されたものとなります。デフォルトの設定の場合は、メインウィンドウで対象としたいジョブの入力ファイルを開き、ジョブ投入時のプロファイルを選択してください。

13. リモートサーバ上で終了したジョブの結果解析をローカルマシンで実行したい場合は、*Get All Files* ボタンをクリックします。



操作対象のジョブは、*Remote Directory*欄に表示されたものとなります。デフォルトの設定の場合は、メインウィンドウで対象としたいジョブの入力ファイルを開き、ジョブ投入時のプロファイルを選択してください。

14. ファイル取得後は、ローカルジョブと同じ操作方法で結果解析を実施することができます。

### 7.3 Submit Job ウィンドウの各機能

File メニュー

Revert All Changes 変更を破棄しサーバ設定ファイルを読み込み直します。

Save Setting File サーバ設定ファイルを上書き保存します。

Import Setting File サーバ設定ファイルを読み込み、その中に含まれているプロファイルを、既存のプロファイルのリストに追加します。

Restore Setting File サーバ設定ファイルを出荷時の状態に戻します。

Close このウィンドウを閉じます。

#### Profile メニュー

- Add Profile, Duplicate Profile, Remove Profile サーバ接続のプロファイルを追加、複製、削除します。ウィンドウ内の Manage ボタンからも同様の操作が可能です。
- Edit Profile サーバ接続のプロファイルを編集します。一部の設定は Submit Job ウィンドウ内で直接編集 できます。

**Profile name** Submit Job ウィンドウで表示されるプロファイル名を指定します。

Hostname リモートサーバのホスト名または IP アドレスを指定します。

- Port 接続に用いられるポート番号を指定します。
- Timeout リモートサーバからの応答が無い際に、接続を自動的に切断する時間[単位:秒]を指定します。

Username リモートサーバへのログイン ID (ユーザ名)を指定します。

- Password ログイン ID のパスワードを指定します。[View] をクリックするとパスワードの非表示が 解除されます。
- SSH Key 必要に応じて SSH キーを設定します。

Queue 接続するリモートサーバ上で稼働しているジョブスケジューラの種類を選択します。

Solver このプロファイルにおいて使用するプログラムを選択します。

ウィンドウ内でも変更可能です。

Shell Script デフォルトのシェルスクリプトを使用して計算を実行する場合は Use Default、シェル スクリプトをカスタマイズする場合は Use Template をチェックします。 Use Template の場合は その横のプルダウンメニューで使用するテンプレートファイルを選択し、またテンプレートファ イルを追加、編集、削除する場合はその下の Add, Edit Remove ボタンをクリックします。

テンプレートファイルの中では、 リモートジョブ機能で使用可能なエイリアス文字列 を使用可 能です。

テンプレートファイルは Winmostar のインストールフォルダの UserPref の中に保存されます。

ウィンドウ内でも変更可能です。

Options ジョブ投入コマンド (qsub など)の後ろに与える引数を設定します。

本項目には リモートジョブ機能で使用可能なエイリアス文字列 を使用可能です。

ウィンドウ内でも変更可能です。

Remote Directory リモートサーバの作業ディレクトリを指定します。空の場合はホームディレクト リから (Local User ID)/(プログラム名)/(ファイル名) が作業ディレクトリになります。Local User ID は操作中の Windows におけるユーザ名で、Submit Remote Job ウィンドウのタイトルに表示 されます。Local User ID に全角文字や半角スペースが含まれている場合は、内部的に半角英数文 字に変換されてディレクトリ名が設定されます。 '/work/dir' のようにシングルクォーテー ションで囲うと、指定したディレクトリから (Local User ID) / (プログラム名) / (ファイル 名) を作成します。また、 ''/work/dir' のようにシングルクォーテーションを 2 個づつで 囲むと、(Local User ID) のディレクトリは作成されません。

本項目には リモートジョブ機能で使用可能なエイリアス文字列 を使用可能です。

Prefix for Queueing Commands qsub などのコマンドの実行時に、それらのコマンドの接頭辞が必要な場合はここに設定します。通常は空にします。

- Test Connection SSH の接続テストを行います。ジョブスケジューラのテストは行わないので注意 してください。
- Connection メニュー

Test Connection Using SFTP SSH の接続テストを行います。

ウィンドウ内の Test Connection ボタンでも同様の操作が可能です。

- Share SSH Connection Once Established SSH 接続を持続させるときに使用します。SSH 接続を伴う操作の前に一度実行しておくと、それ以降の操作が軽快になります。
- Open Putty Putty の設定ウィンドウを開き、接続に関する詳細な設定を行います。
- **Do Not Use Putty for Connection(experimental)** Putty 接続に Putty を使用しません。接続を保持す るため、動作が軽快になります。鍵認証での接続では、公開鍵の指定も必要です。

Job メニュー

Send Local Files & Submit Job 計算に必要な入力ファイルを生成し、SFTP でリモートサーバに転送した後、ジョブスケジューラにサブミットします。サブミットした後ジョブの ID が表示されます。

ウィンドウ内の Send & Submit ボタンでも同様の操作が可能です。

Submit Job 計算に必要な入力ファイルを生成し、SFTP でリモートサーバに転送します。

List Files at Remote Directory Remote Directory 内のファイル一覧を取得します。

ウィンドウ内の *ls* ボタンでも同様の操作が可能です。

Display Remote File Remote Directory 内の選択したファイルの内容を取得します。

ウィンドウ内の cat ボタンでも同様の操作が可能です。

Display Last Part of Remote Log File Remote Directory 内のログファイルの末尾を取得します。

ウィンドウ内の tail ボタンでも同様の操作が可能です。

Search String in Remote Log File Remote Directory 内のログファイルの中から文字列を検索します。

ウィンドウ内の grep ボタンでも同様の操作が可能です。

- Restert Terminated Job ジョブスケジューラなどによりリモートジョブが強制的に中断された場合、 本機能で計算を再開します。
- **Force Job Finalization** 計算の異常終了により全てのファイルが生成されず、 *Get All Remote Files が* 正常動作しない場合、本機能を実行すると強制的に終了処理が実行され、 *Get All Remote Files* を実行できるようになります。
- Get Remote File and ... Remote Directory 内の特定ファイルを get して可視化します。

ウィンドウ内の Get File & ... ボタンでも同様の操作が可能です。

Queue メニュー 各メニュー名に括弧書きで、選択されたジョブスケジューラにおける具体的なコマンド 名が表示されます。

List Submitted Jobs ジョブスケジューラに登録されたジョブの一覧を取得します。

ウィンドウ内の同じコマンド名のボタンでも同様の操作が可能です。

Kill Submitted Job ジョブスケジューラに登録されたジョブを中断します。サブミットした直後に 表示されたジョブの ID を入力する必要があります。

ウィンドウ内の同じコマンド名のボタンでも同様の操作が可能です。

List Submitted Jobs in Detail ジョブスケジューラに登録されたジョブの詳細な一覧を取得します。 ウィンドウ内の同じコマンド名のボタンでも同様の操作が可能です。

Show Information of Each Queue ジョブスケジューラが管理するキューの一覧を取得します。

ウィンドウ内の同じコマンド名のボタンでも同様の操作が可能です。

Show Usage of Each Queue 各キューの使用状況を取得します。

ウィンドウ内の同じコマンド名のボタンでも同様の操作が可能です。

Show Information of All Nodes ジョブスケジューラが管理する全マシンの情報を取得します。

ウィンドウ内の同じコマンド名のボタンでも同様の操作が可能です。

その他のメニュー 項目名と同じコマンドがリモートサーバ上で実行されます。

Options メニュー

Enable Admin Mode ルート権限でリモートサーバにアクセスする際に使用します

## 7.4 リモートジョブ機能で使用可能なエイリアス文字列

ジョブ実行時に使用するシェルスクリプトやサブミットコマンドの引数は、計算条件に応じて動的に変化する 場合があるため、その様な状況に対応するためにエイリアス文字列を使うことができます。

使用可能なエイリアス文字列の一覧を以下に示します。

%WM_USER_ID%	リモートディレクトリ作成用ローカルユーザ ID
%WM_SOLVER%	ソルバの種類
%WM_INPUT%	入力ファイル名
%WM_PREFIX%	入力ファイル名から拡張子を除いたもの
%WM_EXT%	入力ファイル名の拡張子
%WM_NUM_PROC%	CPU(MPI) 並列数
%WM_NUM_THREAD%	Thread 並列数
%WM_NUM_PARALLEL%	%WM_NUM_PROC%と%WM_NUM_THREAD%の積

## 7.5 リモートジョブの設定ファイル

プロファイルの設定は、WinmostarのインストールフォルダのUserPref\winmos\_profile.iniに保存されます。読み込む際には、V8以前の旧バージョンとの互換性維持のため、以下の優先順位で読み込まれます。

UserPref\winmos\_profile.ini >
wm\_system\RemoteJobdefault\_profile.ini

UserPref\winmos\_server.ini >

## 7.6 Windows サーバの利用方法

リモートサーバで Windows PC を使用することができます。使用するには下記のような事前準備が必要です。

・リモートサーバに OpenSSH サーバをインストールしてクライアントから SSH で接続できるようにします。

リモートサーバに Winmostar をインストールして Winmostar ジョブマネージャを常に起動しておきます。
 下記のように設定します。

- Profile 編集画面で Queue に JM(Windows) を選択します。
- Winmostar Path にリモートサーバにインストールされている Winmostar のパスを設定します。
- デフォルトのシェルスクリプトは使えないので、Use Template を選択しテンプレートファイルを作成します。Windows 上で動作するバッチファイルの内容にします。

下記のような他のジョブスケジューラとの操作上の違いがあります。

- Test Connection ボタンを押した時にジョブマネージャが起動しているかのチェックも行います。
- List Jobs ボタンで表示される情報はジョブマネージャと同じで左から番号、状態、優先度、コア数、ジョ ブ名、開始日時、終了日時、バッチファイルです。
- Delete Job ボタンでジョブを取り消す場合はジョブ名を入力します。

## **Chapter 8**

# アドオン

## 8.1 Frangment ER

Fragment ER 法を使用してタンパク-リガンド間の相対結合自由エネルギーを計算します。 使用するためにはアドオンの購入が必要です。 分子動力学法のソルバーには NAMD を使います。

#### 8.1.1 Fragment ER 画面

File メニュー

New Project プロジェクトを初期化します。 Open Project プロジェクトを開きます。 Save Project プロジェクトを上書き保存します。 Save Project As プロジェクトを名前をつけて保存します。 Close Fragment ER 画面を閉じます。

MD メニュー

NAMD Keywords Setup NAMD キーワード設定画面 を開きます。

Run NAMD NAMD をローカル実行します。

Run NAMD On Remote Server NAMD のリモートサーバでの実行のために、リモートジョブ実行画面を 開きます。

Edit .log File NAMD 実行時のログファイルをテキストエディタで開きます。

Energy Plot NAMD 実行時のログファイルからエネルギー変化のグラフを描画します。

Import NAMD Trajectory MD のトラジェクトリを開きます。

Clear NAMD Output Files NAMD 実行でできた出力ファイルを削除します。RunNAMD.bat, Run-NAMD.log, 各種 dcd, log, coor, namd, vel, xsc, xst ファイル等を削除します。

Analysis メニュー

Calculate Free Energy 自由エネルギーを計算します。

Edit.log File 自由エネルギー計算時のログファイルをテキストエディタで開きます。

Import Result 自由エネルギー計算結果をインポートして 結果表示画面 に表示します。

**Clear Analysis Output Files** 自由エネルギー計算でできた出力ファイルを削除します。FreeEnergy.sh, FreeEnergy.log, calc\_PdP\_kai2.out, parameters\_fe ファイル, refs, soln フォルダ等を削除します。

Tools メニュー

**Preferences** 環境設定画面を表示します。

- Solution … ボタンをクリックして溶液系の PDB ファイルを指定します。複数のリガンド分子が存在する場合 は、リガンド分子を指定します。ビューにリガンド分子表示されます。
- Set Core 初期リガンドからフラグメント部分の原子をクリックで指定し、Set Core ボタンをクリックすると、 残りの部分を母核として設定します。
- Add 新規フラグメントをコンボボックスで選択してから、Addボタンをクリックすると、新規フラグメントを 母核に付加したリガンドを最終リガンドリストに追加します。

Configure Fragment ER 設定画面 を表示します。

Check 各種リガンドの母核部分の原子タイプが一致しているかチェックします。同時にリガンドの力場も生成します。

Setup NAMD の入力ファイル (PDB, PSF ファイル) を生成します。

Close Fragment ER 画面を閉じます。

#### 8.1.2 Fragment ER 設定画面

Fragment ER の計算の設定をします。設定内容はプロジェクトファイルに記録されます。

Solvation

- Drop water and solvate for In-protein In-protein 系の計算で水分子を再配置するか設定します。これを行わない場合ははじめに読み込んだ溶液系の水分子が溶媒として使用されます。これを行わない場合は周期境界セルが設定されている必要があります。
- Drop water and solvate for In-aqua In-aqua 系の計算で水分子を再配置するか設定します。これを行わな い場合ははじめに読み込んだ溶液系の水分子が溶媒として使用されます。これを行わない場合は周 期境界セルが設定されている必要があります。

Distance from solute to cell boundary 溶質から周期境界セルまでの距離を指定します。

Forcefield for Ligands リガンドに使用する力場の種類を選択します。

N-terminal modification タンパクのN末端修飾を指定します。

C-terminal modification タンパクのC末端修飾を指定します。

Import trajectory Interval トラジェクトリのインポート時にどのくらいの頻度で間引くか指定します。

ERmod

# of bins for binding energy 結合エネルギーの分割数を指定します。

# of insersions for solute (maxins) ermod 実行時の maxins を指定します。

# of division of the simulation (engdiv) ermod 実行時の engdiv を指定します。

# of OpenMP threads (for local run) ermod ローカル実行時の OpenMP スレッド数を指定します。

# of MPI processes (for remote run) ermod リモート実行時の MPI プロセス数を指定します。

OK 設定を保存して画面を閉じます。

Cancel 設定を保存せず画面を閉じます。

#### 8.1.3 NAMD キーワード設定画面

NAMD による MD 計算の設定をします。設定内容はプロジェクトファイルに記録されます。チェッ クボックスで計算する系を選択します。

Conf 各系の NAMD 計算に入力ファイルの設定をします。
numdcd トラジェクトリの出力間隔を指定します。
numlog ログファイルの出力間隔を指定します。
temperature 温度を指定します。In-protein の平衡化計算では段階昇温のはじめの段階の温度になります。
timestep MD の1 ステップの時間刻みを指定します。
numstep MD のステップ数を指定します。
Number of Therad NAMD 実行時のスレッド数を指定します。
Generate Conf Files 入力ファイル (namd ファイル)を出力します。
Run 入力ファイルを出力して NAMD をローカル実行します。
Close NAMD キーワード設定画面を閉じます。
Load Default デフォルト設定条件を読み込みます。
Save Default 現在の設定条件をデフォルト設定として保存します。

Reset Default デフォルト設定条件を初期状態に戻します。

#### 8.1.4 結果表示画面

Summary に結果の要約が表示されます。エネルギー分布関数のグラフが表示されます。どの系を表示するか選択することができます。 log ログファイルをテキストエディタで開きます。

Excel グラフ表示されているデータを CSV ファイルに保存し、アプリケーションで開きます。 Close 結果表示画面を閉じます。

#### 8.1.5 環境設定画面

NAMD Path NAMD 実行ファイルのパスを設定します。 Protein Topology Path タンパクのトポロジーファイルを指定します。 Protein parameter Path タンパクのパラメータファイルを指定します。

## 8.2 DCDFTBMD

分割統治型の密度汎関数強束縛分子動力学法に関するメニューです。 使用するためにはアドオンの購入が必要です。 DCDFTBMD をインストールする方法は インストール に記載しています。

#### 8.2.1 キーワード設定

DCDFTBMD の計算条件を設定します。設定後 OK ボタンを押してください。

Reset ボタンでデフォルトの状態に戻ります。Save ボタンで設定を保存します。Load ボタンで Save にて保存した設定を読み込みます。

Extending Simulation 継続ジョブを実行します。 キーワード RESTART=TRUE が設定され、 restart の情報から計算が再開されます。

