
Winmostar™ User Manual

リリース 9.0.0

X-Ability Co., Ltd.

2019年01月11日

Contents

1	はじめに	2
2	インストール方法	20
3	画面の説明・操作方法	24
4	基本的な操作の流れ	28
5	初期構造の作成方法	31
6	各種メニュー・ウインドウ	35
7	リモートジョブ	137
8	アドオン	145
9	その他のトピック	149
10	既知の不具合	151
11	よくある質問・トラブルシューティング	153

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 V9, X-Ability Co. Ltd., Tokyo, Japan, 2019.

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ェ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わ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:\winmos9\UserPref` ファイル名やディレクトリ名を示します。

`ls /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を使用しています。

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
    A.

    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
  
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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 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.

↪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

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

(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.

(d) Notwithstanding Section 2.2(b) above, no patent license

↳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

↳by

(次のページに続く)

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

↪(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

(前のページからの続き)

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.

(c) Representations.
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,

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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
 ↳may 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,
 ↳INCLUDING, WITHOUT LIMITATION, WARRANTIES THAT THE COVERED CODE IS FREE OF DEFECTS, MERCHANTABILITY, FIT FOR A PARTICULAR PURPOSE OR NON-
 ↳INFRINGEMENT. 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

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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 declaratory 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, 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 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

INITIAL

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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 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.

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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
↳a DLL or OCX or other library
for use as a designtime tool or for a Web server scripting environment.
↳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,
↳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

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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 ↳
↳ conjunction with the SOFTWARE; and
4) any associated media, documentation (including physical, electronic ↳
↳ 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 ↳
↳ as an officer or other employee acting for your employer, then "you" and "your" mean your principal, the ↳
↳ entity or other legal person for 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 ↳
↳ 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 ↳
↳ 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 ↳
↳ "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,

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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 more particularly connected to it over an intranet or the Internet.

"Developed Software" means those computer software products that are 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 operated (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/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 only 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 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 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

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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.

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
↳as an integral part of the
Developed Software in machine language compiled format (customarily an ".
↳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
↳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
↳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
↳provides a means to install and
Register the SOFTWARE. The Serial Number is subject to the restrictions
↳set forth in this EULA and may
not be disclosed or distributed either with your Developed Software or
↳in any other way. The disclosure

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

or distribution of the Serial Number shall constitute a breach of this 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 (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 (including, but not limited to, any images, photographs, code examples and text incorporated into the SOFTWARE), and any copies of the SOFTWARE, and any copyrights and other intellectual properties therein 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 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 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, except and only to the extent

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

that applicable law expressly permits such activity notwithstanding this limitation.

4. Software Transfers.

You may not rent or lease the SOFTWARE. You may transfer the SOFTWARE to 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 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, 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 without limitation any warranty with respect to this Software, documented here, its quality, performance, or fitness for a particular purpose. In no event shall Steema be liable to you for damages, whether direct or indirect, incidental, special, or consequential arising 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

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

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 with 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 matter of this EULA, whether oral or written. No terms or conditions, other than those contained in this 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 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 to orally modify this EULA.

2. You Indemnify Steema.

You agree to indemnify, hold harmless, and defend Steema and its suppliers and resellers from and against any and all claims or lawsuits, including attorney's fees, that arise or result from this EULA.

3. Interpretation of this EULA.

If for any reason a court of competent jurisdiction finds any provision of this EULA, or any portion thereof, to be unenforceable, that provision of this EULA will be enforced 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 a waiver of future enforcement of that or any other provision. Except as otherwise required or 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

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、予めトライアル版などで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

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

インストール中に想定しない状況に遭遇した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. [ダウンロードページ](#) からインストーラ winmostar0_setup_X.X.X.exe (X.X.X はバージョンを示す) をダウンロードし、実行します。
2. インストール先フォルダを指定し (デフォルトは C:\winmos9) インストールを開始すると、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。

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。

注釈:

- 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。
 - 既にインストールされている他の Winmostar の設定を引き継ぐ場合は、インストール先フォルダの UserPref フォルダの下のファイルをコピーしてください。
3. ライセンスコードを取得していない場合は、[機能表](#) にて使用する版を検討し、以下のリンク先からライセンスコードを登録または購入してください。
 - [無償版](#)
 - [学生版](#)
 - [プロフェッショナル版 \(トライアル \)](#)
 - [プロフェッショナル版](#)
 4. 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。
 5. 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。
 - [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 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 は次のステップでインストールする `cygwin_wm` に含まれます。
-

