1. 各種設定ファイルの移行方法

V9以前のユーザは、V10移行ガイドを参考に設定ファイルをV10向けに移行してください。 V10のユーザは、Winmostar V10のインストールフォルダ(デフォルトではC:\winmos10\)の下のUserPrefフォルダの中身を、 Winmostar V11のインストールフォルダ(デフォルトではC:\winmos11\)の下のUserPrefフォルダにコピーしてください。

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

| Winmostar V10 | Winmostar V11 |
|---|--|
| ライセンス・製品ラインナップ関係 | |
| 特定ユーザライセンスのライセンスコードをユーザごとに発行 | ューザかつマシン(MACアドレス)ごとに発行 |
| 永久使用権保有者(教育機関)のマイナーバージョンアップが可能な期間は使用権の期間と同一 | 保守期間(1年間)と同一に変更し、保守期間の継続には年間保守用の製品購入 が必要 |
| メインウインドウ | |
| 従来手順(V11でのファイルモード)での計算実行 | 起動直後の画面で[新規ファイル]をクリック (なお、プロフェッショナル版のユーザで引き続きV10の利用を希望する方には、 V10のライセンスを発行致しますのでお問い合わせください) |
| 上側ツールバーの[CH3]、[C2H3]、[C6H5]ボタン | [ツール]-[環境設定]-[編集]-[フラグメント選択のショートカットを表示]にチェックを入れたときのみ表示 |
| 第一・第二キーワードエリア | 第一キーワードエリアに統合し、座標の表示部分をエイリアスで表現 |
| 座標表示エリアの[XYZ]、[Z-Matrix]による座標出力形式の切り替え | ファイル保存時の出力形式は、各ソルバのキーワード設定ウィンドウで指定し、メインウィンドウでの表示形式は[表示]-[座標表示形式を切り替え]で指定 |
| 分子表示エリアでの右クリックによるフラグメント置換 | Ctrl+Shift+右クリックに変更また、[ツール]-[環境設定]-[編集]-[分子表示エリアで右クリックした際に]-[フラグメントで置換]を選択する |
| [ファイル]メニュー | |
| [ファイル]-[追加読み込み] | [ファイル]-[ファイルをインポート]に変更 |
| [ファイル]-[座標出力形式を切り替え] | ファイル保存時の出力形式は、各ソルバのキーワード設定ウィンドウで指定し、メインウィンドウでの表示形式は[表示]-[座標表示形式を切り替え]で指定 |
| [編集]共通 | |
| [編集]-[ダミー原子を追加] | [編集]-[原子を追加]に移設 |
| [編集]-[密度を変更] | [編集]-[セルを作成/編集]-[セルを変形]に統合 |
| [半経験QM]、[QM]、[MD]、[固体]共通 | |
| キーワード設定ウィンドウの[Extending simulation] | [Continue simulation]に変更 |
| [半 経験 QM]、[QM]メニュー | |
| [半経験QM]メニュー | [QM]メニューに統合 |
| [結果解析]-[分子軌道, UV-Vis, 電荷, NMR]などのメニュー | [分子軌道]、[UV-Vis]、[NMR]など項目ごとにメニューを分離 |
| IRCのアニメーション結合 | アニメーション表示エリアの[Options]-[Tools]-[Append Trajectory]から実行 |
| MOPACのデフォルトキーワードの保存先 | UserPrefのinit.datからmopac_default.wmxに変更 |
| [MD]メニュー | |
| [MD]-[溶媒を配置/セルを構築]-[Add mol2 File] | [Add File]に変更 |
| [MD]-[手動で電荷を割り当て]-[acpypeを使用] | [MD]-[手動で電荷を割り当て]-[AM1-BCC電荷]と[Gasteiger電荷]に分割 |
| [MD]-[手動で電荷を割り当て]-[GAMESSを使用] | [MD]-[手動で電荷を割り当て]-[RESP電荷]に変更 |
| [MD]-[手動で電荷を割り当て]-[マニュアル入力] | グループ選択および[編集]-[属性を変更]-[電荷/スピンを変更]に統合 |
| ポリマー関連機能のモノマー(Monomer)という表記 | 繰り返し単位 (Repeat unit) に変更 |
| キーワード設定ウィンドウのデフォルトプリセット | プリセットリストに「Minimize (medium)」を追加し、デフォルトを「Minimize (fast)」から「Minimize (medium)」に変更(従来より高精度、低速に変更) |
| Amber関連機能 | [ヘルプ]-[デバッグモード]でのみ使用可(将来再対応予定) |
| [固体]メニュー | |
| - [固体]-[表面を切り出し] | [固体]-[スラブを作成]に統合、[ヘルプ]-[デバッグモード]で使用可 |
| [固体]-[真空層を挿入] | [編集]-[セルを作成/編集]-[セルを変形]および[固体]-[スラブを作成]に統合、[ヘルプ]-[デパッグモード]で使用可 |
| 各種サプウィンドウ | Filtra ex Endamon |
| [Animation]ウィンドウ | メインウィンドウ右上のアニメーション表示エリアに統合 |
| [Animation]ウィンドウの[Dynamics Bond]チェックボックス | アニメーション表示エリアの[Options]メニューに移設 |

その他不明点はお問い合わせください。

以上