詳細は 実行 を参照してください。

# of Threads OpenMP の並列数を指定します。

Use MPI MPI を使用します。横の欄には MPI 並列数を指定します。

Basic

Charge 系全体の電荷を指定します。

Multiplicity 系全体のスピン多重度を指定します。

Parameter Set 使用するパラメータの種類を選択します。Winmostarのインストールフォルダ(デ フォルトではC:\winmos10\)の下のDFTBParamフォルダに配置したフォルダの名前が リストアップされます。DFTBParamフォルダの下に置くフォルダは、skf などのパラメータ ファイルを含む必要があります。例えば、C:\winmos10\DFTBParam\mio-1-1\C-C. skf という階層構造が想定されます。

**Open Directory for Parameter Set** 前述の DFTBParam フォルダを開きます。

- **Reload Parameter Set** 前述の DFTBParam フォルダを再度読み込み、 *Parameter Set* のリスト を更新します。
- Executable 計算に使用する DCDFTBMD のバイナリを指定します。MPI を使用するときは dftb\_mpiomp\_mpich.00.x などの MPI 対応版のバイナリを指定する必要があります。 ここで指定するバイナリへ、リモートサーバ上で PATH を通しておく必要があります。

#### Advanced

Method SCC または NCC を選択します。

THIRDFULL SCC ハミルトニアンに対する 3 次補正を使用します。

DAMPXH X-Hペアに対する SCC 相互作用の短距離でのダンピングを使用します。

MAXITER SCC サイクルの最大数を指定します。

ECONV エネルギー変化の収束条件を指定します。(atomic unit)

**DCONV** グラジエント変化の収束条件を指定します。(atomic unit)

DISP 経験的分散力補正を使用します。

DISPTYPE 経験的分散力補正の種類を指定します。

DC 分割統治法を使用します。

SUBTYPE 部分系の作り方を指定します。

**BUFRAD** 球状バッファ領域の半径を指定します。(angstrom)

DELTAR SUBTYPE=AUTO で系を立方体空間に分割する際のグリッド (angstrom)

**OPT/FREQ** 

OPT 構造最適化計算を実行します。

MAXITER 構造最適化サイクルの最大数を指定します。

DCONV グラジエント変化の収束条件を指定します。(atomic unit)

FREQ 調和振動解析を実行します。

MD 分子動力学計算を実行します。

- NSTEP ステップ数を指定します。*Extending Simulation* にチェックを入れている場合 は、継続前のジョブのステップ数とこれから流すジョブのステップ数の和を入力 する必要があります。
- **DELTAT** 時間刻みを指定します。 (second)
- **BATHTEMP** NVT および NPT アンサンブルを利用するときの熱浴温度を指定しま す。 (Kelvin)

Ensemble アンサンブルの種類を指定します。

NVTTYPE 熱浴の設定を指定します。

**INITTEMP** 初期温度を指定します。(Kelvin)

PRINT シミュレーション中の座標等のファイルへの出力頻度を指定します。

CALCPRESSURE 圧力を計算します。継続ジョブを行う際には、引継ぎ前のジョブの設定から変更することができないので注意する必要があります。

#### Properties

PRINT

MO 分子軌道係数を出力します。(部分系の数が1の場合のみ)

ATOME 全エネルギーに対する各原子からの寄与を出力します。

HS ゼロ次ハミルトニアン、重なり行列を出力します。(部分系の数が1の場合のみ)

FORCE エネルギーと力の計算を行います。

STRESS 応力テンソルと格子ベクトルの微分計算を行います。

#### Options

**Restore Working Directory** 継続ジョブが異常終了時など、作業ディレクトリを実行前の状態 に戻す際にクリックします。

#### 8.2.2 実行

DCDFTBMD を実行するために、 リモートジョブ を開きます。詳細な操作方法は リモートジョブ を参照してください。

状況に応じて実行方法が異なります。

- (デフォルト) Extending Simulation にチェックがない場合 実行時にユーザが指定した名前 で入力ファイル(拡張子 dci)を保存し、それを用いて計算を実行します。
- Extending Simulation にチェックがある場合 メインウィンドウで開かれた入力ファイルに紐づけられた既存の作業ディレクトリのバックアップを作成し、新たに作成した作業ディレクトリの中に入力ファイルをdftb.inpとして保存し、それを用いて計算を実行します。

実行に伴い以下のファイルが生成されます。例として入力ファイルが water.dci の時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	前明
<b>dco ファイル</b> water.dco	DCDFTMD の標準出力ファイルです。 作業フォルダの dftb.out をコピーし たものです。
シェルスクリプト water.sh	DCDFTBMD とそのプリ・ポスト処理を 実行するための シェルスクリプトです。
confファイル water_conf.sh	上記シェルスクリプトの中で使われる変 数を収めた ファイルです。
作業ディレクトリ water_dc_data\	作業ディレクトリです。

作業ディレクトリには以下のファイルが生成されます。ここでは主要なファイルのみ示しています。

種類	前明
dftb.inp	実際に DCDFTMD に渡される入力ファ イル
dftb.out	標準出力ファイル
dftb.dat	詳細出力ファイル
traject	MD 計算におけるトラジェクトリファ イル
restart	リスタート用ファイル

ヒント: 作業ディレクトリ

• 作業ディレクトリとは、メインウィンドウで開かれているファイルの名前に接尾辞

を加えた名前のフォルダです。

- 接尾辞はソルバの種類により変わります。
- 例えば Gromacs の場合は、メインウィンドウで開かれているファイルが aaa.gro で、接尾辞が \_gmx\_tmp の場合、作業ディレクトリの名前は aaa\_gmx\_tmp と なります。
- メインウィンドウで開かれているファイルと同じ階層に置かれている必要があります。
- 継続ジョブの時も同名の作業ディレクトリで処理が流れますが、デフォルトでは継続ジョブの実施直前に、直前のジョブの作業ディレクトリのバックアップが作成されます。
  - バックアップの名前は、重複する名前が存在しない範囲で一番小さい番号が付 いたものになります。例えば、作業ディレクトリが aaa\_gmx\_tmp のときは aaa\_gmx\_tmp1 となります。
  - 番号が付いていないディレクトリが常に最新のものとなります。

#### 8.2.3 ログを表示 (dco)

dco(標準出力)ファイルをテキストエディタで開きます。

#### 8.2.4 詳細出力ファイルを表示 (dat)

詳細出力ファイルをテキストエディタで開きます。

#### **8.2.5** アニメーション

#### 構造最適化 (dco)

dco ファイルを選択し、構造最適化計算のトラジェクトリをアニメーション表示します。

アニメーション表示の操作方法はAnimation ウィンドウを参照してください。

#### MD (traject)

dci ファイルと traject ファイルを選択し、MD 計算のトラジェクトリをアニメーション表示します。

メインウィンドウのファイル名は変化しません。

アニメーション表示の操作方法はAnimation ウィンドウを参照してください。

Animation ウィンドウの *Tools* → *Mean Square Displacement/Diffusion Constant* と *Tools* → *Radial Distribution Function* から平均二乗変位、自己拡散係数、動径分布関数を計算することができます。 詳細は 自己拡散係数/平均二乗変位 または 動径分布関数 を参照してください。

#### 8.2.6 エネルギー変化

ログファイルを選択し、エネルギー、温度などの各種熱力学量のグラフを表示します。

サブウィンドウの操作方法は Energy Plot ウィンドウ を参照してください。

## 8.3 Hansen SP & QSPR モデル

原子団寄与法によりハンセンの溶解度パラメータ(HSP)を計算します。また、原子団寄与法と QSPR(構造物性相関)モデルにより各種物性を計算します。

使用するためにはアドオンの購入が必要です。

コマンドラインよりバッチファイルを使用して複数の分子構造に対し自動で連続的に処理すること も可能です。(後述)

- HSP や各種物性を求めたい分子をメインウィンドウで作成した後、本メニューをクリックします。ポリマーの場合はリピートユニット(例えばポリエチレンの場合はエタン分子)を作成し、隣のリポートユニットと結合する2か所を続けて左クリックしておきます。この挙動はポリマービルダ機能のモノマー登録と同じです。
- 2. 分子の場合は Calc Hansen SP ボタン、ポリマーの場合は Calc Hansen SP for Polymer ボタンを クリックします。
- 3. HSP や各種物性が記された csv ファイルが作成されます。csv ファイルの各項目の意味は以下 の通りです。それぞれの物性の単位は csv ファイル内に書かれています。

表示名	意味
totHSP	
	$S_{art}((dD14)^{2}+(dP14)^{2}+(dH14)^{2})$
	Sqrt((dD14) 2+(d114) 2) (Hildebrand の溶解度パラメータに相当)
	(Indebiand の溶解度パックークに指当)
dD14	HSP 分散頂
dP14	HSP 分極項
dH14	HSP 水素結合項
dHdo14	HSP 水素結合項(ドナー)
dHac14	HSP 水素結合項(アクセプター)
polym totHSP	
	$Sqrt((polym_dD14)^2+(polym_dP14)^2+(polym_dH14)^2)$
	(Hildebrandの溶解度パラメータに相当)
polym_dD14	HSP分散項(ポリマー向け)
polym_dP14	HSP分極項(ポリマー向け)
polym_dH14	HSP 水素結合項(ポリマー向け)
polym_dHdo14	HSP 水素結合項(ドナー)(ポリマー向け)
polym_dHac14	HSP 水素結合項 ( アクセプター ) ( ポリマー向
	(け)
Boiling Point	沸点
Melting point	融点
Log10(Viscosity)	
Standard enthalpy of formation	標準生成エンタルピー
Standard Gibbs free energy of formation	標準ギブスエネルギー
Surface tension	表面張力
Thermal conductivity	熱伝導度

計算される HSP や各種物性は原子団寄与法により算出されています。算出に対応している原子団 (官能基)は pirika のページ に記されています。総原子数は最大 250、水素を除く原子数は 120 ま で計算可能です。モノマー用機能とポリマー用機能の違いは、例えばポリエチレンであれば、末端 を CH3 にするか、CH2 にするか、だけの違いとなります。また、モデリングされた分子の結合の 種類(単結合、二重結合など)は計算結果に影響を与えます。

複数の分子構造に対し自動で連続的に処理したい場合は、コマンドラインよりバッチファイルを使用します。コマンドラインの記法は コマンドプロンプトからの実行方法 を参照してください。コマンドラインを使用すると、元ファイルのフォルダに csv ファイルと作業フォルダが作成されます。コマンドラインからポリマー向けの値を算出したい場合は、元ファイルにおいて隣のリピートユニットと結合する2か所の原子種をAt に変更してください。

例えば以下のようなバッチファイルを作成し、バッチファイルと同じ階層に mol2 ファイルを配置 してから、バッチファイルをダブルクリックすると、mol2 ファイルの分子について連続で計算が実 行されます。

```
cd %~dp0
for %%F in (*.mol2) do (
    C:\winmos10\winmostar.exe %%F -s -hsp
)
```

pause

ただし、バッチファイルを用いて長時間計算する場合に、「このスクリプトの実行を中止しますか?」、「このページのスクリプトが、Web プラウザーの実行速度を遅くしています。」、「スクリプトを実行し続けると、コンピューターが応答しなくなる可能性があります。」などの警告が都度表示される場合があります。その場合は、 こちらの Microsoft のページ の「Let me fix it myself」の方法で警告の出現を回避することができます。

## **Chapter 9**

# 他のソフトウェアとの連携

## 9.1 ChemDraw/Chem3Dとの連携

ChemDraw 上で構造式を描画して作成した分子は、次の *SMILES* 形式 または *mol* 形式 で Winmostar に読み込 むことができます。Chem3D で作成した 3 次元構造を読み込む場合は、SMILES または mol 形式を経由すると 立体構造や水素原子の情報が欠落するため、Chem3D から *Gaussian* 入力形式 で Winmostar に読み込ませてく ださい。

#### 9.1.1 ChemDraw から SMILES 形式で読み込む場合

操作手順は以下の通りです。

- 1. ChemDraw で分子をモデリングした後、 *Edit*  $\rightarrow$  *Copy As*  $\rightarrow$  *SMILES* をクリックします。
- 2. Winmostar で ファイル  $\rightarrow$  インポート  $\rightarrow$  *SMILES* をクリックし、 *Enter SMILES* の欄に先ほどコピーした 文字列をペーストします。
- 3. Import ボタンをクリックすると、メインウィンドウに分子がモデリングされます。

#### 9.1.2 ChemDraw から mol 形式で読み込む場合

操作手順は以下の通りです。

- 1. ChemDraw で分子をモデリングした後、 *File* → *Save As* をクリックし、MDL MolFile 形式を選択しファ イルを保存します。
- 2. Winmostar で先ほど保存したファイルを開きます。ChemDraw で出力した mol ファイルには水素が含まれ ず、結合長も適切でないため、Winmostar 上で自動的に結合長の調整と水素の付加が行われます。

#### 9.1.3 Chem3D から Gaussian 入力形式で読み込む場合

操作手順は以下の通りです。

- 1. Chem3D で分子をモデリングした後、 *File* → *Save As* をクリックし、 *Gaussian Input* (.gjf,.gjc) 形式 を選 択しファイルを保存します。
- 2. Winmostar で先ほど保存したファイルを開くと、メインウィンドウに分子が表示されます。その後、使用 したいソルバのキーワード設定から計算内容を設定してください。

## **Chapter 10**

# その他のトピック

## 10.1 コマンドプロンプトからの実行方法

コマンドプロンプトから各種のオプションを指定して起動することが可能です。 オプションに入力ファイル名と処理内容を指定します。 指定できる処理内容は、以下の通りです。

	-smilesballoon
) )カファイルた SMILES として初辨し公子た構筑	
(フロフェッショナル版フレミアム限定)	
	-smilesbabel
入力ファイルを SMILES として認識し分子を構築	
(OpenBabel を使用)	
(プロフェッシュナル版プレミアム限定)	
MOPAC の実行	
	-mopac1, -mopac2, -mopac3
	(それぞれ ツール → 環境設定 メニュー → プログラ
	ムパス において選択した 3 種の MOPAC バイナリに
	対応)
分子表面積, 体積	-molsv
アスペクト比	-aspect
結合長を自動調整	-adjust
すべての原子に付加	-hadd
水素を削除	-hdel
簡易構造最適化	-clean
GAMESS を使用 (RESP 電荷) (1分子のみ対応)	-resp (電荷値、中性分子の場合は 0)
	-am1bcc (電荷値、中性分子の場合は 0)
Agnung を使用(AM1 BCC 1 分子のみ対応)	
(ノロノエッショノル版ノレミアム限定)	
	nack (公Z種1のファイルタ):(公Z種1の個物):(公
	-pack() 」 種 1 の ファイル 2) (分 ス 種 1 の 個 数) () 路 ス 種 2 の ファイル 2) (分 ス 種 2 の 個 数) () 路 同样に
LAMMPS の計算(ローカルジョブ)	-lammps (力場の種類) (1 つ目のジョブのプリセット
(Impset ファイルは LAMMPS キーワード設定ウィ	名または lmpset ファイル名):(2 つ目のジョブのプリ
ンドウの Save ボタンから取得可能 )	セット名または設定ファイル名):(以降、同様に列挙)
(Impset ファイルは第一引数からの相対パスで指定)	(並列数)
	-lammpsfile (一般分子向けの力場の種類) (水分子向け
	の力場の種類) (並列数) (出力する data ファイルの名
LAMMPS 座標ファイルの出力	前)
(力場の種類は 力場を割り当て を参照)	
(プロフェッショナル版プレミアム限定)	
	-gromacsfile (一般分子向けの力場の種類) (水分子向
   Gromacs 麻煙・力提ファイルの出力	けの力場の種類) (並列数) (出力する gro ファイルの
	名前) (出力する top ファイルの名前)
(ノロフェッショナル版フレミアム限定)	
ファイル形式を亦再して保存	o output file avtencion
ノァイルが式を支定して体子	-o output_me_extension
<b>10.1.</b> コマンドプロンプトからの実行方法	209
ファイル名を指定して保存	
(相対パス指定の場合は UserData フォルダが起点)	

使用例:

```
\"C:\\winmos10\\winmostar.exe\" COO -s -smilesballoon -outfile ethanol.mol2
\"C:\\winmos10\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos10\\samples\\dbt.dat\" -s -mopac1
\"C:\\winmos10\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos10\\samples\\dbt.dat\" -s -o pdb
\"C:\\winmos10\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos10\\samples\\dbt.dat\" -s -o pdb
\"C:\\winmos10\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos10\\samples\\dbt.dat\" -s -adjust -
\ooddahad -clean -o gjf
\"C:\\winmos10\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos10\\samples\\ch4.mol2\" -s -pack ch4.
\ooddahad -clean -o gjf
\"C:\\winmos10\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos10\\samples\\ch4.mol2\" -s -pack ch4.
\ooddahad -clean -o gjf
\"C:\\winmos10\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos10\\samples\\ch4_100_etoh_2.mol2\" -s_
\ooddahad -lamps "Dreiding" "Minimize (fast):NVT (fast):NPT (fast)" 2
\"C:\\winmos10\\winmostar.exe\" \"C:\\winmos10\\samples\\ch4_100_etoh_2.mol2\" -s_
\ooddahad -lampsfile GAFF SPC/E ch4_100_etoh_2_auto.data
```