6. MD、Solid パックを使用、およびその他の一部の処理を実行する場合は、以下のいずれかの手順で Winmostar 向けの Cygwin の環境 (`cygwin_wm` と呼びます) を構築します。
 - **【推奨】ビルド済みの `cygwin_wm` をインストールする場合**
 - `cygwin_wm` をビルドする場合 (非推奨、上級者向け)
 - Cygwin の代わりに Windows Subsystem for Linux を用いる場合 (ベータ版)
7. 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 と `cygwin_wm` のインストールフォルダを監視対象から除外します。
8. リモートサーバへのジョブ投入 (リモートジョブと呼ぶ) を行う場合は、投入先の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する。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。
 - [Linux 版 TORQUE インストールマニュアル](#)
9. リモートジョブを行う場合は、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 NWChem, Gromacs, Amber インストールマニュアル](#)
 - [Linux 版 GAMESS 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 \(詳細版\)](#)
 - [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](#)
10. 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。

また、必須ではありませんが、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することを推奨します。

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

2.4 アップデート

インストールと同じ方法でアップデート、バージョンアップ可能です。上書きインストールする場合は、上書き前の Winmostar を終了してからインストールしてください。

2.5 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。

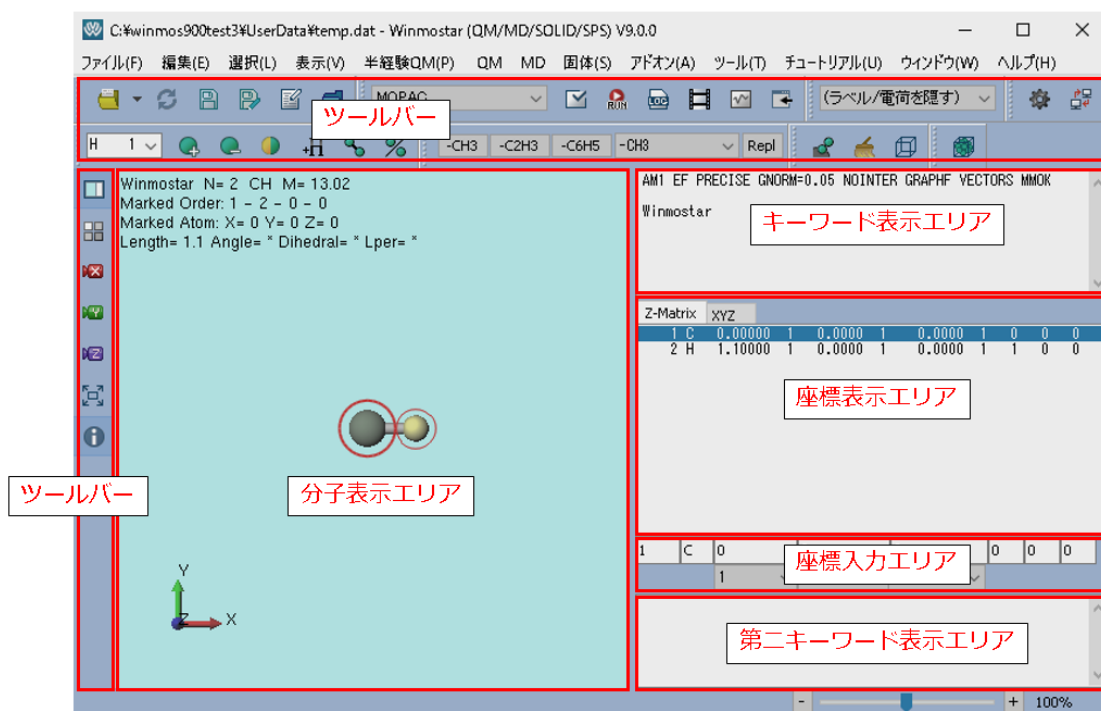
Chapter 3

画面の説明・操作方法

3.1 画面の説明

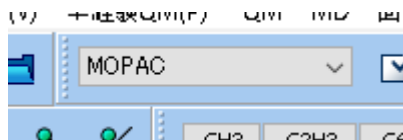
Winmostar を起動して出現するウインドウ（メインウインドウ と呼ぶ）は下図の様な構成となっています。

