

Winmostar V9移行ガイド	2019年2月7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	
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。 <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) 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。 その場合、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。 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。 <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設、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]に移設
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設
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]タブに移設
[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]以下に移設
[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]以下に移設
[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]の下に移設
[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
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い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
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