初期入力ファイルを第一引数に指定します。

-sを指定した時は処理後に自動的に Winmostar が終了するので、DOS の BAT ファイルを記述し、MOPAC 等を連続的に実行することができます。Samples\wmjobs.bat を参考にしてください。

-sを除く-から始まるコマンドは指定した順に実行されます。

Gaussian と GAMESS を連続実行する場合は、この方法ではなく ツール → 連続実行 を使用します。

## 10.2 CygwinWM

CygwinWMは、Winmostar向けのCygwinです。本マニュアルで以下のように記載されている処理において、Winmostarから内部的に呼び出されます。

警告:本機能を利用するためには CygwinWM のセットアップ が必要です。

インストール方法は CygwinWM のセットアップ に記載されています。

警告:

- 一部セキュリティ対策ソフトは、CygwinWM内の正常なモジュールを誤動作により自動 で削除または妨害することがあります。
- Winmostar 公式 HP から CygwinWM のインストーラをダウンロードしてインストールした場合は、ヘルプ → CygwinWM を診断 機能を使用することで、CygwinWM 内のファイルの欠落の有無を簡易的に確認できます。(ファイルの有無しか確認しません。)
- CygwinWM を使用する機能で不具合が起きた場合は、セキュリティ対策ソフトの活動レポートもご確認ください。

 $\Psi - \mu \rightarrow Cygwin$ を選択すると、CygwinWMのコンソールを直接起動することが可能です。

## 10.3 力場に関して

### 10.3.1 Universal Force Field

Winmostar の分子動力学計算(Gromacs, LAMMPS)で利用できる Universal Force Field(以下、UFF) は次のように実装されています。

まず、OpenBabel の UFF パラメータアサイン機能を利用して、対象となる分子にパラメータをアサ インします。その際に、UFF の原著論文 [Rappe1992] に書かれた atom type に相当しない原子につ いては、Coordination を自動で変更して近い atom type がアサインされます。詳細は、OpenBabel の ソースコードを参照してください。

UFFの関数形は Gromacs、LAMMPS で使用可能な関数で完全に再現することができません。その ため、OBGMX [Garberoglio2012] の方法で Gromacs および LAMMPS で使用可能な関数向けに係 数を変換しています。Improper torsion については、LAMMPS の improper\_style fourier を使わず、 Gromacs と同じ harmonic 関数 (improper\_style harmonic) で計算しています。

また、OBGMXの方法では、square planar、octahedral構造におけるAngle ポテンシャルで、極小点が1か所しかないために適切な安定構造を与えないため、Winmostarでは4次関数を使用しています。4次関数の係数は、以下の方針で決定しました。

- •2か所のポテンシャル極小点の位置(角度、エネルギー)を再現する
- •2か所のポテンシャル極小点の間にある極大点のエネルギーを再現する
- ただし、LAMMPSの場合は0次の係数を設定できないため、エネルギーのみ定数分シフトする(エネルギーの微分である力はGromacsとLAMMPSで一致するので、実用上の影響はないと思われる)

上記の方針のため、得られる平衡構造と分布は UFF 原著のポテンシャルを使った場合から大きく変化しないと期待されます。なお、広く使われている OpenBabel においても、Angle ポテンシャルに 独自のペナルティ関数を追加しており、厳密には UFF 原著のポテンシャルからずれがあります。

Winmostar では square planer, octahedral の Angle の係数を以下のようにしました。  $C_{i,\text{gro}}$  は Gromacs の 4 次関数の係数、  $k_{a,\text{uff}}$  は UFF の係数です。LAMMPS の場合は  $C_{2,\text{gro}}$  と  $C_{4,\text{gro}}$  だけが使われます。

$$C_{0,\text{gro}} = \frac{1}{4} (2 - \sqrt{2}) k_{a,\text{uff}}$$
  

$$C_{1,\text{gro}} = 0$$
  

$$C_{2,\text{gro}} = -\frac{8}{\pi^2} (2 - \sqrt{2}) k_{a,\text{uff}}$$
  

$$C_{3,\text{gro}} = 0$$
  

$$C_{4,\text{gro}} = \frac{64}{\pi^4} (2 - \sqrt{2}) k_{a,\text{uff}}$$
  

$$\theta_{0,\text{gro}} = \frac{3}{4} \pi$$

また、Gromacs における Improper torsion angle の計算は粒子のインデックスの順番(jkl)に依存します(LAMMPS は依存しない)。そのため、Winmostar はインデックスの順番を自動調整し、Gromacs と LAMMPS での計算結果が一致するようにしています。(詳細は *Gromacs→LAMMPS* の力場ファイル変換)

#### 10.3.2 Dreiding

Winmostar の分子動力学計算 (Gromacs, LAMMPS) で利用できる Dreiding は次のように実装されています。

Improper torsion については、Gromacs で Dreiding の関数が実装されておらず、Gromacs では harmonic (funct=2)、LAMMPS では improper\_style umbrella で計算するようにしています。

Winmostar では以下のように係数を変換しています。  $k_{\xi,gro}$  は Gromacs の係数、  $K_{lmp}$  は LAMMPS の係数です。ポテンシャル極小点におけるテーラー展開の 4 次項以降を無視した形式を採用しています。

$$K_{\rm lmp} = \frac{1}{2} k_{\xi,\rm gro}$$

## **10.4 SDF**ファイルの編集

SDF ファイルはマテリアルインフォマティクス、機械学習などに広く用いられているフォーマットです。

10.4.1 SDF ファイルの可視化

開く から SDF ファイルを選択して開くと Animation ウィンドウ が開き、SDF ファイル内の各構造 を順番に確認することができます。

#### **10.4.2 SDF**ファイルの編集

- 1. 上記の方法で SDF を開いた後、*Animation* ウィンドウの *File* → *Export All Frames Separately* を選択する と、各構造を選択したフォルダの中に個別のファイルとして出力することができます。
  - SDF ファイルの各構造に対して結合長の調整、水素の付加、簡易構造最適化を行いたい場合は、*Animation* ウィンドウの *Automation* → *Check All* をクリックしてから *File* → *Export All Frames Separately* または *File* → *Export SDF File* を実行してください。
  - Gaussian の入力ファイル (gif ファイル)を出力したい場合は、*File* → *Export All Frames Separately* を 実行する前に キーワード設定 を実行してください。
- 2. その後、各構造に対応するファイルを 開く または Winmostar にドラッグアンドドロップして開き、編集 し、 上書き保存 から上書き保存します。
- 3. 複数ファイルを *SDF* 形式に集約 から先ほど出力したフォルダを選択すると、再び SDF ファイルを作成す ることができます。

## **10.5 Winmostar**の機能検証

Winmostar は、世界中の研究者が使用しているオープンソースソフトウェアを呼び出すことにより、高い品質 を維持しています。一方で、Winmostar 独自の実装に強く依存する機能もあり、ここではそのような機能の検 証結果を示します。ここに示した検証はリリース前に実行されています。

### 10.5.1 Gromacs→LAMMPS の力場ファイル変換

Winmostar は、Gromacs 用の top ファイルを変換することで汎用力場を用いた LAMMPS 用の data ファイルを 生成しています。この変換機構を用いて Gromacs と LAMMPS を用いて同じ系に対してエネルギーを計算した 結果を示します。

力場	Bond	Angle	Dihedral	Improper	Coulomb	Vdw	Total
UFF	2.57E-8	6.965E-9	1.17E-8	2.11E-8	7.21E-8	3.71E-8	7.55E-9
Dreiding	6.32E-9	4.25E-8	7.20E-9	5.37E-8	7.21E-8	3.62E-8	2.47E-8
GAFF	2.82E-8	3.06E-8	1.10E-8	2.97E-9	7.61E-8	9.51E-10	3.62E-9
OPLS-AA/L+GAFF	2.82E-8	3.06E-8	1.10E-8	2.97E-9	7.22E-8	1.67E-8	6.31E-8
OPLS-AA	1.64E-9	2.60E-8	1.10E-8	2.97E-9	7.22E-8	1.67E-8	5.93E-9

表 1: エネルギー各成分の Gromacs, LAMMPS 間相対エネルギー差

詳細な計算条件は以下の通りです。

- ベンゼン1分子、AM1-BCC電荷で計算
- ・自由境界条件、カットオフ半径 20 、結合長・角度の拘束なし
- Gromacs は 5.0.7 倍精度版、LAMMPS は 2016 年 3 月 9 日版を使用
- Coulomb, Vdw は 1-4 相互作用を含む
- Dreiding の Improper は LAMMPS の improper\_style umbrella に相当する関数が Gromacs に実装されてい ないためどちらも improper harmonic で計算
- Gromacs の 1-4 相互作用スケーリング係数は単精度で内部処理されているため、LAMMPS でも単精度相当の係数を設定
- OPLS-AA では mktop にて生成したファイルを使用

上の表より、すべての成分について 8-10 桁程度 Gromacs と LAMMPS の間でエネルギーが一致していることが わかります。Gromacs と LAMMPS の細かい実装の差(各種関数の近似計算、並列計算など)により厳密に一 致させることは困難ですが 8-10 桁程度の一致であれば実用上問題ないと考えられます。

また、同様のテストを、エネルギーの各成分に着目した系、複数分子系などでも実施しています。

## Chapter 11

# 既知の不具合

- Winmostar を管理者権限で起動するとドラッグアンドドロップでファイルを開けない。
- Windows の"Use Unicode UTF-8 for worldwide language support"オプションを有効にすると一部のソフトが動作しなくなる。
- Animation、Submit Job などの一部のサブウィンドウを開き、閉じた後にまた開こうとしても出現しない。
- Animation ウィンドウ下部のグラフ表示が崩れる。その他 UI の表示が崩れる。
- ローカルマシンのジョブが流れているコンソールウィンドウ内でテキストを範囲選択すると、Job Manager 上でそのジョブが終了と認識されてしまう。
- ローカルマシンで Gromacs を実行中に Gromacs がフリーズする。
- Gromacs の Chi または DPD パラメータ計算機能において本来の定義の 0.5 倍の値が出力される。
- *RISM* 対応版の *Quantum ESPRESSO* 使用時に、メインウィンドウのキーワードが変更されていないに も関わらず変更されたと表示されることがある。
- アニメーションウィンドウからアニメーション GIF を出力する際に、フレーム数が多いとエラーがで ることがある。
- Gromacs が出力する Isothermal Compressibility (等温圧縮率)、Adiabatic Bulk Modulus (断熱体積弾性 率)の単位が間違っている。
- Gromacs のトラジェクトリを読み込んだ構造または、最終構造において、本来繋がっているべき分子がバラバラに表示される。
- [ファイル]-[インポート]-[SMILES] で SMILES 文字列を読み込んだが、意図通りの構造が読み込まれない。
- Winmostar の処理中に Windows (エクスプローラ)上で直接作業ディレクトリ、作業フォルダを削除す ると Winmostar がフリーズする。
- Animation ウィンドウからアニメーション GIF を出力しようとすると Access Violation エラーが発生する。
### **11.1 Winmostar**を管理者権限で起動するとドラッグアンドドロップでファ イルを開けない。

現行の Winmostar (Winmostar V.8) では、Winmostar を管理者権限で起動するとドラッグアンドドロップでファ イルを開けません。将来的に修正予定ですが、作業時期は未定です。(2018 年 5 月 24 日報告)

# **11.2 Windows**の"Use Unicode UTF-8 for worldwide language support"オプションを有効にすると一部のソフトが動作しなくなる。

英語版 Windows 10(1803) において、[Control Panel]-[Region]-[Administrative]-[Change system locate...]-[Use Unicode UTF-8 for worldwide language support] にチェックが入っていると、FDMNES の実行に失敗するという報告 がありました。FDMNES 実行時に読まれる fdmfile.txt が BOM 付で出力されることによる不具合です。問題が 発生したタイミングで Winmostar を順次対応させていますが、他の機能で同様の問題が発生した場合はご連絡 ください。(2018 年 5 月 25 日報告)

### **11.3 Animation**、Submit Job などの一部のサブウィンドウを開き、閉じた 後にまた開こうとしても出現しない。

ごく一部の環境で確認されています。出現しない場合は、Alt+スペースキーを押すと[元のサイズに戻す][移動][サイズ変更]…などのメニューが出現するので、[移動]を選択しドラッグ操作するとウィンドウが再度出現します。あるいは、Winmostarを再起動することで一旦解消します。現在、よりよい対処方法を検討中です。(2018年6月14日報告)

### **11.4 Animation** ウィンドウ下部のグラフ表示が崩れる。その他 UI の表示が 崩れる。

デスクトップのテキストやその他の項目のサイズをデフォルト値(100%)から変更している場合は、表示が崩れます。Windows8の場合は[コントロールパネル]-[デスクトップのカスタマイズ]-[ディスプレイ]-[すべての項目のサイズを変更する]を[小-100%(規定)]に設定してください。Windows10の場合は[Windowsの設定]-[システム]-[ディスプレイ]-[カスタムスケーリング]を「100」に設定してください。(2018年6月26日報告)

### 11.5 ローカルマシンのジョブが流れているコンソールウィンドウ内でテキス トを範囲選択すると、Job Manager上でそのジョブが終了と認識され てしまう。

Windows10のコンソールウィンドウ上で、実行中のジョブのログのテキストを範囲選択すると、ジョブが終了 したと認識されます。これにより不具合が生じる場合は、出力されるログファイルを直接テキストエディタで 開き、そこでテキストを範囲選択、コピーなどしてください。範囲選択後、処理が中断する場合は、Enterキー を押すと処理が再開します。Windows10以降で発生します。(2018年7月20日報告)

### 11.6 ローカルマシンで Gromacs を実行中に Gromacs がフリーズする。

ごく一部のマシン上で、ローカルマシンで Gromacs を実行中に Gromacs がフリーズします。MD 計算の最中に 発生し、標準出力の内容が変化しなくなります。フリーズする箇所に再現性がありません。このような場合は、 Gromacs キーワード設定の「# of Threads」を1 にすると回避できます。無論処理は遅くなるので、本格的な計 算を流したい場合はリモートサーバを利用したリモートジョブ投入機能をお使いください。また、Winmostar で は Gromacs と似た操作方法で LAMMPS を使用できますので、LAMMPS をお使い頂くという選択肢もござい ます。(2020年12月4日報告)

# **11.7 Gromacs**の Chiまたは DPD パラメータ計算機能において本来の定義の 0.5 倍の値が出力される。

V9 または V8 のユーザの方は、不具合が修正されている 9.0.2 以降または 8.027 以降に更新してください。V7 の方はサポート期間外のため算出値に関してはご注意ください。(2019 年 6 月 2 日報告)

### **11.8 RISM** 対応版の Quantum ESPRESSO 使用時に、メインウィンドウの キーワードが変更されていないにも関わらず変更されたと表示されるこ とがある。

constant-mu 計算時 (lfcpopt = .True.) に、fcp\_mu の値が更新されたと誤判定されます。実際には値が変更され るわけではないため、そのまま使用しても問題ありません。(2019 年 6 月 2 日報告)

# **11.9** アニメーションウィンドウからアニメーション **GIF**を出力する際に、フレーム数が多いとエラーがでることがある。

*Export JPEG Images* を使用して連番 JPEG ファイルを出力し、その後各種の動画作成ソフトを利用してアニメーションのファイルを作成してください。(2020 年 1 月 29 日報告)

### **11.10 Gromacs** が出力する **Isothermal Compressibility**(等温圧縮率)、 Adiabatic Bulk Modulus(断熱体積弾性率)の単位が間違っている。

gmx energy のログに、Isothermal Compressibility の単位が「J/m<sup>3</sup>」と書かれていますが、正しくは「m<sup>3</sup>/J」で す。同様に、Adiabatic Bulk Modulus の単位は正しくは「J/m<sup>3</sup>」です。(2020 年 6 月 29 日報告)

