

| | |
|---|---|
| Winmostar V9移行ガイド | 2019年5月21日版 株式会社クロスアビリティ |
| 1. 各種設定ファイルの移行方法 | |
| <p>旧バージョン向けの以下のファイルを、Winmostar V9のインストールフォルダ（デフォルトではC:\winmos9\）の下のUserPrefフォルダにコピーします。</p> <ul style="list-style-type: none"> atoms1.wmx winmos_server.ini wm_nmr.ref wm_irscale.ref リモートジョブ用テンプレートスクリプト（必要に応じて） <p>これらのファイルは、特定機能を利用した際に自動生成されるため、一部存在しない場合もあります。存在しないファイルについては無視し、コピーする必要はありません。</p> <p>- winmos_server.iniは、winmos_profile.iniが既に生成されている場合は自動では読み込まれないので、リモートジョブ投入ウィンドウの[File]-[Import Setting File...]から明示的にwinmos_server.iniを選択し設定を読み込んでください。</p> <p>上記ファイルは、旧バージョンの以下の場所に置かれています。</p> <ul style="list-style-type: none"> Winmostar V3～V6から移行する場合はインストールフォルダ Winmostar V7～V8から移行する場合はそれらのインストールフォルダの下のUserPrefフォルダ | |
| 2. 各種メニュー、ウインドウの変更点 | |
| Winmostar V8 | Winmostar V9 |
| メインウインドウ | |
| 上側ツールバーの[キーワード設定]ボタン | アイコンを変更 |
| 上側ツールバーの元素選択プルダウンメニュー | 画面右側から左端に移動 |
| 上側ツールバーの[Chg]（元素変更）ボタン | アイコン付きのボタン（元素を変更）に変更 |
| 左側ツールバーの[表示設定]ボタン | Zoomはメインウインドウ右下のズームバーに移動、AtomとBondは[表示]-[分子の表現形式]-[棒球モデルのカスタマイズ]に移動 |
| 左側ツールバーの[アノテーション]ボタン | 上側ツールバー上段左の[ラベル/電荷]プルダウンメニューに移動 |
| 座標表示エリア下の[XYZ]チェックボックス | 座標表示エリア上部の[Z-Matrix]および[XYZ]タブに移動 |
| [編集]メニュー | |
| [編集]-[原子]-[原子追加]メニュー | [編集]-[原子を追加]-[座標を指定]に名称変更 |
| [編集]-[原子]-[原子削除]メニュー | [編集]-[原子を削除]に名称変更 |
| [編集]-[原子]-[原子移動]メニュー | [編集]-[原子を移動]-[並進移動]に名称変更 |
| [編集]-[原子]-[元素変更]、[最適化フラグ変更]、[電荷/スピン変更]メニュー | [編集]-[属性を変更]以下に移動 |
| [編集]-[結合]-[結合付加]メニュー | [編集]-[結合を付加/変更]に名称変更 |
| [編集]-[結合]-[結合削除]メニュー | [編集]-[結合を削除]に名称変更 |
| [編集]-[部分編集]メニュー | [編集]-[グループ編集]に名称変更し、編集ボタンエリアの[グループ編集]ボタンを追加 |
| [編集]-[部分編集]-[部分回転]メニュー | [編集]-[グループ編集]-[グループを軸回転(選択2原子)]に名称変更 |
| [編集]-[部分編集]-[結合角変更]メニュー | [編集]-[グループ編集]-[グループを軸回転(選択3原子)]に名称変更 |
| [編集]-[部分編集]-[部分移動]メニュー | [編集]-[グループ編集]-[グループを平行移動(マウス操作)]に名称変更 |
| [編集]-[部分編集]-[部分移動(スライダー)]メニュー | [編集]-[グループ編集]-[グループを平行移動(数値を指定)]に名称変更 |
| [編集]-[部分編集]-[部分自由回転]メニュー | [編集]-[グループ編集]-[グループを回転(マウス操作)]に名称変更 |
| [編集]-[部分編集]-[部分クリーン]メニュー | [編集]-[グループ編集]-[グループを簡易構造最適化]に名称変更 |
