

## 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
<p><b>ライセンス・製品ラインナップ関係</b></p> <p>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</p> <p>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</p>	<p>ユーザかつマシン(MACアドレス)ごとに発行</p> <p>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</p>
<p><b>メインウインドウ</b></p> <p>従来手順(V11でのファイルモード)での計算実行</p> <p>上側ツールバーの[CH3]、[C2H3]、[C6H5]ボタン</p> <p>第二キーワードエリア</p> <p>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</p>	<p>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)</p> <p>[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</p> <p>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</p> <p>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</p>
<p><b>[ファイル]メニュー</b></p> <p>[ファイル]-[追加読み込み]</p> <p>[ファイル]-[座標出力形式を切り替え]</p>	<p>[ファイル]-[ファイルをインポート]に変更</p> <p>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インドウで指定し、メインウイ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</p>
<p><b>[編集]共通</b></p> <p>[編集]-[ダミー原子を追加]</p> <p>[編集]-[密度を変更]</p>	<p>[編集]-[原子を追加]に移設</p> <p>[編集]-[セルを作成/編集]-[セルを変形]に統合</p>
<p><b>[半経験QM]、[QM]、[MD]、[固体]共通</b></p> <p>キーワード設定ウインドウの[Extending simulation]</p>	<p>[Continue simulation]に変更</p>
<p><b>[半経験QM]、[QM]メニュー</b></p> <p>[半経験QM]メニュー</p> <p>[結果解析]-[分子軌道、UV-Vis、電荷、NMR]などのメニュー</p> <p>IRCのアニメーション結合</p> <p>MOPACのデフォルトキーワードの保存先</p>	<p>[QM]メニューに統合</p> <p>[分子軌道]、[UV-Vis]、[NMR]など項目ごとにメニューを分離</p> <p>アニメーション表示エリアの[Options]-[Tools]-[Append Trajectory]から実行</p> <p>UserPrefのinit.datからmopac_default.wmxに変更</p>
<p><b>[MD]メニュー</b></p> <p>[MD]-[溶媒を配置/セルを構築]-[Add mol2 File]</p> <p>[MD]-[手動で電荷を割り当て]-[acpypeを使用]</p> <p>[MD]-[手動で電荷を割り当て]-[GAMESSを使用]</p> <p>[MD]-[手動で電荷を割り当て]-[マニュアル入力]</p> <p>ポリマー関連機能のモノマー(Monomer)という表記</p> <p>キーワード設定ウインドウのデフォルトプリセット</p> <p>Amber関連機能</p>	<p>[Add File]に変更</p> <p>[MD]-[手動で電荷を割り当て]-[AM1-BCC電荷]と[Gasteiger電荷]に分離</p> <p>[MD]-[手動で電荷を割り当て]-[RESP電荷]に変更</p> <p>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</p> <p>繰り返し単位(Repeat unit)に変更</p> <p>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)</p> <p>[ヘルプ]-[デバッグモード]でのみ使用可(将来再対応予定)</p>
<p><b>[固体]メニュー</b></p> <p>[固体]-[表面を切り出し]</p> <p>[固体]-[真空層を挿入]</p>	<p>[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</p> <p>[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]-[デバッグモード]で使用可</p>
<p><b>各種サブウインドウ</b></p> <p>[Animation]ウインドウ</p> <p>[Animation]ウインドウの[Dynamics Bond]チェックボックス</p>	<p>メインウインドウ右上のアニメーション表示エリアに統合</p> <p>アニメーション表示エリアの[Options]メニューに移設</p>

その他不明点はお問い合わせください。

以上