# **11.11 Gromacs**のトラジェクトリを読み込んだ構造または、最終構造において、本来繋がっているべき分子がバラバラに表示される。

Gromacs 本体の不具合に由来しています。長時間の計算ほど発生する可能性が高くなります。ただし、周期境 界を考慮すると正しい原子配置となっているため、その MD 計算自体に問題はありません。特に界面ビルダで 2 つの系を接合するときなどに問題が生じます。バラバラになった分子を元に戻す場合は、[編集]-[周期境界条 件に基づき原子を再配置] において、[セルの内側に原子単位で再配置] をクリック →[適用] ボタンをクリック →[原子単位で再配置された構造を元に戻す] をクリック →[適用] ボタンをクリック →[OK] ボタンをクリック としてください。ただし、計算した時と同じセルでこの操作を行う必要があるため、界面ビルダなどを使用す る前に実行してください。(2020 年 12 月 25 日報告)

### **11.12** [ファイル]-[インポート]-[SMILES] でSMILES 文字列を読み込んだが、 意図通りの構造が読み込まれない。

SMILES を読み込むプログラムは世の中に何種類かあり、それぞれ若干の実装の違いにより生成される分子が変化してしまいます。Winmostar では SMILES の読み込みに OpenBabel または Balloon を使用しており、[Import SMILES] ウィンドウにおいて実際にどちらを使うか選択することができます。

例えば OpenBabel では"C[C@@H]1CCCC[C@@H]1C"(本来なら cis-1,2-Dimethylcyclohexane)が trans-1,2-Dimethylcyclohexane として認識されました。(2021年4月20日報告)

### **11.13 Winmostar**の処理中にWindows(エクスプローラ)上で直接作業ディ レクトリ、作業フォルダを削除するとWinmostarがフリーズする。

処理が終了している時または Winmostar が終了している時に削除してください。(2021年12月24日報告)

ヒント: 作業ディレクトリ

- 作業ディレクトリとは、メインウィンドウで開かれているファイルの名前に接尾辞を加えた名前のフォルダです。
  - 接尾辞はソルバの種類により変わります。
  - 例えば Gromacs の場合は、メインウィンドウで開かれているファイルが aaa.gro で、接 尾辞が \_gmx\_tmp の場合、作業ディレクトリの名前は aaa\_gmx\_tmp となります。
- メインウィンドウで開かれているファイルと同じ階層に置かれている必要があります。
- 継続ジョブの時も同名の作業ディレクトリで処理が流れますが、デフォルトでは継続ジョブの 実施直前に、直前のジョブの作業ディレクトリのバックアップが作成されます。
  - バックアップの名前は、重複する名前が存在しない範囲で一番小さい番号が付いたものになります。例えば、作業ディレクトリが aaa\_gmx\_tmp のときは aaa\_gmx\_tmp1 となります。
  - 番号が付いていないディレクトリが常に最新のものとなります。

### **11.14 Animation** ウィンドウからアニメーション **GIF** を出力しようとすると Access Violation エラーが発生する。

フレーム数が大きい場合や原子数が大きい場合に発生することがあります。Animation ウィンドウの [File]-[Export JPEG Images...] から連番 JPEG ファイルを作成し、その連番 JPEG ファイルを各種の動画作成ソフトでアニメーションファイルに変換してください。将来的にはアニメーション出力機能を抜本的に改良し、この問題を解決 することを予定しています。(2022 年 2 月 17 日報告)

### Chapter 12

# よくある質問・トラブルシューティング

#### 購入に関して

- Q. 代金の支払方法を教えてください。
- Q. 当社から発行される書類の種類を教えてください。
- Q. 代理店などエンドユーザ以外が注文する方法を教えてください。
- Q. Winmostar 本体と保守の価格を分割することは可能ですか?保守のみの販売はありますか?
- Q. 製品の保証書はありますか?
- Q. 個人利用での割引などありますか?個人向けライセンスはありますか?
- ライセンス・ライセンスコードに関して
  - Q. 特定ユーザライセンスの登録ユーザ変更は可能ですか?
  - Q. 教育機関向けライセンスを購入した時の所属機関から他の機関に移った場合、そのライセンス を使い続けることは可能ですか?
  - Q. 無償版、学生版、無料トライアルからプロフェッショナル版といった具合に、途中から製品を 購入するなどしてエディションを変更する際に再インストールは必要ですか?
  - Q. 無償版とプロフェッショナル版、といった具合に異なるエディションの Winmostar を複数イン ストールすることは可能ですか?
  - Q. すでに入力したライセンスコードを変更する方法を教えてください。
  - Q. MAC アドレスを表示する方法を教えてください。
  - *Q. Winmostar* のライセンス料に、*Gaussian* のライセンス料は含まれていますか? *Gaussian* のライ センスが付属した *Winmostar* のラインナップはありますか?
  - Q. ライセンス期限が来るとそれまで使用していた Winmostar はどうなりますか?
  - Q. 個人での学習目的に教育機関向けライセンスを購入できますか?
- サポート・保守に関して
  - Q. 不具合サポートやパッチ提供は受けられますか?
  - Q. 旧バージョンのサポート・保守はどこまで行われますか?
  - Q. Winmostar の開発元(製造元)はどこですか?製造地はどこですか?

- Q. 開発元(製造元)と直接連絡取ることはできますか?
- Q. 使用している Winmostar のアップデート・バージョンアップ・アップグレードは可能ですか?
- Q. 質問するときの注意事項はありますか?
- Q. 保守のみの販売はありますか?
- ソフトウェアの機能・利用について
  - Q.「Winmostar」の呼び方は何ですか?
  - *Q. Winmostar* は社内外のサーバやクラウドに接続しますか?*LAN* 接続していない状態でも利用可能ですか?
  - Q. Winmostar の動かす PC の最小・推奨スペックを教えてください。
  - Q. Winmostar で作成したデータを学会発表や論文に用いることは可能ですか?学会発表、論文投稿の際にどのように引用したらいいですか?
  - Q. Winmostar の画面を撮影した動画・画像を YouTube、SNS などのウェブ媒体にアップロードすることは可能ですか?
  - Q. Winmostar そのものに各種計算用ソフトがインストールされていますか?
  - Q. Winmostar はクラウド上で計算させていますか?
  - Q. Winmostar は GPU 計算に対応していますか?
  - Q. Intel と AMD のどちらの CPU の方が動作に適していますか? どちらがお勧めですか?
  - Q. Winmostar を使って並列計算は可能ですか?
  - *Q. Winmostar* を使って並列計算する際、利用できるコア数の上限はありますか?利用できるコア 数に応じて費用は変わりますか?
  - Q. Winmostar は macOS、Linux で動作しますか?
  - Q. Gaussian のインストール方法を教えてください。
  - Q. Winmostar で何原子あるいは何分子まで計算できますか?扱える原子数、分子数の上限はありますか?
  - Q. Winmostar で粗視化モデルの計算はできますか?
- ソフトウェア動作全般に関して
  - Q.思ったようにモデルを作成できません。計算できません。動作しません。
  - Q. 「ERROR: I/O error 32」と表示され処理に失敗します。
  - *Q. Cygwin* を使う処理が異常終了します。 / ツール → CygwinWM を診断 機能で … ERROR … と 表示されます。 / *Cygwin* の黒いウィンドウに child\_info\_fork::abort: … Loaded to different address: parent … != child … などと表示されます。
  - Q. ツール → CygwinWM を診断 機能で No reference file (... filelist\_cygwinwm.txt) was found... と 表示されます。
  - Q. ツール  $\rightarrow$  CygwinWM を診断 機能で WARNING ... some files are missing と表示されます。
  - Q. ジョブマネージャに登録されたジョブが実行されません。
  - Q. ジョブの実行時に「実行できません(アクセスが拒否されました。)」と表示アラートが出現し ジョブが開始されません。

- Q. Winmostar の各種機能やソルバーの実行など、黒いコンソール画面が出現する機能において、 黒いコンソール画面の処理が終わらず先に進みません。
- Q. ファイルを開いたり、分子をモデリングした際に、結合が出現しなくなってしまった。または、 無駄に結合が多く出現するようになってしまった。
- Q. Windows のエクスプローラ上で拡張子を表示するにはどうしたらいいですか?
- Q. マーカー (赤丸) やグループ選択 (青丸) が表示されなくなりました。
- •ファイル入出力に関して
  - Q. Winmostar 以外で生成されたファイルを Winmostar で開けません。また、Winmostar で生成したファイルを編集してから Winmostar で開こうとしても開けません。
  - *Q. MOL* 形式または *SDF* 形式のファイルを開くと、結合長が不自然になります。水素が出現しません。
- 分子のモデリング・系の作成に関して
  - Q. 化学結合の種類 (一重、二重など)を変更する方法を教えてください。
  - *Q*. MD → 溶媒を配置/系を構築 機能を実行すると Error : Failed to solvate. などと表示され処理に 失敗します。
- ・ ローカルマシンでの MPI・並列実行に関して
  - Q. MPICH が計算途中で終了します。
  - Q. LAMMPS, Quantum ESPRESSO の MPI 並列実行時に Unable to open the HKEY\_LOCAL\_MACHINE\SOFTWARE\MPICH\SMPD\process\???? registry key, error 5, ア クセスが拒否されました。という警告が表示されます。
- リモートジョブに関して
  - Q. 社内や学内のスパコンまたは Linux サーバにジョブを投げる方法を教えてください。
  - Q. Test Connection での接続テストは成功するが、ジョブの投入 (サブミット) に失敗します。
  - Q. Test Connection での接続テストは成功するが、WARNING が表示され各種の操作に失敗します。
  - Q. リモートサーバではどの種類の MPI (MPICH、 OpenMPI など)を使用できますか?
- MOPAC, CNDO/S, GAMESS, NWChem, Gaussian に関して
  - *Q. MOPAC、GAMESS、Gaussian、NWChem*のキーワード設定ウィンドウや *Easy Setup* ウィンド ウで、使用したい計算手法(*Hamiltonian*)、基底関数(*Basis Set*)が選択肢の中に見つかりませ ん。どのように設定したらいいですか?
  - Q.系のモデリング中や、計算結果を読み込んだ際に、不要な結合が表示されます。または結合が 表示されません。どのように対処したらいいですか?
  - Q. MOPAC で計算できる最大原子数はいくつですか?
  - *Q. MOPAC* のログに ATOMS \*\*, \*\*, AND \*\* ARE WITHIN .\*\*\*\* ANGSTROMS OF A STRAIGHT LINE と表示されて異常終了します。
  - *Q. MOPAC* を実行するとログに「*UNRECOGNIZED KEY-WORDS:(PM6*(ハミルトニアン名))」 と出力され計算が終了してしまいます。
  - *Q. Winmostar* に付属の *MOPAC* で溶媒効果(*COSMO*法)を使用するにはどうしたらいいでしょうか。

- *Q. Winmostar*内蔵以外の*MOPAC(MOPAC2016*など)で計算すると、一部の分子軌道しか表示されません。
- Q. CNDO/S で Method=INDO を使用したときに計算できません。
- *Q. GAMESS, Gaussian, NWChem* の *ESP*(静電ポテンシャル)の3次元表示を高速化することはできますか?
- *Q. GAMESS* の実行時に「\* *ERROR: MEMORY REQUEST EXCEEDS AVAILABLE MEMORY*」など とログに出力され計算が異常終了します。
- Q. Windows 版 GAMESS をインストールした直後は問題なく利用できていたが、ある時期から計算が全て途中で異常終了するようになりました。対処方法はありますか?
- Q. GAMESS において、1 原子だけの系の計算で「WARNING. NUMBER OF INTERNAL COORDI-NATES IS GREATER THAN (3N-6), BUT NO SYMMETRY COORDINATES ARE GIVEN.」と表示さ れて異常終了します。
- *Q. GAMESS* のログに「 \*\*\*\* ERROR \*\*\*\* PCM SPHERE(S) MUST HAVE A POSITIVE RADIUS 」と表示され異常終了します。
- *Q. GAMESS* の実行時に「*ERROR: BAD DELOCALIZED COORDINATES GENERATED!!!*」とログに出力され計算が異常終了します。
- Q. GAMESS で NMR 計算を実行しようとする (RUNTYP=NMR で計算をする)とエラーが出ます。
- Q. GAMESS で Diffuse 関数を使うと SCF 計算が収束しません。
- Q. 一部の分子において、Fireflyの optimaize 実行後、分子軌道 UVvis...を確認すると、「'\*\*\*\*\*\*\*' is not valid floating point value」というエラーがでます。
- *Q. NWChem* の並列実行時に「*Please specify an authentication passphrase for smpd:*」とログに出力され計算が流れません。
- *Q. NWChem* の実行時に「sym\_geom\_project: sym\_center\_map is inconsistent with requested accuracy」とログに出力され計算が流れません。
- Q. NWChem で溶媒効果を入れる方法を教えてください。
- Q. Gaussian で計算が正常に実行される時とされない時があります。
- Q. Gaussian の log ファイルを読み込んだのですが、軌道(固有)エネルギーなどが表示されません。
- Q. Gaussian で chk ファイルを読み込んだ計算を実施する方法を教えてください。
- Gromacs, LAMMPS に関して
  - Q. 分子動力学計算においてどのように系を平衡化したらいいですか。
  - *Q. MD* 計算において *SHAKE* 法などによる拘束は計算結果にどのような影響を与えますか? 拘束 方法はどのように選んだらよいですか?
  - Q. MD 計算を実行後、アニメーションを観たり、最終構造を見ていると、分子がセルの外側に出てしまうことがあるのはなぜですか?
  - Q. [MD]-[自動で電荷を割り当て] メニューで「Topology file not found」というエラーが表示され ます。解決方法はありますか?
  - Q. 力場を割り当てで処理に時間が掛かり終わりません。解決方法はありますか?
  - Q. 力場を割り当てでエラーが表示されます。解決方法はありますか?

- *Q. Gromacs, LAMMPS*(分子動力学計算)から誘電率を計算できますか?
- Q. 界面ビルダで作成した構造から MD 計算を実行しようとすると、力場の割り当てが失敗したり MD 計算破綻します。解決方法はありますか?
- *Q*. 圧力制御(*NPT* 一定または *NPH* 一定)を行うと、計算が途中で破綻します。解決方法はありますか?
- *Q. LAMMPS, Gromacs* で液体(有機物)-固体(無機物)間の相互作用パラメータをどのように決めたらいいですか?
- Q. Gromacs の最終構造やアニメーションを読み込んで取得した構造や、それに何かしらの編集を 行ってから再び MD 計算を実行すると力場の割り当てが失敗したり MD 計算が破綻します。解決 方法はありますか?
- *Q. Gromacs* において最終構造やアニメーションを読み込むと分子がバラバラに表示されることが ありますがなぜですか?
- Q. Gromacs の ER 法結果読み込みを実行しても結果が表示できません / エラーが出ます。
- Q. ある物質とある物質の間の相互作用を計算することは Winmostar で可能ですか?
- Quantum ESPRESSO, OpenMX に関して
  - Q. 手順通り Quantum ESPRESSO の擬ポテンシャルファイルをインストールしたが認識されません。
  - Q. Quantum ESPRESSO の擬ポテンシャルファイルの探し方が分かりません。どのように探したらいいですか?
  - Q. Quantum ESPRESSO を用いた計算が失敗します。計算結果の表示でエラーが出ます。
  - *Q. Quantum ESPRESSO*を用いて *Phonon* 計算を実行する際に、*ph.x*の出力 (*ph.out*) に「*third order derivatives not implemented with GGA*」と表示され計算結果を取得できません。
  - Q. Quantum ESPRESSO, OpenMX の SCF 計算または構造最適化計算が収束しません。
  - *Q. Quantum ESPRESSO* の *SCF* 計算が出力ファイル(.*pwout* または.*out*)に「*too few bands*」と表示され異常終了します。*nbnd* の設定方法が分かりません。
  - *Q. Quantum ESPRESSO*の *SCF* 計算が出力ファイル(.*pwout* または.*out*)に「*fixed occupations and lsda need tot\_magnetization*」と表示され異常終了します。どのように解決したらいいですか?
  - *Q. Quantum ESPRESSO* の *SCF* 計算が出力ファイル(.*pwout* または.*out*)に「*charge is wrong*」と 表示され異常終了します。どのように解決したらいいですか?
  - *Q. Quantum ESPRESSO*を用いて誘電関数を計算する際に、*epsilon.x*の出力(*eps.out*)に「*bad band number*」と表示され誘電関数を取得できません。
  - *Q. Quantum ESPRESSO*を用いて誘電関数を計算する際に、*epsilon.x*の出力(*eps.out*)に「USPP are not implemented」と表示され誘電関数を取得できません。
  - Q. Quantum ESPRESSO を用いて Phonon 計算に失敗し、計算結果を取得できません。
  - Q. フェルミ面を出力しようとしてもそれらしきものが表示されません。
  - Q. Quantum ESPRESSO (バンド計算)から誘電率を計算できますか?
  - Q. Quantum ESPRESSO で汎関数の種類はどのように設定しますか?
  - Q.系のモデリング中や、計算結果を読み込んだ際に、不要な結合が表示されます。または結合が 表示されません。どのように対処したらいいですか?