| [編集]-[部分編集]-[部分配向]メニュー | [編集]-[グループ編集]-[グループを回転(配向を指定)]に名称変更 |
| [編集]-[部分編集]-[部分重心]メニュー | [編集]-[ダミー原子を追加]-[グループの重心に追加]に名称変更 |
| [編集]-[変更]メニュー | [編集]-[選択原子間の距離/角度を変更]に名称変更 |
| [編集]-[部品]-[部品登録]、[部品削除]メニュー | [ツール]-[フラグメントを登録/削除]以下に移動 |
| [編集]-[番号交換]メニュー | [編集]-[番号の取り直し/ソート]-[選択2原子間で交換]に名称変更 |
| [編集]-[原子の並び替え]メニュー | [編集]-[番号の取り直し/ソート]-[水素とその他でソート]に名称変更 |
| [編集]-[配向]-[設定]メニュー | [編集]-[座標系の取り直し]-[カメラ座標系に設定]に名称変更 |
| [編集]-[配向]-[設定(3点)]メニュー | [編集]-[座標系の取り直し]-[選択3原子で設定]に名称変更 |
| [編集]-[配向]-[原点設定]メニュー | [編集]-[座標系の取り直し]-[選択原子の位置を原点に設定]に名称変更 |
| [編集]-[Z-Matrix]-[原子追加]メニュー | [編集]-[原子を追加]-[座標と結合関係を指定]に名称変更 |
| [編集]-[Z-Matrix]-[ダミー原子追加]メニュー | [編集]-[ダミー原子を追加]-[選択2原子に沿って追加]に名称変更 |
| [編集]-[Z-Matrix]-[二面角変更]メニュー | [編集]-[原子を移動]-[二面角を変更]に名称変更 |
| [編集]-[Z-Matrix]-[結合関係変更]メニュー | [編集]-[属性を変更]-[結合関係を変更]に名称変更 |
| [編集]-[Z-Matrix]-[原子移動]メニュー | [編集]-[原子を移動]-[Z-Matrixを保持して並進移動]に名称変更 |
| [編集]-[Z-Matrix]-[Z-Matrix再生成]メニュー | [編集]-[原子/結合の自動調整]-[Z-Matrixを再生成]に名称変更 |
| [編集]-[クリーン]メニュー | [編集]-[原子/結合の自動調整]-[簡易構造最適化]に名称変更 |
| [編集]-[座標反転]メニュー | [編集]-[キラリティ]-[X方向に座標を反転]に名称変更 |
| [編集]-[鏡像体生成]メニュー | [編集]-[キラリティ]-[鏡像体を生成]に名称変更 |
| [編集]-[分子種単位で選択]メニュー | [選択]-[分子種によるグループ選択]に名称変更 |
| [編集]-[分子種でソート]メニュー | [編集]-[番号の取り直し/ソート]の下に移動 |
| [編集]-[セルを作成/編集]の[Create]機能 | V8における[Create]の挙動は[Use Cubic Cell]チェックボックスを外した時に再現するように変更 |
| [編集]-[セルを作成/編集]の[Clear]ボタン | [編集]-[セルを削除]に名称変更 |

| | |
|---|--|
| [編集]-[周期境界折り返し]メニュー | [編集]-[周期境界条件に基づき原子を再配置]に名称変更し、結合を保持する場合は[セルの内側に分子単位で再配置]、結合を保持しない場合は[セルの内側に原子単位で再配置]を選択するように変更 |
| [編集]-[慣性主軸方向に回転]メニュー | [編集]-[座標系の取り直し]-[慣性主軸に設定]に名称変更 |
| [表示]メニュー | |
| [表示]-[全表示]メニュー | [表示]-[キーワード&座標表示エリアを表示]に名称変更 |
| [表示]-[センタリング]メニュー | [表示]-[常に中心を注視]に名称変更 |
| [表示]-[視点移動]メニュー | [表示]-[平行移動]に名称変更 |
| [表示]-[表示選択]メニュー | [表示]-[表示項目]に名称変更 |
| [表示]-[棒球表示]メニュー | [表示]-[分子の表現形式]に名称変更 |
| [表示]-[視線変更]メニュー | [表示]-[表示方向を変更]に名称変更 |
| [表示]-[空間充填モデル]メニュー | [表示]-[分子の表現形式]-[空間充填モデルを重ね合わせ表示]に名称変更 |
| [表示]-[周期境界折り返し表示]メニュー | [表示]-[周期境界条件の表現形式]に名称変更 |