メインウイ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。



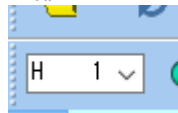
ツールバー メインメニューの中でよく使われる機能をここでも選択することができます。ポインタを重ねるとそれぞれのボタンの役割を確認できます。また、以下の機能のみ特殊な動作をします。

- 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



(出荷時は MOPAC が選ばれるが最後に使ったソルバが表示される) で選ばれているソルバに応じて、その横のキーワード設定、実行などのボタンの役割が変化します。

- 上部のツールバーの 2 行目左端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



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イ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

メインウイ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 視線の平行移動	原子を置換 原子を削除	表示の拡大・縮小
Shift	分子単位でグループ選択 または解除			
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

表 3: 分子構造の微調整

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 4: 表示関連の操作

表示の拡大	F3
表示の縮小	F2
表示をウインドウに合わせる	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

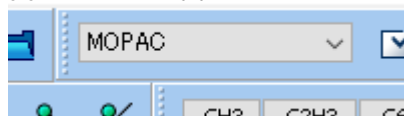
ここでは、Winmostar を用いて量子化学計算、分子動力学計算、あるいは第一原理計算を流す基本的な流れを紹介합니다。

1. 初期構造を作成

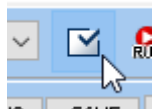
初期構造の作成方法 の手順で、計算したい系を作成します。

2. 計算条件 (キーワード) の設定

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



で使用したいソルバを選び、 キーワード設定



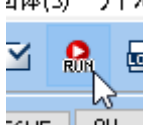
ボタン をクリックします。

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)

- キーワード設定ウインドウが開いた状態で *Run* ボタンを押します。
- キーワード設定ウインドウを *OK* ボタンを押して閉じます。メインウインドウの **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、



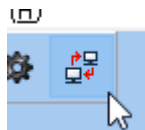
ツールバーの 実行 ボタン をクリックします。

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。



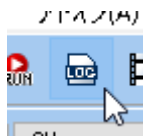
次に、ツールバーのリモートジョブ投入 ボタン をクリックしサーバへの接続設定を行います。その後、Submit Remote Job ウィンドウ上の Send & Submit ボタンを押し、入力ファイルの保存、転送 (Send) とリモートサーバでのジョブの登録 (Submit) を一度に行います。

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

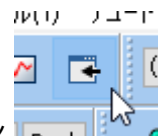


ツールバーの ログを表示 ボタン を選択します。

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

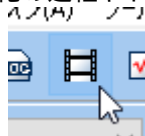


ジョブが正常終了している場合は、ツールバーの結果解析 ボタン を押し、表示したい物理量のメニューを選択します。

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があります。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ン



ボタン を押します。

- SCF や MD 計算中のエネルギーや温度などの変化をグラフ化する場合は、ツールバー



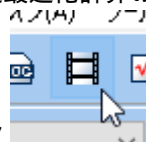
のエネルギー変化 ボタン を押します。

- 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インドウを開き、ジョブを開始します。

- MD については、キーワード設定ウインドウで *Extending Simulation* にチェックを入れます。
- Quantum ESPRESSO については、キーワード設定ウインドウで *Output Directory* に *Continue* を指定します。
- 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、一



旦 ツールバーのアニメーション ボタン を押して、最終構造をメインウイ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。

- 各種形式のファイルを **開く** またはメインウイ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** → **インポート** → *SMILES* から読み込む。
- 分子構造をメインウイ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。
 6. 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。
 7. 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** → `':ref:'tools_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、**MD** → **ポリマーメニュー** の方法を使った方が効率が良い。
 - 結晶構造、スラブモデル、クラスターモデルの作成には、それぞれ **結晶ビルダ**、**表面を切り出し**、**真空層を挿入**、**クラスタを作成** を実行する。

5.2 点電荷の割り当て

MD 計算の場合は、多くの力場において点電荷を必要とするため、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たうえで、各種キーワード設定ウインドウの *Force Field* タブで *Use user-defined charge* を選択する。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。