- *Q. OpenMX* で *MPI* を有効にしてローカルマシンで計算を実行すると、 *tcp\_peer\_send\_blocking: send() to socket 12 failed: Transport endpoint is not connected* というエラーが表示されます。
- アドオンに関して
  - Q. 溶解度パラメータ計算モジュールを用いてポリマーのハンセン溶解度パラメータを計算する際に、ポリマーの繰り返し構造(モノマー)の取り方の違いで出力される値が変化してしまう。
  - Q. 溶解度パラメータ計算モジュールを用いて取得したハンセン溶解度パラメータの値が、文献値 と大きく異なります。
  - Q. Winmostar V10 以降で溶解度パラメータ計算モジュールを使えますか?

### 12.1 購入に関して

12.1.1 Q. 代金の支払方法を教えてください。

A. 【法人の場合】 以下の条件での後払いとなります。

支払方法:当社指定銀行口座への現金振込 支払期日:納品翌月末日

【個人の場合】 PayPal にてクレジットカードでお支払いください。

### 12.1.2 Q. 当社から発行される書類の種類を教えてください。

A.

請求書・納品書・見積書を発行いたします。 ただし PayPal の場合のみ、PayPal から領収書を取得してください。 その他の書類を発行希望の際はご相談ください。ただし、内容によりお断りする場合もありますのでご了承く ださい。

### 12.1.3 Q. 代理店などエンドユーザ以外が注文する方法を教えてください。

A.

指定代理店をご利用ください。詳細は価格・購入をご確認ください。指定代理店を介したくない場合は、弊社(株式会社クロスアビリティ)からの直販のみ可能です。指定代理店を設けているのは、Winmostarの価格とサービスを、エンドユーザに適切な形で提供するためです。

### **12.1.4 Q. Winmostar**本体と保守の価格を分割することは可能ですか?保守のみの販売はあ りますか?

A.

分割することはできません。保守のみの販売はありません。教育機関向けのラインナップで保守が切れ、保守 を更新したい場合は、Winmostar本体も含めて再度購入頂く必要がございます。

#### 12.1.5 Q. 製品の保証書はありますか?

A.

保証書という形での書類はありませんが、ご購入時にご同意いただく 使用規約 と サポートサービス規約 に保 守等の保証書の内容に相当する文章が書かれておりますので、使用規約とサポートサービス規約を保証書の代 用としてご利用ください。

**12.1.6 Q.** 個人利用での割引などありますか?個人向けライセンスはありますか?

A.

特にありません。無償版については、個人でもご利用頂けます。プロフェッショナル版については、教育機関 に所属し教育機関での用務に使用する目的であれば教育機関向け、それ以外であれば民間企業・官公庁向けの ライセンスのご購入ください。

### 12.2 ライセンス・ライセンスコードに関して

**12.2.1 Q.** 特定ユーザライセンスの登録ユーザ変更は可能ですか?

- A. 民間企業・官公庁の場合は不可能です。教育機関の場合は、前回のユーザ変更(初回の変更の場合は購入)から1年以上経過していたら変更可能です。
- 12.2.2 Q. 教育機関向けライセンスを購入した時の所属機関から他の機関に移った場合、そのライセンスを使い続けることは可能ですか?
  - A. 購入時の機関の所属から外れた場合、永久使用権であっても使用できません。
- 12.2.3 Q. 無償版、学生版、無料トライアルからプロフェッショナル版といった具合に、途 中から製品を購入するなどしてエディションを変更する際に再インストールは必要で すか?

A. 不要です。これから使用したいライセンスコードを ツール → 環境設定 メニューの ライセンスコード に入 力してください。

**12.2.4 Q.** 無償版とプロフェッショナル版、といった具合に異なるエディションの Winmostar を複数インストールすることは可能ですか?

A. 可能です。その場合は、Winmostar のインストーラでエディションごとに別々のインストール先を指定して ください。 12.2.5 Q. すでに入力したライセンスコードを変更する方法を教えてください。

A. これから使用したいライセンスコードを ツール → 環境設定 メニューの ライセンスコード に入力してください。

学生の方で、無償版から学生版に切り替えたい場合は、ライセンス登録ページ で学生版にチェックを入れて再度ライセンス登録をしてください。

12.2.6 Q. MAC アドレスを表示する方法を教えてください。

A. Windows10 の場合は、まず スタートメニュー  $\rightarrow$  Windows システムツール  $\rightarrow$  コマンドプロンプト をクリッ クしてコマンドプロンプトを起動します。次に、コマンドプロンプトのウィンドウで ipconfig /all と入力し Enter キーを押します。様々な情報が出力されるので、その中から「物理アドレス」の行を探してください。その内容が MAC アドレスです。

「物理アドレス」行が複数ある場合、Winmostar のノードロックライセンス購入時に申請する MAC アドレス は、基本的にどの「物理アドレス」でも大丈夫です。

### **12.2.7 Q. Winmostar** のライセンス料に、Gaussian のライセンス料は含まれていますか? Gaussian のライセンスが付属した Winmostar のラインナップはありますか?

A. Winmostar のライセンス料に、Gaussian のライセンス料は含まれていません。Gaussian のライセンスが付属 した Winmostar のラインナップはありません。Gaussian の代理店から別途ご購入ください。

#### **12.2.8 Q.** ライセンス期限が来るとそれまで使用していた Winmostar はどうなりますか?

A. ライセンス期限が来た後 Winmostar を起動すると、ライセンスコードを入力するウィンドウが立ち上がりま す。再び Winmostar のライセンスを更新し入力すると、ライセンス期限が来る前の状態を引き継いで使用する ことができます。

#### 12.2.9 Q. 個人での学習目的に教育機関向けライセンスを購入できますか?

A.

現時点で教育機関に所属し、教育機関での用務に使用しない限り、教育機関向けライセンスをご購入頂けません。個人での利用については Q. 個人利用での割引などありますか?個人向けライセンスはありますか? をご確認ください。

### **12.3** サポート・保守に関して

### 12.3.1 Q. 不具合サポートやパッチ提供は受けられますか?

使用規約の内容に基づき実施されます。最新の使用規約はこちら(Winmostar V10使用規約)です。

12.3.2 Q. 旧バージョンのサポート・保守はどこまで行われますか?

A. ご使用中のバージョンの Winmostar に関する、有効な使用規約に記載の内容に基づきます。また、操作方法の簡単な案内は、可能な範囲で対応します。

**12.3.3 Q. Winmostar** の開発元 (製造元) はどこですか? 製造地はどこですか?

A. 株式会社クロスアビリティです。製造地は日本です。

**12.3.4 Q.** 開発元 (製造元)と直接連絡取ることはできますか?

- A. 問い合わせフォーム から連絡を取ることができますが、対応の可否は利用規約に基づきます。最新の使 用規約はこちら(Winmostar V10使用規約)です。 有償サポート を利用することで、より進んだメール でのサポートが可能となります。
- **12.3.5 Q.** 使用している Winmostar のアップデート・バージョンアップ・アップグレードは 可能ですか?

A. マイナーバージョン(およびリビジョン)の更新については、利用可能期間内であれば何回でも実施可能で す。メジャーバージョンの更新については、永久使用権の場合はライセンスの更新が必要で、年間使用権の場 合は実施可能です。

例として、「V8.039」については、「8」がメジャーバージョン、「039」がマイナーバージョンを指します。 「V9.1.0」については「9」がメジャーバージョン、「1」がマイナーバージョン、「0」がリビジョンを指します。 例えば、Winmostar V9の永久使用権のライセンス取得者は、V9.1.0 から V9.1.5 や V9.4.4 に更新することは可 能ですが、V10.0.0 に更新することは不可能です。

#### 12.3.6 Q. 質問するときの注意事項はありますか?

A. 計算が上手く流れない等の質問の場合、原則として状況を再現するインプットやアウトプットファイルをお 送り下さい。

#### 12.3.7 Q. 保守のみの販売はありますか?

A.

Q. Winmostar 本体と保守の価格を分割することは可能ですか?保守のみの販売はありますか? をご確認ください。

### 12.4 ソフトウェアの機能・利用について

#### **12.4.1 Q.**「Winmostar」の呼び方は何ですか?

A.「ウインモスター」です。Wikipedia 等では誤情報が掲載されることがありますが、こちらが正式な呼び方です。

**12.4.2 Q. Winmostar** は社内外のサーバやクラウドに接続しますか**?LAN** 接続していない 状態でも利用可能ですか**?** 

A. リモートジョブを使う場合のみ接続します。デフォルトの操作方法では、一切外部ネットワークに接続する ことはありません。Winmostarの動作に、ネットワーク接続は必須ではないため、オフライン環境でも使用す ることができます。ネットワークに接続していない PC にインストールする場合は、インストールの手順で登 場する各種ソフトウェアを予め他の PC でダウンロードし、ネットワーク接続していない PC に USB メモリな どでコピーしたうえで、インストールの手順に従いインストールを行ってください。

12.4.3 Q. Winmostar の動かす PC の最小・推奨スペックを教えてください。

A. 最小・推奨スペック をご確認下さい。

- **12.4.4 Q. Winmostar** で作成したデータを学会発表や論文に用いることは可能ですか?学会 発表、論文投稿の際にどのように引用したらいいですか?
- A. 使用いただいて問題ありません。発表される際には引用についての通りに引用してください。

# **12.4.5 Q. Winmostar**の画面を撮影した動画・画像を **YouTube**、**SNS** などのウェブ媒体に アップロードすることは可能ですか?

A. 可能です。アップロードする際には、WinmostarのHPのURLを引用し、Winmostarを使用していること、 使用したWinmostarのバージョンを明記してください。なお、ライセンスキーが表示される環境設定ウィンド ウなどのアップロードは固く禁じます。

### **12.4.6 Q. Winmostar** そのものに各種計算用ソフトがインストールされていますか?

A. MOPAC、CNDO/S のみ Winmostar にインストールされています。それ以外のソフトは、ライセンスの関係 上 Winmostar には同梱されておらず、別途インストールする必要があります。多くのソフトは無料でインス トール可能で、その手順は インストール で紹介されています。

### **12.4.7 Q. Winmostar** はクラウド上で計算させていますか?

A. クラウド上で計算させることも可能ですが、させないことも可能です。デフォルトではクラウドを利用せず、Winmostar をインストールした Windows PC 上で計算をさせます。

### **12.4.8 Q. Winmostar**は **GPU**計算に対応していますか?

A. GPU 計算に対応していますが、デフォルトでは GPU を使わない設定になっています。GAMESS, Gaussian, Gromacs, LAMMPS, Quantum ESPRESSO が GPU に対応していますが、動作確認および設定作業は有償での対応となります。

- 12.4.9 Q. Intel と AMD のどちらの CPU の方が動作に適していますか? どちらがお勧めで すか?
- A. 一般に、シミュレーションにおいてどちらが優れているということはありません。

### **12.4.10 Q. Winmostar** を使って並列計算は可能ですか?

A. 可能です。詳細は、各ソルバのキーワード設定ウィンドウのページをご確認ください。

### **12.4.11 Q. Winmostar** を使って並列計算する際、利用できるコア数の上限はありますか? 利用できるコア数に応じて費用は変わりますか?

A. ユーザが用意したハードウエアの範囲内で、制限なく並列数を指定して頂けます。並列数に応じて、 Winmostar のライセンス料は費用は変化しません。ローカルジョブの場合は、*Winmostar Job Manager* で設定 した最大コア数を上回るとジョブが流れないため、最大コア数の設定を変更してください。

### **12.4.12 Q. Winmostar**は macOS、Linux で動作しますか?

A. Winmostar のアプリケーション本体は Windows OS のみサポートされています。サポートされている Windows OS の確認は 動作環境 で可能です。macOS、Linux で Winmostar のアプリケーション本体を動かす場 合は、VirtualBox などの仮想環境上に Windows OS をインストールした上でご使用ください。 リモートジョブを実行するコンピュータには、Linux・macOS を使用できます。

### 12.4.13 Q. Gaussian のインストール方法を教えてください。

- A. Gaussian のインストール方法は、Gaussian の販売代理店より入手してください。Gaussian をインストー ルした後は、 ツール → 環境設定 → プログラムパス において、Gaussian のプログラムパス (g03.exe, g09.exe, g16.exe など)を選択してください。
- **12.4.14 Q. Winmostar** で何原子あるいは何分子まで計算できますか?扱える原子数、分子数の上限はありますか?
  - A. 動作速度は考えないとすると、100万原子程度までの動作確認はしています。動作速度は実行環境に強く 依存するため、ご購入前に無料トライアルでご確認ください。なお、将来のバージョンでは Winmostar の 高速化を計画しております。

### **12.4.15 Q. Winmostar** で粗視化モデルの計算はできますか?

A. 純粋な量子化学計算、第一原理計算、古典分子動力学計算ではないという意味での粗視化モデルとしては、 LAMMPS を用いた散逸粒子動力学(DPD)計算と Kremer-Greset モデルに対応しています(Kremer-Greset については別途お問い合わせください)。United atom モデルやその派生の粗視化モデルは今後対応予定で す。それ以外のモデルについては、個別にお問い合わせください。個別対応としている理由は、粗視化モ デルを用いたほとんどの研究が、ソフトを使うだけでは有意義な結果が得られず、入念かつ慎重なコンサ ルティングが必要であるという認識を我々が持っているためです。Winmostar のサポート事例では、十分 に検証を行った粗視化モデルのシミュレーション結果を紹介しています。

### 12.5 ソフトウェア動作全般に関して

12.5.1 Q. 思ったようにモデルを作成できません。計算できません。動作しません。

A. まず、以下の基礎的なチェックを行ってください。

- インストール時の注意事項を確認する。
- 使用中の Winmostar が無償版、学生版、プロフェッショナル版、プロフェッショナル版(トライアル)の いずれに該当するか確認し、問題を起こしている機能がその版で使用可能か機能表を見て確認する。
- ・使用中のセキュリティ対策ソフトの活動記録を確認し、Winmostar および CygwinWM のインストールフォ ルダの下のアプリケーションの活動が妨害された記録がないか確認する。
- Winmostar を最新版にアップデートし(使用中のバージョンと共存させることが可能) 既知の不具合、 よくある質問・トラブルシューティングに類似する状況がないか確認する。
- 保存するファイルやそれを含むディレクトリ(上位階層全てを含む)の名前に、日本語、全角文字などのマルチバイト文字や特殊記号(スペースも不具合の原因となります)が含まれている場合は、一部ソルバで不具合が出ることがあるため半角英数のみとなるようにする。
- 実行した処理で何かしらログが出力されているか作業フォルダを確認し、ログの内容を確認する。
- 計算が開始されたが計算結果がおかしいと感じた場合は、メインメニューで使用したソルバのメニューから「ログを表示」などをクリックし、ログの内容を確認する。
- 計算の不具合については、各種ソルバのバージョンが、Winmostar のインストールガイドで推奨している バージョンと同じであるか確認する。(特に Gromacs, LAMMPS, Quantum ESPRESSO)

次に、メモ帳などで以降の作業の記録を取れるようにしてください。不具合の再現方法が判明した場合、作業の記録と一緒にご報告頂くと比較的短時間で修正できることがあります。

そして、Winmostar の チュートリアル のうち、これから使いたいソルバの基礎編チュートリアルをトレースしてください。

基礎編チュートリアルのトレースに失敗する場合は、以下を試してください。

- 誤操作でないことを確認するため再度トレースする。
- ・ 並列実行している場合は、シリアル実行(並列数1)に切り替える。
- Winmostar を再起動する。
- OS を再起動する。
- セキュリティ対策ソフトで、Winmostar、CygwinWMのインストールフォルダ、およびソルバ(MPIを含む)が監視対象外に設定する。
- CygwinWM を使用している場合は、 ヘルプ → CygwinWM を診断 で CygwinWM の簡易的な診断を実行 する。
- Winmostar, CygwinWM および使用したソルバを再インストールする。
- 他の PC で試す。

次に、最終的に計算したいものに極力近いと思われるチュートリアルをトレースしてください。それに成功したら、最終的に計算したいものに少しずつ寄せるように計算条件を変更し(原子数、スーパーセルのサイズ、 重合度、元素の種類、相の数など)問題発生箇所を特定したら以下を試してください。