| [表示]-[3D]メニュー | [表示]-[Winmostar Viewer]に名称変更 |
| [半経験QM]、[QM]、[MD]、[固体]共通 | |
| 各種キーワード設定ウインドウの[Set]ボタン | [OK]に名称変更 |
| [計算実行]ボタンで各種ソルバを実行 | 従来機能は残しつつ、各種キーワード設定ウインドウ内に新設された[Run]ボタンでも実行可 |
| 各種ソルバのメニューに移動してから計算のログファイルを確認するために「outファイル編集」ボタンをクリック | 従来機能はそれぞれ「ログを表示」に名称変更し、またメインウインドウに新設された「ログを開く」ボタンからも操作可能に |
| 各種Animationウインドウの[Rewind]、[Last]、[>]ボタン | ウインドウ右下に一般的な再生ボタン等の形式で表示 |
| 各種Animationウインドウの[3D]ボタン | [Open Viewer]に名称変更 |
| 各種Animationウインドウの[gro]ボタン | [Export...]ボタン-[Animated GRO File]メニューに移設 |
| 各種Animationウインドウの[jpeg]、[gif]チェックボックス | [Export...]ボタン-[JPEG Images]、[GIF Animation]メニューに移設 |
| [半経験QM]、[QM]メニュー | |
| [QM]-[リモートジョブ投入]メニュー | [ツール]-[リモートジョブ投入]に移設 |
| [QM]-[GAMESS]-[NCPUS]、[NODES(Firefly)]メニュー | [QM]-[GAMESS]-[キーワード設定]の中に移設 |
| [QM]-[GAMESS]-[インポート]-[\$VEC from punch]、[\$HESS from punch]メニュー | [QM]-[GAMESS]-[punchファイルから読み込み]-[\$VECを読み込み]、[\$HESSを読み込み] |
| [QM]-[NWChem]-[MPI設定]メニュー | [QM]-[NWChem]-[キーワード設定]の中に移設 |
| [QM]-[PIO]-[with GAMESS]メニュー | [QM]-[GAMESS]-[PIO解析] |
| [QM]-[PIO]-[with Gaussian]メニュー | [QM]-[Gaussian]-[PIO解析] |
| 各種MO Plotウインドウの[3D]、[cube]、[Energy]ボタン | [Draw]、[Generate cube]、[Show Diagram]に名称変更 |
| 各種MO Plotウインドウの[VRML]ボタン | [Export...]ボタン-[Save VRML]に名称変更 |
| 各種MO Plotウインドウの[Boundary]、[Contour Map]、[Save Cube]チェックボックス | [Draw boundary]、[Draw contour map]、[Dump cube file]に名称変更 |
| 各種MO Plotウインドウの[Iso. Level]テキストボックス | [Isosurface value]に名称変更 |
| 各種MO Plotウインドウの[Number of MO]テキストボックス | [Selected MO]に名称変更 |
| 各種IR Spectrumウインドウの[Anim]、[Vector]ボタン | [Animation]、[Vector]に名称変更 |
| 各種IR Spectrumウインドウの[Save]、[Copy]、[Excel]ボタン | [Export...]ボタン-[Save Image]、[Copy Image]、[Open Excel]に名称変更 |
| 各種IR Spectrumウインドウの[Displ. F]、[Width]スクロールバー | [Magnitude]、[Broadening]に名称変更 |
| 半経験QM、QMの各種インポートメニュー | インポートメニューを廃止しソルバ名のメニューの直下に配置、メニュー名を日本語化 |
| 各種Easy Setupウインドウの[Quit]ボタン | [Close]に名称変更 |
| 各種NMR (Chemical Shielding Tensor) ウインドウの[Ref.] | [Reference]に名称変更 |
| [MD]メニュー | |
| [MD]-[リモートジョブ投入]メニュー | [ツール]-[リモートジョブ投入]に移設 |