- Gasteiger 電荷を割り当てる。
 - MD → 電荷を割り当て → [Acyppe](#) 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。
 - AM1/BCC 電荷も同様の手順で明示的に割り当てられる。
- RESP 電荷を割り当てる。
 1. *QM* → *GAMESS* → キーワード設定 → *Easy Setup* にて、計算手法、基底関数を選択し、*Method* に *ESP/RESP* を選択する。イオンの場合は *ICHARG* に電荷を入力する。
 2. *Easy Setup* ウインドウを *Close* ボタンで閉じ、*GAMESS Setup* ウインドウで *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* → [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インドウに読み込む。
 - 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インドウで開く。
- 元素ごとに値を指定して割り当てる。
 - MD → 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、[原子を追加](#) → [電荷/スピン変更](#) から電荷を入力する。
- 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、MD → [ポリマー メニュー](#) 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. [セルを作成/編集](#) にて *Create* → *Distance* の値を設定し *Create* ボタンを押す。適宜セルのサイズを微調整した上で、*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. 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. 溶媒を配置/セルを構築 を選択する。
6. 系内にどの分子を何分子入れるか決める。メインウイ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* ウインドウ下部の *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、少し低い密度から始め、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。
- *cygwin_wm* 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/編集*、 *追加読み込み* を組み合わせることで作成可能です。

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。
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. 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、 *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、 *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. *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、5. の手順で密度を小さめに設定し、 *分子構造の作成* と *点電荷の割り当て* の手順であらかじめ作成し mol2 形式で保存した低分子成分を *分子を挿入* にて選択し挿入する。

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. セルを作成/編集 にて *Expand* → *Width* の値と *Axis* を設定し *Expand* ボタンを押す。Expand するサイズは、気相のサイズにする。その後、*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 [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。
-

Chapter 6

各種メニュー・ウインドウ

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イ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 再度読み込み

メインウイ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。

6.1.5 追加読み込み

メインウイ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。

6.1.6 上書き保存

メインウイ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。

6.1.7 名前を付けて保存

メインウイ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、キーワード設定ウイ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。

6.1.8 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、メインウインドウに読み込みます。 *Import SMILES* ウインドウが開いたら、テキストボックスに SMILES 形式の文字列を入力し、 *Convert* を押してください。内部的には同時に Bolloon による配座探索も実行されます。

6.1.9 エクスポート

選択した形式でメインウインドウに表示されている内容を出力します。

SMILES

メインウイ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。メインウイ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 *cygwin_wm* のセットアップが必要です。

構造式

メインウイ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。メインウイ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 *cygwin_wm* のセットアップが必要です。

画像

メインウイ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

メインウイ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

メインウイ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。

6.1.10 テキストエディタで開く

メインウインドウのタイトルに表示されるファイルを、環境設定ウイ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、変更をメインウインドウに反映することができます。

6.1.11 エクスプローラで表示

メインウイ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。

6.1.12 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。

6.1.13 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。

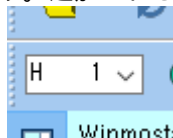
6.2.3 テキストに戻す

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 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

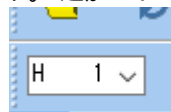


の編集操作で適用される元素を選択 プルダウンメニュー で選択します。

ヒント: F4 または ツールバー から操作できます。

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



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 Winmostar 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。

6.2.5 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。

6.2.6 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。

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。

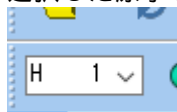
二面角を変更

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。

6.2.7 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



Winmostar 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。

注釈: User Charge または Spin Density をメインウインドウ上で表示したい場合は、表示 → ラベル/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。

6.2.8 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。

6.2.9 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。

6.2.10 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。

6.2.11 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。

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 1 つ付加します。

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。

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: メインウイ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 *cygwin_wm* 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。

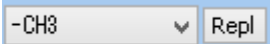
注釈: メインウインドウに表示されている構造にリガンド、溶媒などのタンパク質以外の分子が含まれている場合、選択 → 分子種によるグループ選択 および 編集 → グループ編集 → グループを削除 機能を用いて事前に削除してください。