- ・よくある質問・トラブルシューティングに類似事例がないかご確認ください。
- ・問題発生箇所が Winmostar が外部ソフトを呼んでいる部分の場合は、そのソフトの情報もご確認ください。

• Cygwin を用いた処理で落ちている場合は、 Cygwin の一般的な不具合 をご確認ください。

#### **12.5.2 Q.「ERROR: I/O error 32」**と表示され処理に失敗します。

A. 処理に関わるファイルが Winmostar 以外のアプリケーションまたはプロセスで開かれていてロックされてい る場合や、削除されている可能性があります。 OS を再起動し他のアプリケーションが開いていない状況でお試しください。

**12.5.3 Q. Cygwin**を使う処理が異常終了します。/ ツール → *CygwinWM*を診断 機能で *…* 

**ERROR** ... と表示されます。/ Cygwin の黒いウィンドウに child\_info\_fork::abort: ... Loaded to different address: parent ... != child ... などと表示されます。

- A. 以下の手順を上から順に一つずつ実行し、その都度、エラーが起きた処理を再実施してください。
  - 1) 一般的な一般的な不具合の対処を実施する
  - 2) マシンを再起動する
  - Windows セキュリティ開き アプリとブラウザーコントロール から Exploit Protection の設定 ク リックする。そして、 イメージのランダム化を強制する の値を 既定でオフにする か 既定値 を使用する(オフ) に変更する。
  - 4) 使用している CygwinWM の cygwin1.dll 以外を検索して削除し、マシンを再起動する

#### 警告:

- 同一マシン上に CygwinWM 以外に cygwin1.dll が存在して場合の一部のケースでこの 操作が必要です。
- cygwin1.dll は他に Cygwin をインストールしていなくても、各種フリーウエアなどに 同梱されていることがあります。
- 5) 使用しているマシン上の全ての Cygwin が終了している状態で、Windows の [ファイル名を指定して実行] にて C:\cygwin\_wm\bin\ash.exe (CygwinWM を C:\cygwin\_wm にイン ストールした場合)を実行し、 /bin/rebaseall -v というコマンドを実行しマシンを再 起動する。
- 6) セキュリティ対策ソフトを一時的に無効する。
- 7) Cygwinの FAQ に記載されている不具合を起こしがちなソフトを無効にする。
- 8) その他、 Cygwin の fork() 関連の失敗に関する FAQ に記載された方法を試す。
- 9) Cygwin 公式サイト の Cygwin を新規にインストールし、そこからターミナル(端末)を起動 できるか確認する。

## **12.5.4 Q.** $\vee - \mu \rightarrow CygwinWM$ を診断 機能で No reference file (... filelist\_cygwinwm.txt) was found... と表示されます。

A. CygwinWM 診断機能ではまず最初に、CygwinWM をインストールしたフォルダの直下の filelist\_cygwinwm.txt というファイルを探しに行っており、このファイルがないというエラーが出ています。 CygwinWM をインストールされた場所(デフォルトでは C:\cygwin\_wm)で filelist\_cygwinwm.txt を探し、 その直上のフォルダを [ツール]-[環境設定]-[プログラムパス] で指定してください。filelist\_cygwinwm.txt が見 つからない場合は CygwinWM のインストールに失敗した可能性があるので、セキュリティソフトの設定などを見直したうえで CygwinWM を再インストールしてください。

12.5.5 Q. ツール → CygwinWM を診断 機能で WARNING ... some files are missing と 表示されます。

A. CygwinWM を再インストールしてください。

再インストールしても表示される場合は、セキュリティ対策ソフトを一時的に無効にするか、インストール 先・インストーラを監視対象外に指定してください。

12.5.6 Q. ジョブマネージャに登録されたジョブが実行されません。

A. 指定した MPI の並列数がジョブマネージャの MaxCore の設定より大きいとジョブは実行されません。 MaxCore の初期値値は実行している PC のコア数に設定されているはずですが、それが変更されていないか、 または MPI の並列数をそれより多く設定していないか確認してください。 ジョブマネージャを使用しないで実行したい場合は、 ツール → 環境設定 画面の 計算 タブの「MOPAC をジョ プマネージャで実行」や「その他のソルバをジョプマネージャで実行」のチェックを外します。

12.5.7 Q. ジョブの実行時に「実行できません(アクセスが拒否されました。)」と表示アラートが出現しジョブが開始されません。

A. 一般的な不具合の対処 を試してください。特に、インストールした Winmostar およびソルバのフォルダを セキュリティ対策ソフトの監視対象から外してください。

12.5.8 Q. Winmostar の各種機能やソルバーの実行など、黒いコンソール画面が出現する機能において、黒いコンソール画面の処理が終わらず先に進みません。

A. 黒いコンソール画面の中をたまたまクリックしてしまうと、Windows の仕様上そこから処理がペンディング してしまいます。

コンソール画面のウィンドウがアクティブの状態で ESC キーを押すと、処理が再開されます。

**12.5.9 Q.** ファイルを開いたり、分子をモデリングした際に、結合が出現しなくなってしまった。または、無駄に結合が多く出現するようになってしまった。

A. まず、量子化学計算と第一原理計算(固体物理計算)では、結合の情報は計算結果に一切影響を与えないため、結合の有無はあくまで表示上の問題であることを前提にお考え下さい。Winmostar をインストールした直後の状態から結合の生成挙動が変わってしまった場合は、 ツール  $\rightarrow$  環境設定  $\rightarrow$  編集 の 結合判定係数 の値が適切でない可能性があります。デフォルト値に戻すか、1.15 程度の値に設定してください。デフォルトの状態でも望みの状態にならない場合は、 編集  $\rightarrow$  結合を付加/変更 または 編集  $\rightarrow$  結合を削除 を使い、結合の作成または削除してください。

12.5.10 Q. Windows のエクスプローラ上で拡張子を表示するにはどうしたらいいですか?

Windows 7 の場合:

エクスプローラを開く

- Alt **キーを押す**
- ツール → フォルダーオプション メニューの 表示 タブを開く
- 登録されている拡張子は表示しないのチェックが外れた状態にする

Windows 8, 10 の場合

- エクスプローラを開く
- ・表示 タブを開く
- ファイル名拡張子のチェックが付いた状態にする

12.5.11 Q. マーカー (赤丸) やグループ選択 (青丸) が表示されなくなりました。

A. 表示  $\rightarrow$  表示項目  $\rightarrow$  選択原子マーカー にチェックを入れてください。

### 12.6 ファイル入出力に関して

**12.6.1 Q. Winmostar** 以外で生成されたファイルを Winmostar で開けません。また、Winmostar で生成したファイルを編集してから Winmostar で開こうとしても開けません。

A. 改行コードやエンコーディングが変化していないか確認してください。

**12.6.2 Q. MOL** 形式または SDF 形式のファイルを開くと、結合長が不自然になります。水 素が出現しません。

A. 次の手順で分子構造を修正してください。(1) 結合長を自動調整 (2) *Z-Matrix* を再生成 (3) 選択原子に付加 (自動) SDF ファイルの場合は SDF ファイルの編集 の手順を参考に操作してください。

### 12.7 分子のモデリング・系の作成に関して

12.7.1 Q. 化学結合の種類 (一重、二重など)を変更する方法を教えてください。

A. 例えば以下に示す方法で変更できます。

編集 → 結合を付加/変更 またはメインウィンドウ上部の 結合を付加/変更 ボタンを複数回押すことで、結合の種類を変更できます。

2) 編集 → 原子/結合の自動調整 → 結合を再生成 を選択すると原子間距離から判定された結合次数で自動的に 化学結合の種類が変更されます。予め 編集 → 原子/結合の自動調整 → 簡易構造最適化 により構造最適化して おくと、より妥当に自動変更されることがあります。

3) 小さい分子が一つだけしか表示されていない場合は、MOPAC 計算を実行することで、Population 解析結果 を用いて自動的に結合次数が変更されます。

### **12.7.2 Q.** *MD* → 溶媒を配置/系を構築 機能を実行すると *Error : Failed to solvate.* など と表示され処理に失敗します。

#### ——質問詳細——

*MD* → 溶媒を配置/系を構築を実行した際に generate.log に下記のように出力され処理が正常終了しません。

```
gmx insert-molecules -try 100 -f gmx_tmp_water.gro -o gmx_tmp_water_tmp.gro -ci mol0.

→gro -nmol 64

...

set +v

Error : Failed to solvate.
```

A. 一般的な不具合の対処と、*Cygwin*の一般的な不具合の対処に加え、分子数を減らすか、密度を減らして 実行してください。

分子数が大きい場合(ケースにもよるが 10,000 程度)は、現在内部処理で使用している gmx solvate の処 理の限界となるケースもあるので、 編集  $\rightarrow$  :menuselection: '編集  $\rightarrow$  グループ編集  $\rightarrow$  グループを複製 で分子を 並べてください。

将来的には本機能で分子数が大きい場合にも対応予定です。

### 12.8 ローカルマシンでの MPI・並列実行に関して

#### **12.8.1 Q. MPICH** が計算途中で終了します。

——質問詳細—

MPICH 実行中に、次のようなエラーを表示して計算が途中終了となることがあります。

op\_read error on left context: Error = -1

op\_read error on parent context: Error = -1

unable to read the cmd header on the left context, Error = -1

unable to read the cmd header on the parent context, Error = -1

Error posting ready, An existing connection was forcibly closed by the remote host.(10054)

connection to my parent broken, aborting.

state machine failed.

#### A.

このエラーは MPICH が localonly でもネットワークアダプタを使うため、ネットワークアダプタが途中で切れ てしまうため発生するエラーです。

しかし初めからネットワークアダプタが切れている場合、MPICH はネットワークアダプタを使用しないため、 このエラーは発生しません。

MPICH を用いて長時間の計算を行う場合、ネットワークアダプタを無効にしてから計算を実行して下さい。

# **12.8.2 Q. LAMMPS, Quantum ESPRESSO**の MPI 並列実行時に Unable to open the HKEY\_LOCAL\_MACHINE\SOFTWARE\MPICH\SMPD\process\???? registry key, error 5, アクセスが拒否されました。 という警告が表示されます。

A. MPICH がレジストリを書き換えようとするのですが、管理者権限がないので失敗したというメッセージです。

管理者権限で Winmostar を起動すればメッセージは出なくなりますが、メッセージが出ている状態でも計算自 体は正常に実行されているので、無視しても問題ありません。

### 12.9 リモートジョブに関して

**12.9.1 Q.** 社内や学内のスパコンまたは Linux サーバにジョブを投げる方法を教えてください。

A. 接続先のコンピュータ固有の環境設定などが必要な場合も、リモートジョブ用のひな形スクリプトを作成す ることで可能になります。 詳しくは リモートジョブ をご確認ください。

**12.9.2 Q. Test Connection** での接続テストは成功するが、ジョブの投入 (サブミット) に失 敗します。

A.様々な理由が考えられます。以下にいくつかの例を示します。

1. TSUBAME3.0 など、SSH 接続の回数制限がある場合は、TSUBAME3.0 での SSH アクセス数制限について に記載の方法で、SSH 接続を都度実行せずにつなぐ方法で回避することができます。

2. サーバ側で、秘密鍵認証だけでなく、パスワード認証もアクティブにすることで回避できる場合もあります。
 3. ログインサーバの実体が複数あり、バックグラウンドで自動選択される場合は、特定のログインサーバのみを利用するか、全てのサーバが cache 登録されるまで接続しておくことで回避できる場合もあります。

4. ローカルマシンから Winmostar がジョブ投入コマンド(qsub など)を投げても、リモートサーバ上でコマ ンドが見つからない場合があります。Submit Remote Job ウィンドウの Profile -> Edit Profile... の Prefix for queueing commands に、qsub 等の実行ファイルのパスを記入することで回避できます。例えば、qsub のフ ルパスが /usr/local/bin/qsub の場合は、Prefix for queueing commands に「/usr/local/bin/」と入力して ください。

### **12.9.3 Q.** *Test Connection* での接続テストは成功するが、WARNING が表示され各種の 操作に失敗します。

——質問詳細——

TestConnectionの結果はOKにもかかわらず、各種コマンドが実行できない。

また、リモートジョブ投入画面起動時や TestConnection 実施時などで以下のダイアログが表示される。

WARNING: Putty default host name was found in registry.

(\SOFTWARE\SimonTatham\PuTTY\Sessions\Default%20Settings\HostName)

This may cause errors while job submission.

Clear this setting.

A.

原因:

この WARNING は Putty の HostName が設定されているときにおこります。

Putty の設定は Windows のレジストリに保存されるため、Winmostar 同梱版以外の Putty であっても HostName に何らか文字列が保存されていても、この問題がおこります。

対応:

リモートジョブ投入画面の *Connection* → *Open Putty* から Putty を起動します。Default Settings の HostName 欄 に文字列が設定されているか確認します。

この文字列を削除して Default Settings を選択した状態で Save すると、この問題を解消できます。 (なお、Port 欄の入力内容は特に影響しません。)

## **12.9.4 Q.** リモートサーバではどの種類の MPI (MPICH、OpenMPI など)を使用できます か?

A. 基本的にどの種類の MPI も利用可能です。MPICH、OpenMPI、MVAPICH などで動作実績があります。 テンプレートスクリプトを編集することで、source、module、export といったコマンドを自由に実行し、任意 の MPI を実行する環境を設定できます。

使用するソルバは、使用する MPI (mpicc, mpif90) でコンパイルされている必要があります。

### 12.10 MOPAC, CNDO/S, GAMESS, NWChem, Gaussian に関して

- **12.10.1 Q. MOPAC、GAMESS、Gaussian、NWChem**のキーワード設定ウィンドウや Easy Setup ウィンドウで、使用したい計算手法(Hamiltonian)、基底関数(Basis Set)が選択肢の中に見つかりません。どのように設定したらいいですか?
  - A. 計算手法、基底関数の設定欄に直接キーボードで入力できる場合は、直接入力することができます。分極 関数(「\*」や「p」「d」「f」で表現されるもの)の指定方法はソルバごとに記述が異なることがあるので、 それぞれのソルバのマニュアルを確認してください。
- 12.10.2 Q. 系のモデリング中や、計算結果を読み込んだ際に、不要な結合が表示されます。 または結合が表示されません。どのように対処したらいいですか?

A. こちらの FAQ を参照してください。

### **12.10.3 Q. MOPAC** で計算できる最大原子数はいくつですか?

A. 重原子 (水素以外)70、軽原子 (水素)90 です。 マニュアルページ から大分子対応版 MOPAC6の実行バイナリ(最大 420 原子)をダウンロードして使用することもできます。 Winmostar は MOPAC2016 にも対応しています。

MOPAC2016 は原子数の制限はなく、学位授与機関に所属する方のみ無料です。 MOLSIS 社の MOPAC2016 紹介ページ

## 12.10.4 Q. MOPAC のログに ATOMS \*\*, \*\*, AND \*\* ARE WITHIN .\*\*\*\* ANGSTROMS OF A STRAIGHT LINE と表示されて異常終了します。

——質問詳細——

以下のように 3 原子が直線になったというエラーが出て止まります。 CALCULATION ABANDONED AT THIS POINT THREE ATOMS BEING USED TO DEFINE THE

COORDINATES OF A FOURTH ATOM, WHOSE BOND-ANGLE IS

NOT ZERO OR 180 DEGREEES, ARE IN AN ALMOST STRAIGHT

LINE. THERE IS A HIGH PROBABILITY THAT THE

COORDINATES OF THE ATOM WILL BE INCORRECT.

THE FAULTY ATOM IS ATOM NUMBER 69

最後に、

ATOMS 68, 57, AND 54 ARE WITHIN .0134 ANGSTROMS OF A STRAIGHT LINE

と出ます。

A.