| [MD]-[溶媒を配置/系を構築]の[Put the molecule on the main window]チェックボックス | [Add Displayed Molecule]ボタンの機能に統合し、デフォルトでは何もリストに追加されていない状態に変更 |
| [MD]-[散逸粒子動力学法]メニュー | [MD]-[LAMMPS]-[散逸粒子動力学法]に名称変更 |
| [MD]-[Bond/Angle算出]メニュー | Animationウインドウの[Tools]-[Distance/Angle Change]に移設 |
| [MD]-[Gromacs]-[トラジェクトリ読み込み] [MD]-[LAMMPS]-[トラジェクトリ読み込み] [MD]-[Amber]-[トラジェクトリ読み込み] [MD]-[MODYLAS]-[トラジェクトリ読み込み] | それぞれ[アニメーション]に名称変更 |
| 各種エネルギー変化ウインドウの[Excel]ボタン | グラフ描画エリア下の[Options...]ボタンの[Open Excel]に移設 |
| Gromacs, LAMMPS実行時に、セルが作成されていなかったら自動でセルを作成 | 各種キーワード設定ウインドウを閉じるタイミングで、自動でセルを作成 |
| LAMMPSのログファイル、エネルギー変化ウインドウに出力されるgamma(界面張力xz方向界面数) | GamNsurfに名称変更 |
| [固体]メニュー | |
| [固体]-[リモートジョブ投入]メニュー | [ツール]-[リモートジョブ投入]に移設 |
| [固体]-[結晶ビルダ]メニュー | 結晶構造を0から指定する機能のみを[固体]-[結晶ビルダ]とし、それ以外の機能は[固体]メニュー以下に配置 |
| [固体]-[結晶ビルダ]の[Edit]-[Repeat] | [固体]-[スーパーセルを作成]に名称変更 |
| [固体]-[結晶ビルダ]の[Tool]-[Cleave Plane] | [固体]-[表面を切り出し]に名称変更 |
| [固体]-[結晶ビルダ]の[Tool]-[Insert Vacuum] | [固体]-[真空層を挿入]に名称変更 |
| [固体]-[結晶ビルダ]の[File]-[Exit](結晶ビルダの終了方法) | [Crystal Builder]ウインドウ右下に[OK]または[Cancel]ボタンを新設 |
| Quantum ESPRESSOキーワード設定ウインドウの[Automatically convert to primitive cell]チェックボックス | [Set ibrav=... and celldm]に名称変更し、デフォルトでチェックが入っていない状態に変更 |

| | |
|--|---|
| Quantum ESPRESSOキーワード設定ウインドウのデフォルト値 | 以下のキーワードのデフォルト値を以下のように変更 - atomic_position unit: angstrom - ecutwfc: 25 - ecutrho: 225 - mixing_beta: 0.3 |
| Quantum ESPRESSOキーワード設定ウインドウの[Attributes]タブ | [Pseudo Potentials]に名称変更 |
| Quantum ESPRESSO実行時に、セルが作成されていなかったら自動でセルを作成 | 各種キーワード設定ウインドウを閉じるタイミングで、自動でセルを作成 |
| [固体]-[Quantum ESPRESSO]-[エネルギー変化 (evp)]、[アニメーション(pos)]メニュー | [CPMDエネルギー変化]、[CPMDアニメーション]に名称変更 |
| リモートジョブ投入 | |
| シェルスクリプトやサブミットコマンドの引数における「\$0」(エイリアス文字) | 「%WM_INPUT%」に統合 |
| シェルスクリプトやサブミットコマンドの引数における「\$1」(エイリアス文字) | 「%WM_PREFIX%」に統合 |
| Winmostar 3Dアプリケーション | |
| アプリケーション名 | Winmostar Viewerに変更 |
| [View]-[Preferences]メニュー | [View]-[Representations]に名称変更 |
| その他不明点はお問い合わせください。 | |
| | |
| | 以上 |