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

6.2.12 水素を削除

全ての水素原子を削除します。

6.2.13 フラグメントで置換

マーカー (太赤丸) が付いた原子を、ツールバー の フラグメントを選択 プルダウンメニュー  で選ばれた部品 (置換基) で置換します。フラグメントを選択 プルダウンメニューの中で、-CHCH- と -CH- は多環構造を作るための部品で、置換部品が 2 番目のマーカー (赤細丸) が付いた原子の方向に向くように生成されます。

ヒント: F6、Repl ボタン、または原子を右クリックでも操作できます。

6.2.14 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、本機能呼び出すと、ナフタレン分子が作成されます。

6.2.15 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（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。

6.2.16 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。

6.2.17 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。

6.2.18 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。

6.2.19 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。

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

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。

6.2.20 キラリティ

x 方向に座標を反転

メインウイ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。

6.2.21 セルを作成/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* ボタンをクリックすると、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。

6.2.22 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。

6.2.23 密度を変更

密度を変更を指定して、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。

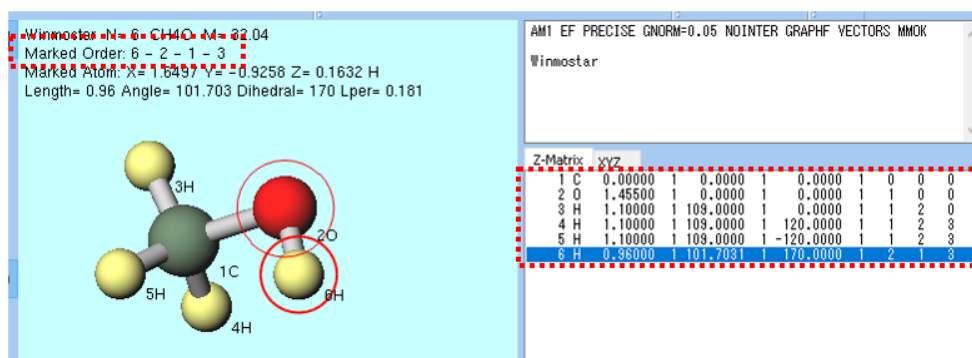
6.3 選択メニュー

原子・分子を選択する機能に関するメニューです。

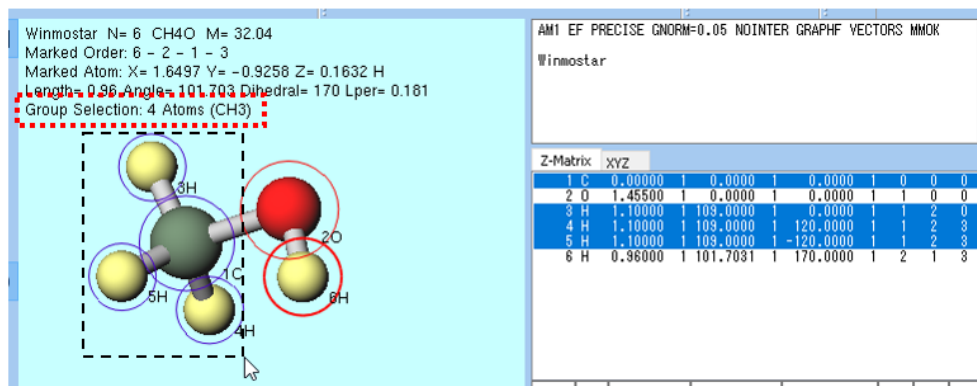
ヒント: 原子の選択方法

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。

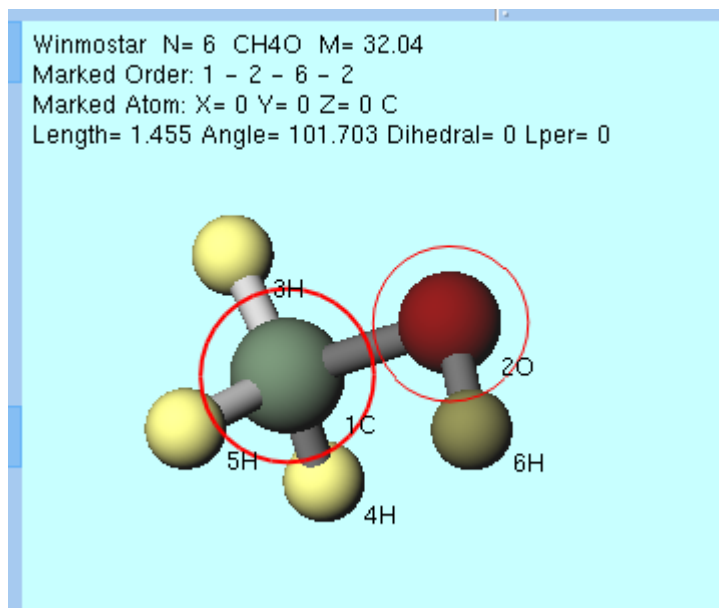
赤丸のマーカを用いる方法は主に1原子に対する操作で使われます。分子表示エリアで左クリックした原子にマーカが移動します。下図のメタノール分子の例では、OH（ヒドロキシ）基の酸素（赤）→水素（黄色）の順に左クリックしており、最後にマーカが付けられた原子に太赤丸、1つ前にマーカを付けられた原子に細赤丸が付いています。また、下図右赤枠内の、座標表示エリアで左クリックすることでマーカが移動します。マーカが付けられた原子は過去4つ分記憶され、下図左上赤枠内のように表示されます（下図の場合は *Marked Order: 6 - 2 - 1 - 3*）。各原子の番号は座標表示エリアまたは表示 → ラベル/電荷 → 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 → 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を移動させた後、編集 → グループ編集 → 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（画面上ではハイライトされる）。



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。

表 1: 基礎的な構文

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 <i>Apply</i> ボタン下のリストで確認できます。
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。

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。

表 2: 論理演算子を用いた複合的な構文

(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 (element H))	残基名が GLY で、かつ水素以外の原子を選択します。

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。

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。

6.4 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わりません。

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。

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。

6.4.10 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。

6.4.11 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。
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。
User 電荷	編集 → 属性を変更 → 電荷/スピンを変更 や MD → 電荷を割り当て などの機能でユーザが割り当てた電荷を表示します。
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。
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。

6.4.12 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。

6.4.13 分子の表現形式

分子の表現方法（モデル）を選択します。

6.4.14 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。

6.4.15 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。

6.4.16 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。読み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。

6.4.17 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* → *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。