角度が180°近くになる角度がZ-Matrixに含まれている場合に表示されます。

メインウィンドウ右下の座標編集機能で、接続先の原子を変更し、Z-Matrixから180°に近い角度がなくなるようにしてください。

Z-Matrix に慣れていない場合は、これ以外の方法として、キーワードに"XYZ"を追加すると、このエラーを回 避できることもあります。

あるいは、3原子が直線に並ぶ線上から外れた位置に、原子種XXのダミー原子を追加し、直線に並ぶ原子の Z-Matrix上の接続先として指定することで、

エラーを回避できることもあります。

# **12.10.5 Q. MOPAC** を実行するとログに「UNRECOGNIZED KEY-WORDS: (PM6(ハミルトニアン名))」と出力され計算が終了してしまいます。

A. MOPAC キーワード設定で Hamiltonian=AM1 に変えると動く場合は、使している MOPAC が対応していな いハミルトニアンを選択していることによるエラーが出たことになります。

Winmostar マニュアルの MOPAC の各バージョンがサポートする ハミルトニアンの一覧 をご確認の上、適切な ハミルトニアンを選択してください。

それでも動かない場合は 一般的な不具合 の対処を実施してください。

# **12.10.6 Q. Winmostar** に付属の **MOPAC** で溶媒効果(**COSMO**法)を使用するにはどうしたらいいでしょうか。

A. Winmostar に付属の MOPAC は溶媒効果(COSMO法)に対応していません。MOPAC より計算時間が掛かりますがより精度の高い GAMESS を用いた計算をご検討ください。

### **12.10.7 Q. Winmostar** 内蔵以外の **MOPAC(MOPAC2016** など) で計算すると、一部の分子 軌道しか表示されません。

A. MOPAC Setup ウィンドウの ALLVECS にチェックを入れて入力ファイルを作成して、計算をしてください。

### 12.10.8 Q. CNDO/S で Method=INDO を使用したときに計算できません。

A. F 以降の元素は同プログラムの Method=INDO でサポートされていません。 Method=CNDO にするか、GAMESS などの非経験手法を使ってください。

### **12.10.9 Q. GAMESS, Gaussian, NWChem**の **ESP**(静電ポテンシャル)の3次元表示を 高速化することはできますか?

A. Windows 版 Gaussian をインストールしている場合は、Cube ファイルを開いた際に出現する Cubegen ウインドウにおいて Cubegen チェックボックスにチェックを入れると、Gaussian に付属する Cubegen プログラムを使用し比較的高速に処理することが可能になります。

将来的には Winmostar 付属の cube ファイル処理プログラム (OpenCubegen)を高速化する予定です。

### **12.10.10 Q. GAMESS**の実行時に「\* ERROR: MEMORY REQUEST EXCEEDS AVAIL-ABLE MEMORY」などとログに出力され計算が異常終了します。

A. インプットファイルで指定したメモリ量では足りていないことを意味しています。 GAMESS キーワード設定ウィンドウの Advanced タブの\$SYSTEM 欄の MWORDS の数値を大きくしてくだ さい。

### **12.10.11 Q. Windows**版 GAMESS をインストールした直後は問題なく利用できていたが、 ある時期から計算が全て途中で異常終了するようになりました。対処方法はあり ますか?

A. まずは 一般的な不具合 の対処を実施してください。それでもうまくいかない場合は、次の操作を順に実行 してください。

1. GAMESS のイントーラを起動→Remove を選択→GAMESS をアンインストール

2. Windows の設定  $\rightarrow$  アプリ  $\rightarrow$  アプリと機能  $\rightarrow$  Microsoft MPI を選択  $\rightarrow$  Microsoft MPI をアンインス トール

3. Winmostar インストールガイドにある、Windows 版 GAMESS インストールマニュアルの内容に従って GAMESS と MS-MPI を再インストール

特に、GAMESS 実行時に、コンソールウィンドウに「mpiexec ...(中略)... server rejected credentials」などと表示される場合はこの方法が有効な場合があります。

### 12.10.12 Q. GAMESS において、1 原子だけの系の計算で「WARNING. NUMBER OF IN-TERNAL COORDINATES IS GREATER THAN (3N-6), BUT NO SYMMETRY COORDINATES ARE GIVEN.」と表示されて異常終了します。

A. 原子が 1 個だけの系において Z-matrix を使うことによる不具合を示すメッセージになります。 この場合は直交座標を使う(COORD=UNIQUE にする)ことで解消します。 Wimostar の GAMESS キーワード設定ウィンドウにおいて、COORD を UNIQUE に変更してください。

# 12.10.13 Q. GAMESS のログに「 \*\*\*\* ERROR \*\*\*\* PCM SPHERE(S) MUST HAVE A POSITIVE RADIUS 」と表示され異常終了します。

A. Cavity 半径が GAMESS に内蔵されていない原子が含まれている可能性があります。 Cavity 半径を指定するためには、\$PCM 行の直後に次のステートメントを追加してください。 \$PCMCAV RIN(13)=1.55, RIN(15)=1.55 \$END この例では 13 番目と 15 番目の原子に Cavity 半径を与えます。

# **12.10.14 Q. GAMESS**の実行時に「ERROR: BAD DELOCALIZED COORDINATES GENERATED!!!」とログに出力され計算が異常終了します。

A. Wimostar の GAMESS キーワード設定ウインドウにおいて、Z-Matrix タブを選択 –> \$ZMAT のチェックを外 してください。

### **12.10.15 Q. GAMESS** で NMR 計算を実行しようとする(RUNTYP=NMR で計算をする) とエラーが出ます。

A. GAMESS の NMR 計算は閉殻の Hartree-Fock 法のみ対応しており、その他 DFT 法等では実行できません。 また、GAMESS の NMR 計算の実行速度は遅いこともあるので、代わりに NWChem や Gaussian を使うことを お勧めします。

どうしても Winmostar から GAMESS で計算したい場合は、Setup ウインドウの Advanced タブの\$SCF 欄の DIRSCF のチェックを全て外してください。

また並列計算に対応していないので並列数は1にしてください。

エラーで止まった際のログに詳細な指示が書かれているので、そちらも参考にしてください。

#### 12.10.16 Q. GAMESS で Diffuse 関数を使うと SCF 計算が収束しません。

A. GAMESS Setup の Basic タブの\$CONTRL 枠にある Others 欄に ICUT=11 を追記して、2 電子積分のカットオフ値を小さく(厳しく) してください。

## **12.10.17 Q.** 一部の分子において、Firefly の optimaize 実行後、分子軌道 UVvis…を確認 すると、「'\*\*\*\*\*\*\*' is not valid floating point value」というエラーがでます。

A. 基底関数に 6-31+G\*と diffuse 関数の+が加わっているため、基底の線形従属性が大きくなっています。 そのため、分子軌道係数の値の一部が非常に大きくなり、ログ中に\*\*\*\*と出力されます。

解決方法としては、 1. 6-31G\*基底関数を使う 2. 6-31+G\*を使うのであれば、Firefly ではなく GAMESS で計算する が挙げられます。

線形従属性の処理が GAMESS には入っているため、 Firefly と GAMESS ではエネルギー値が少し異なる可能性があります。 Firefly か GAMESS どちらかで統一して、一連の計算を行ってください。

# **12.10.18 Q. NWChem**の並列実行時に「Please specify an authentication passphrase for smpd:」とログに出力され計算が流れません。

A. MPICH2 インストール時にパスフレーズ (passphrase)を省略してしまうとそのようなエラーになる場合があります。

解決方法はいくつかありますが、MPICH2を一旦アンインストールしてから、再度インストールすると解決することがあります。

その場合は、MPICH2 のアンインストール前に smpd をストップし、MPICH2 の再インストール後に smpd を インストールする必要があります。

# **12.10.19 Q. NWChem**の実行時に「sym\_geom\_project: sym\_center\_map is inconsistent with requested accuracy」とログに出力され計算が流れません。

A. 構造が NWChem の分子対称性判断基準からわずかに外れた場合、エラーで止まります。Winmostar メイン ウィンドウの [ツール]-[点群解析] を選択し、[Analyze]、その後 [Symmetrize] をクリックして正確な対称性を 持った構造にするか、もしくは原子 1 つを少し動かして対称性を崩した構造にしてください。

### **12.10.20 Q. NWChem** で溶媒効果を入れる方法を教えてください。

A. NWChem Setup ウィンドウの Advanced タブの Other Settings 欄に cosmo solvent end の 3 行を記入してください。 には溶媒分子名を入れてください。対応している溶媒分子は https://nwchemgit.github.io/COSMO-Solvation-Model.html#solvents-list-solvent-keyword をご覧ください。

### 12.10.21 Q. Gaussian で計算が正常に実行される時とされない時があります。

A. シングルコア版の Gaussian の場合は、2 つ以上ジョブを実行しようとすると Gaussian が強制終了します。 シングルコア版の Gaussian を使い、Winmostar で 2 つ以上の Gaussian のローカルジョブを逐次実行したいと きは、各ジョブの並列数(%nproc または%nprocshared)を1 にした上で、Winmostar JMの Max Cores を1 に 設定してください。

# **12.10.22 Q. Gaussian**の log ファイルを読み込んだのですが、軌道 (固有) エネルギーなど が表示されません。

A. 実行した Gaussian の入力ファイルに pop=full と gfprint が抜けている場合は表示されません。 Gaussian 入力もしくは出力ファイルを Winmostar で開くと、構造だけでなく計算条件も読み込まれます。 Winmostar 以外で作成された入力もしくはその出力ファイルでは、pop=full と gfprint が設定されていないこと があるため、そのようなファイルを開いてキーワード設定をする場合、pop=full と gfprint が設定されているか 確認をしてください。

#### 12.10.23 Q. Gaussian で chk ファイルを読み込んだ計算を実施する方法を教えてください。

A. リモートジョブの場合は SubmitJob ウィンドウで [Advance] のチェックを入れ、[Delete \*.chk] のチェックを 外すと chk ファイルが残され、その上で chk ファイルを生成した時と同じ名前でジョブを流すと chk ファイル を読み込んで計算が流れます。

-Link1-を使う方法の方が設定自体は簡便なため、こちらの使用もご検討ください。

### 12.11 Gromacs, LAMMPS に関して

### 12.11.1 Q. 分子動力学計算においてどのように系を平衡化したらいいですか。

A. 低分子の平衡状態の凝集系(気体ではなく液体・固体のこと)計算が目的のケースについてまず述べます。

まず初期状態の分子を並べる際には、最終的な密度に極力近い密度に設定してください。

しかし、かなり低密度でないと並べられないときはそれで構いません。

その後、ポテンシャルエネルギー、温度、密度の変化が収束するまで、エネルギー極小化、温度一定計算、温 度圧力一定計算を流してください。

初期密度が低すぎた場合は、温度圧力一定計算で、目標圧力よりも高めの圧力(例えば 100 倍程度)で一旦圧 縮してください。

最終的にアンサンブル平均の物理量に関心があり、平衡化後に目標温度・圧力に達しているならば、細かい平 衡化手順の差は計算結果に大きな影響を与えることは少ないです。

高分子、ガラスの場合は、真の意味で平衡状態を得るには、現実的な計算時間では不可能な場合がほとんどの ため、エネルギー、温度、密度の収束の加え、観察したい物理量に影響が大きいと思われる物理量の相関が0 に到達する程度の時間平衡化計算を実施します。

気体の場合は圧力制御は不安定なため、エネルギー極小化と温度一定計算のみで平衡状態を得ます。

## **12.11.2 Q. MD**計算において SHAKE 法などによる拘束は計算結果にどのような影響を与えますか? 拘束方法はどのように選んだらよいですか?

A. SHAKE 法、RATTLE 法、LINCS 法、SETTLE 法を共有結合する原子間に適用し結合長を拘束することで、 時間刻みを大きく取り、同じ計算量でもより長時間の現象をより安定して観察できるようになります。安定、 というのは、ハミルトニアン(全エネルギー)の保存の観点で、になります。

拘束しない場合に共有結合を表現する関数も実現象を高精度に表現しているわけではないので、安定した計算 が流れているという前提のもと、算出される各種の物性に与える影響という点では、拘束する場合・しない場 合のどちらも、それぞれの事情による実現象からのずれが生じています。

分子内の振動運動自体に計算の目的がない限りは、長時間安定してハミルトニアンが保存する条件を都度選択 することを基本的には推奨します。

ただし、水素原子の結合は、拘束しない場合は系内で突出して高速に運動し、ハミルトニアンのドリフトの原 因になりうるので、多くの場合は水素原子の結合については拘束します。

### **12.11.3 Q. MD**計算を実行後、アニメーションを観たり、最終構造を見ていると、分子がセルの外側に出てしまうことがあるのはなぜですか?

A. 周期境界を使用していると、分子の実体は周期境界のセルの内側に収まるべきです。

しかし、Gromacs、LAMMPS などのソルバは、平均二乗変位などを計算するために、セルの境界を分子が跨いでも、座標を折り返さずにそのまま並進移動した値でトラジェクトリを記録しています。

どちらにしても、結果解析時には適切に考慮され同じ結果が出力されますので、結果解析への悪影響はありま せん。

セルの外側に分子が飛び出る様子が見た目としてよくない場合は表示 - 周期境界条件の表現形式の設定を調整 してください。

### **12.11.4 Q. [MD]-**[自動で電荷を割り当て] メニューで「**Topology file not found**」というエ ラーが表示されます。解決方法はありますか?

A. 電荷を割り当てようとしている分子が Acpype に対応していない可能性があります。[ファイル名]\_charge\_tmp フォルダ以下の log ファイルや、sqm.out ファイルを確認してください。対応していない原子がある場合は、MOPAC や QM で電荷を割り当てるか、手動で入力してください。

#### 12.11.5 Q. 力場を割り当てで処理に時間が掛かり終わりません。解決方法はありますか?

A. 特に力場の種類に GAFF, OPLS-AA/L+GAFF を選択した場合に処理に時間が掛かることがあります。こ れは、GAFF, OPLS-AA/L+GAFF の割当に acpype を使用しており、acpype の処理が遅いために発生して います。1 分子が 10000 原子近い高分子の場合は、5-6 時間程度待てば処理が正常終了することを確認し ております。環境によってはこれよりも速い場合もあり、逆に遅い場合もあります。将来の Winmostar で はこれらの力場の割当処理の高速化に取り組むことを予定しております。

#### **12.11.6 Q.** 力場を割り当てでエラーが表示されます。解決方法はありますか?

A. 力場を割り当てようとしている分子が Acpype に対応していない可能性があります。[ファイル名]\_top\_tmp フォルダ以下の log ファイルや、sqm.out ファイルを確認してください。対応していない原子がある場合は、 UFF や Dreiding などの汎用性のある力場をお試しください。

#### **12.11.7 Q. Gromacs, LAMMPS**(分子動力学計算)から誘電率を計算できますか?

A. 誘電率は外場の周波数に依存した物性であり、また周波数帯ごとにメカニズムも違うため、一概にお答えすることはできません。

Winmostar の Gromacs, LAMMPS から計算される誘電率は、分子内分極が時間変化しない前提での、分子の配向に由来する成分です。

そして、その中でも、分子動力学計算のシミュレーション時間内における系全体の双極子モーメントの揺らぎ から計算される、無限に遅い低周波の極限の値となります。

ポリマーのように分子量が大きく緩和が遅い物質の場合はシミュレーション時間内に観測できる範囲での情報 しかわからないため注意が必要です。

Winmostar の Quantum ESPRESSO から計算される誘電関数は、原子座標が固定された状態での電子の分極に 由来する高周波成分の誘電関数です。

比較対象としている誘電率の実験値の取得方法や、材料の性質、研究目的を考えたうえで、計算をプランニン グする必要があります。

なお、弊社の有償サポートでプランニングのお手伝いをすることが可能です。

### 12.11.8 Q. 界面ビルダで作成した構造から MD 計算を実行しようとすると、力場の割り当て が失敗したり MD 計算破綻します。解決方法はありますか?

A. 接合箇所の間隔が短いと、両層の分子が衝突し、望まない共有結合が原子間距離から判定され生成されてしまったり、MD 計算開始時に大きな力が働き MD 計算が破綻することになります。平衡化に時間が掛かってしまいますが、界面ビルダの [Direction]-[Interval] の値を大きくし、長い時間を掛けて平衡化をするのが一番良い方法となります。

### **12.11.9 Q.** 圧力制御(**NPT** 一定または **NPH** 一定)を行うと、計算が途中で破綻します。解 決方法はありますか?

A. まず、気相や気相中に他の相が分散しているような、分子間の相互作用が極めて弱い状況では、圧力制御は 安定しにくいため、圧力制御を使わない方法も試してください。次に、破綻した計算において密度の時間変化 を確認し、何が起こっているか確認してください。また、圧力制御を行う前に、密度一定で十分エネルギー・ 温度・圧力が平衡化している必要があります。密度一定での平衡化が終わった時点で、圧力(の平均値)は0 またはマイナスである方が望ましいです。密度一定での平衡化終了時点で圧力の値が大きいと、圧力制御を開 始した直後にシステムサイズが急激に変化します。密度一定での平衡化終了時点での圧力を小さくしたい場合 は、初期密度を小さくしてください(最終的な密度のおおよそ 50%程度)。それでもなお解決しない場合は、 (1) 圧力制御を Parrinello-Rahman(Nose-Hoover) 法ではなく Berendsen 法に切り替える、(2) 圧力制御の時定数 を大きくする、(3) 圧力制御を入れた計算を短く何回かに分割する、ということで改善するかと思われます。

#### **12.11.10 Q. LAMMPS, Gromacs** で液体(有機物)-固体(無機物)間の相互作用パラメー タをどのように決めたらいいですか?

A.まず、着目している液体-固体界面について分かっている実験事実や関連研究について可能な限り情報収集 します。特に、表面の原子レベルの構造(ミラー指数、官能基など)や化学的性質(濡れ性や、疎水的か親水 的かといった大雑把なもの)が分かることが望ましいです。

LJ パラメータと電荷の値が適切な関連研究の文献に載っている場合は、その値を使うのがベストです。 Winmostar では次のように値を設定します。

- 電荷については、一度 mol2 形式で保存し、電荷の値を論文の値に書き換える。

- LJ パラメータについては、[力場を割り当て] 機能で [Exception] から各元素の値を入力します。

適切な値が載っている文献はなかったが、ある程度化学的性質が分かっている場合は、電荷、LJパラメータを何通りか変えてシミュレーションを実行し、計算結果を比較して妥当と思われるパラメータを採用します。

表面の原子レベルの構造しか分かっていない場合は、第一原理計算(Quantum ESPRESSO)を併用してパラ メータを決めます。

電荷の決定には、Quantum ESPRESSOの Lowdin 電荷機能を流用する場合もあります。ただし、Lowdin 電荷を使う場合は電荷の合計値が0とならないため値の微調整(全体的にシフトさせるなど)が必要です。また、 Lowdin 電荷では分極が過大評価されることもあり注意が必要です。

LJ パラメータについては、既知のパラメータ (Dreiding, UFF, CLAYFF など)を使うか、第一原理計算から Force Matching などのアルゴリズムを用いて算出します。

このように液体(有機物)-固体(無機物)間の相互作用パラメータが複雑となっているのは、以下の事実に由 来します。

1. 古典 MD では原子位置に相互作用パラメータ (epsilon, sigma, 電荷)が依存しないという仮定を置くが、有機物-無機物界面系では有機物-有機物系に比べ、その近似が大きな誤差を生じる。

2. 現実のデバイス中の無機物表面は酸化膜などに覆われているが、実験観察も容易ではなく、原子解像度で正確にモデリングすることが難しい。

12.11.11 Q. Gromacs の最終構造やアニメーションを読み込んで取得した構造や、それに 何かしらの編集を行ってから再び MD 計算を実行すると力場の割り当てが失敗し たり MD 計算が破綻します。解決方法はありますか?

A. Gromacs の不具合により分子が分離している可能性があります。分子が分離しているか否かは、[選択]-[分子種によるグループ選択]を表示し、想定していない成分が含まれているかを確認することで判断できます。 分離していた場合は Gromacs のトラジェクトリを読み込んだ構造または、最終構造において、本来繋がってい るべき分子がバラバラに表示される。をご参照ください。

### **12.11.12 Q. Gromacs** において最終構造やアニメーションを読み込むと分子がバラバラに 表示されることがありますがなぜですか?

A. Gromacs のトラジェクトリを読み込んだ構造または、最終構造において、本来繋がっているべき分子がバラ バラに表示される。 をご参照ください。

# **12.11.13 Q. Gromacs**の **ER** 法結果読み込みを実行しても結果が表示できません / エラーが出ます。

A. ER 法を実行する際に指定した出力先ディレクトリに生成される ermod.out の内容を確認してください。 ermod.out の中に「 The minimum of the energy coordinate is too large; the ecdmin parameter needs to be smaller 」 と書かれている場合は、ER 法実行ウィンドウの [Options] ボタンを押し、 [For Solution System] のと [minimum value of the solute-solvent energy (ecdmin)] の値を小さくしてください。

具体的な値の設定方法など、詳しくは ERmod の wiki の FAQ を参照してください。

また、同様に ermod.out の内容と ERmod の wiki の FAQ 全般 の内容を照らし合わせ、ermod の設定の変更が必要な場合は ER 法実行ウィンドウの [Options] で設定してください。

# **12.11.14 Q.** ある物質とある物質の間の相互作用を計算することは Winmostar で可能ですか?

A. この手の質問は大変多いのですが、「相互作用」という言葉の定義は広いため、定義によります。 まずは、着目している物質の量子化学、分子動力学、第一原理計算自体を実行できるか、という意味では、各 ソルバ(GAMESS, Gaussian, LAMMPS, Gromacs, Quantum ESPRESSO)で実行可能な内容に Winmostar は依 存しているので、各ソルバのマニュアルを予め調べてください。

次に、何か着目している物性や現象のメカニズムを知りたいという意味での相互作用については、その物質系 固有の知識が必要となるため、計算可能かどうかの調査自体に十分な調査が必要となるため、すぐには回答で きません。民間企業向けに有償で調査を行うサービスも用意しています。

最後に、Kitaura-Morokuma 解析や MD における Coulomb・vdW 相互作用などの相互作用エネルギー解析のように、具体的な解析内容が分かっている場合は、その旨をご質問ください。

### 12.12 Quantum ESPRESSO, OpenMX に関して

# **12.12.1 Q.** 手順通り Quantum ESPRESSO の擬ポテンシャルファイルをインストールしたが認識されません。

A. 拡張子が.UPF の擬ポテンシャルファイル ( 例えば 0.pw-mt\_fhi.UPF 、 Au.pbe-dn-rrkjus\_psl.0.1.UPF など ) を Quantum ESPRESSO のインストールフォルダの下の pseudo フォルダ ( デフォルトでは C:\Program Files\Quantum ESPRESSO 64-bit 5.2.1pseudo など ) にコピーしてくださ い。ただし、旧 Internet Exproler などのブラウザで UPF ファイルをダウンロード・保存すると、拡張子が勝手 に変更されたりと不具合が報告されているので、Edge や Chrome などのプラウザも試してください。

# **12.12.2 Q. Quantum ESPRESSO**の擬ポテンシャルファイルの探し方が分かりません。どのように探したらいいですか?

A. Windows版 Quantum ESPRESSO インストールマニュアル にて紹介しています。

- **12.12.3 Q. Quantum ESPRESSO**を用いた計算が失敗します。計算結果の表示でエラーが 出ます。
- A.まずは一般的な不具合の対処を実施してください。

次に、Winmostar では QE の各モジュールをバッチ処理で連続実行しているので、Winmostar が生成した bat ファイル (ローカル実行の時)または sh ファイル (リモート実行の時)に記述された処理の流れを見ながら、 生成された出力ファイル (pwout または out)ファイルを順番に確認してください。 例えば、フォノン計算の場合は ph.x の出力ログ (ph.out)を確認してください。 最初に「Error in routine ...」などのエラーが出現した箇所の対処を施し、再度ジョブを実行してください。 特定のキーワードに関するエラーは、そのキーワードの設定を公式サイト でご確認ください。 典型的な QE のエラーの対処方法は 公式サイトの FAQ に記載されています。

### **12.12.4 Q. Quantum ESPRESSO** を用いて Phonon 計算を実行する際に、ph.x の出力 (ph.out) に「third order derivatives not implemented with GGA」と表示され 計算結果を取得できません。

A.GGA でない擬ポテンシャルを選択することで解消します。

# **12.12.5 Q. Quantum ESPRESSO, OpenMX**の SCF 計算または構造最適化計算が収束しません。

A. 以下の対策を順に実施してください。

必ず試すべきこと:

 ・第一原理計算は設定項目が多いので、適当に計算条件を変えず、きちんと記録を取りながら一連の計算を 流す。

・QEの一般的な不具合の対処を実施する。

・本当に収束しない傾向にあるかチェックする。

・QE では Estimated accuracy を SCF サイクル数に対しプロットする。両対数プロットならなおよし。

・スピン分極状態・電荷が妥当か調べる。

・Hexagonal 結晶で K\_POINTS のシフトを行っていたらシフトを外す。

・up/down スピンの並び方を与える。

・系全体の磁気モーメントを拘束する。

・尤もらしい初期構造を使う。

・実験や他の計算手法で得られた構造を使う。

・計算する上で配置に任意性のある原子(X線で見えない軽元素、固溶体、欠陥、非整数の組成など)がある 場合は、違う配置を試す。

・固溶体・欠陥を含むようなケースでは、系内に大きなダイポールモーメントが生じないような初期構造に する。

次に試すこと:

・mixing\_mode を調整する。

・smearing を使っていない場合は smearing を使う。

・擬ポテンシャルの種類を変える。

・スピン分極の初期値を調整する。(原子単位または系全体)

・外部電場、欠陥、吸着など比較的複雑な条件を設定している場合は、それらをなくしたよりシンプルな条件 で試し、その計算が収束したなら、その計算の終状態(原子配置・波動関数など)を始状態として計算を開始 する。

・収束しなかった計算の途中から計算を開始する(SCFのアルゴリズムは履歴に依存するため)。

・行列計算のパラメータを調整する(収束しづらい設定のみ見直す)。

・スラブに分子が吸着するような、系内に大きなダイポールモーメントが発生してしまう場合は、ダイポール の補正を行う。

計算時間・計算精度との兼ね合いで試すこと:

- ・カットオフエネルギーを大きく取る。
- ・K 点を多めにとる。
- ・smearing を調整する (種類・幅)。
- ・波動関数の更新度合(QE では mixing\_beta)を小さくする。

計算精度との兼ね合いで試すこと:

・SCFの収束パラメータを緩くする。

### **12.12.6 Q. Quantum ESPRESSO**の SCF 計算が出力ファイル(.pwout または.out)に 「too few bands」と表示され異常終了します。nbndの設定方法が分かりません。

A. まずは QE 公式のマニュアルの nbnd の説明 をご確認ください。

nbnd を使わずに計算を流すと、QE が自動で nbnd を適当に設定して計算するので、Winmostar のキーワード設定画面で「Use nbnd」のチェックを外してください。

nbnd を増やしたい場合は、nbnd を使わずに実行したときに pwout または out ファイルに出力される"number of Kohn-Sham states"の値よりも大きい値を nbnd に設定してください。

また、Winmostar のキーワード設定画面の「Use nbnd」のところに表示される「# valence bands: 」の値も参考 にしてください(詳細は 固体  $\rightarrow Quantum ESPRESSO$  メニュー を参照)。

### **12.12.7 Q. Quantum ESPRESSO**の SCF 計算が出力ファイル(.pwout または.out)に 「fixed occupations and Isda need tot\_magnetization」と表示され異常終了し ます。どのように解決したらいいですか?

A. occupations に smearing を指定するか、starting\_magnetization ではなく tot\_magnetization を指定してください。

### **12.12.8 Q. Quantum ESPRESSO**の SCF 計算が出力ファイル(.pwout または.out)に 「charge is wrong」と表示され異常終了します。どのように解決したらいいです か?

A. まず Quantum ESPRESSO キーワード設定ウィンドウで occupations が smearing になっていることを確認し、 次に ecutrho を大きめ(400 Ry など)に設定してください。

### **12.12.9 Q. Quantum ESPRESSO** を用いて誘電関数を計算する際に、epsilon.x の出力 (eps.out) に「bad band number」と表示され誘電関数を取得できません。

A. SCF 計算でバンド数 (nbnd)を増やすことで解消します。

### **12.12.10 Q. Quantum ESPRESSO** を用いて誘電関数を計算する際に、epsilon.x の出力 (eps.out) に「USPP are not implemented」と表示され誘電関数を取得できま せん。

A. SCF 計算でノルム保存型の擬ポテンシャルを選択することで解消します。

# **12.12.11 Q. Quantum ESPRESSO** を用いて Phonon 計算に失敗し、計算結果を取得できません。

A. まずは、Phonon 計算を実行せず、同じ擬ポテンシャルファイル、その他計算条件を使用して SCF 計算が正 常終了することを確認してください。次に、working directory(末尾が\_qe\_data のフォルダ)の中の ph.out(Phonon 計算モジュール ph.x の出力ファイル)を確認してください。そこに「The phonon code with US-PP and raman or elop not yet available」と書かれている場合は、ノルム保存型の擬ポテンシャルを選択する ことで解消します。同様に、PAW ポテンシャルを利用している場合もラマン計算などがサポートされていない ので、ノルム保存型の擬ポテンシャルを選択することで解消します。

### 12.12.12 Q. フェルミ面を出力しようとしてもそれらしきものが表示されません。

A.まず、可能なら対象の物質が金属であることを確認してください。次に、状態密度も出力し、フェルミエネルギーにおいて状態密度が0でないことを確認してください。

### **12.12.13 Q. Quantum ESPRESSO**(バンド計算)から誘電率を計算できますか?

A. Q. Gromacs, LAMMPS(分子動力学計算)から誘電率を計算できますか?を参照してください。

#### **12.12.14 Q. Quantum ESPRESSO** で汎関数の種類はどのように設定しますか?

A. Quantum ESPRESSO では、汎関数ごとに擬ポテンシャルファイルが作られるので、基本的には擬ポテンシャルファイルを選んだ時点で汎関数が決定されます。一部の汎関数(HSE、vdw 汎関数など)は、ベースとなる汎関数(例えば HSE の場合は PBE)で作られた擬ポテンシャルファイルを選択した上で、input\_dft キーワードを使用して汎関数の設定を上書きします。

### 12.12.15 Q. 系のモデリング中や、計算結果を読み込んだ際に、不要な結合が表示されます。 または結合が表示されません。どのように対処したらいいですか?

A. こちらの FAQ を参照してください。

### **12.12.16 Q.** OpenMX で MPI を有効にしてローカルマシンで計算を実行すると、 tcp\_peer\_send\_blocking: send() to socket 12 failed: Transport endpoint is not connected というエラーが表示されます。

A. Cygwin の OpenMPI 特有の問題で、Windows の [設定]-[ネットワークとインターネット]-[アダプターのオプ ションを変更する] において使用していないネットワークアダプタを無効にしてください。また、OpenMX は ローカルマシンにおいては OpenMP で計算することを推奨します。

### **12.13** アドオンに関して

12.13.1 Q. 溶解度パラメータ計算モジュールを用いてポリマーのハンセン溶解度パラメータ を計算する際に、ポリマーの繰り返し構造(モノマー)の取り方の違いで出力され る値が変化してしまう。

A. 実装されている原子団寄与法のアルゴリズムのために発生しています。原子団を探索する際には、一番大きな原子団から探索されるようになっています。重要そうな官能基は繰り返し単位の中に入れておくことをお勧めします。

12.13.2 Q. 溶解度パラメータ計算モジュールを用いて取得したハンセン溶解度パラメータの 値が、文献値と大きく異なります。

A. 溶解度パラメータ計算モジュールは、各種の文献値を学習データとしてニューラルネットワークで学習され た原子団寄与法を用いてハンセン溶解度パラメータを出力しています。そのため、文献値と全く同じ値を返す わけではありません。また、文献によっては溶解度パラメータの単位が異なりますので、その点にご注意くだ さい。

#### **12.13.3 Q. Winmostar V10**以降で溶解度パラメータ計算モジュールを使えますか?

A. 溶解度パラメータ計算モジュールの販売・サポートは 2019 年 12 月 31 日に終了し現在はメンテナンスを 行っていませんが、2019 年 12 月 31 日以前に永久使用権の同モジュールをご購入頂いた方は Winmostar V10 においても同等機能をご利用頂くことができます(動作無保証、現状渡しに限る)。永久使用権以外の方は対象 外です。まず Winmostar V10 のライセンスをご購入時に、過去に溶解度パラメータ計算モジュールを購入した 旨と V10 でも利用したい旨をご連絡ください(ご購入済みの方はお問い合わせフォームよりご連絡ください)。 その後、同モジュールを利用するためのライセンスキーを発行致します。そのライセンスキーで Winmostar を アクティベートした後、Winmostar V9 のインストールフォルダ(デフォルトでは C:\winmos9)の下にある wm\_system\HSP フォルダを、Winmostar V10 のインストールフォルダ(デフォルトでは C:\winmos10)の下に ある wm\_system フォルダの下にコピーしてください。すると、[アドオン] メニューの下に [Hanse SP& QSPR モデル] というメニューが出現いたします。

# **Bibliography**

[Rappe1992] A.K. Rappe, C.J. Casewit, K.S. Colwell, W.A. Goddard III and W.M. Skiff, J. Am. Chem. Soc., 114 (1992), 10024–10035.

[Garberoglio2012] G. Garberoglio, J. Comp. Chem., 33 (2012), 2204-8.