Hamiltonian 使用するハミルトニアンを指定します。MOPAC の各バ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-NAL=RM1.rm1	MOPAC 7.1, MOPAC 93, MOPAC 97, MOPAC 2000, MOPAC 2002, 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	説明
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。
mgf ファイル 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_temp\	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 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。

6.5.7 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 → ラベル/電荷 → Mulliken 電荷 を選択すると電荷が表示されます。

6.5.8 アニメーション (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。

6.5.9 アニメーション (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。

6.5.10 振動スペクトル (out)

out ファイルを選択し、振動スペクトル (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。

6.5.11 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 用のファイルを出力します。

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。

- $Z_a * Z_b / r$
- $Z_a * Z_b * \gamma_{ab}$

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	説明
lst ファイル water.lst	計算のログファイルです。
作業ディレクトリ water.cnd_temp\	作業ディレクトリです。

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 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 → GAMESS メニュー

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* → *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。

Advance 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 from punch

\$VEC を punch ファイルから読み込みます。

\$HESS from punch

\$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](#) → [環境設定](#) → [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、Firefly や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	説明
out ファイル water.out	計算のログファイルです。
bat ファイル 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。

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 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 → ラベル/電荷 → *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。

6.7.8 IR(Hessian)/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。

6.7.9 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。内部では、punch ファイルの情報から Antechamber で読み込めるファイルを作成し、Antechamber を用いて RESP 電荷を算出しています。

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

6.7.10 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。

6.7.11 PIO 解析

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

6.8 QM → Gaussian メニュー

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、一旦メインウイ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* → *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。
- oniom** ONIOM 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](#) → [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.gjf` の時のファイル/フォルダ名を併記しています。

種類	説明
log ファイル <code>water.log</code>	計算のログファイルです。
bat ファイル <code>water.gjf.bat</code>	Gaussian を実行するためのバッチファイルです。

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

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。

6.8.6 アニメーション (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。

6.8.7 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](#) → [ラベル/電荷](#) → [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。

6.8.8 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。

6.8.9 Archive

Gaussian の出力のアーカイブ部分の高精度座標を読み込みます。

6.8.10 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。

6.8.11 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 ($\alpha - \beta$)

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。

6.8.12 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。

6.8.13 PIO 解析

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

6.9 QM → NWChem メニュー

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、一旦メインウイ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。

Freeze1 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みます。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。

Advance 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
out ファイル water.out	計算のログファイルです。
movecs ファイル water.movecs	計算の詳細情報をまとめたファイルです。
bat ファイル water.bat	NWChem 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.nw_temp\	作業ディレクトリです。

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。

6.9.6 アニメーション (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。

6.9.7 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 → ラベル/電荷 → *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。

6.9.8 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。

RUNTYPE=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 **RUNTYPE=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 *cygwin_wm* 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、その中で処理が行われます。内部では Cygwin 上で `gmx insert-molecules` または `gmx solvate` を実行します。作業用フォルダ以下の `generate.sh`、`generate.log` に詳細が記載されています。作業用フォルダ以下の `output.gro` 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せん。

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 $0.5 \sim 0.8 \text{ g/cm}^3$ 程度に設定します。

Set Distance from Solute *Method* に *Solvate* を選んでいる際に、メイン画面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 Box Size シミュレーションセルのサイズを直接指定します。

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。

Reset このウインドウにおける設定をリセットします。

Build このウイ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、メインウイ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/編集](#) 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 電荷を割り当て

Acptype を使用

メインウインドウに 1 分子だけ表示されている状態で本機能呼び出すと、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 Acptype 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 `_acptype_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.acptypeinput_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

メインウイ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。

6.10.4 ポリマー

MD → [ポリマー メニュー](#) を参照してください。

6.10.5 界面ビルダ

MD → 界面ビルダ メニュー を参照してください。

6.10.6 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。

6.10.7 Gromacs

MD → *Gromacs* メニュー を参照してください。

6.10.8 LAMMPS

MD → *LAMMPS* メニュー を参照してください。

6.10.9 Amber

MD → *Amber* メニュー を参照してください。

6.10.10 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 → *Gromacs* メニュー

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 *cygwin_wm* のセットアップが必要です。

6.11.1 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、一旦メインウイ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。

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。プリセットの内容は、各キーワードから確認できます。

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指定します。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。

Constraints

constraints 拘束条件を選択します。

Advance

Boundary Condition

pbz 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

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)

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

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ルリングします。

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。

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。

Force Field

Generate parameters メインウインドウに表示された系に対し、新たに力場パラメータをアサインしたポロジファイル (top ファイル) を作成します。

Force field

(General) 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, OPLS/AA-L の場合は **acpype** が、Dreiding の場合は内製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。

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。サブウイ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。

(Protein) タンパク質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。

(Water) 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。

Charge

Assign charges **acpype** により算出する電荷を用いてトポロジファイルを作成します。*Method* にはその方法を指定します。

警告: ポリマーの場合は **acptype** による電荷の算出に時間がかかるため、あらかじめポリマービルダを用いて系を作成し、*Use User-defined Charge* にチェックを入れてください。

Use user-defined charge メインウィンドウ上で設定されている各原子の点電荷の値を用いてトポロジファイルを作成します。

注釈: メインウィンドウ上で設定されている点電荷の値は、**表示ボタンエリア** の **アノテーションボタン** から *User Charge* などを選択するか、.mol2 形式で保存し **テキストエディタで開く** で開くことにより確認できます。

Add [position_restraints] for protein タンパク質が存在する場合は *Advance* 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。

Add [position_restraints] for selected atoms ユーザが指定する分子に対し、*Advance* 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。

Add [distance/angle/dihedral_restraints] for selected atoms ユーザが指定する分子に対し、*Advance* タブにおける *-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、トポロジファイルを生成します。

注釈:

- *Load from Existing File* を選択しない場合はソルバの実行時に自動的にトポロジファイルが生成されるため、この操作は必須ではありません。
- トポロジファイルをエディタ等で編集してカスタマイズしたい場合は、本機能を使用して保存した上で、*Load from Existing File* にて選択してください。

Load from existing file/Use parameters in displayed file 既に存在しているトポロジファイルを用いて MD 計算を実行する場合に選択します。LAMMPS の場合は、メインウィンドウで既に存在している 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。

Edit 選択されたトポロジファイルをテキストエディタで編集する。

Generate Simulation Cell メインウィンドウにおいてシミュレーションセルが定義されていない場合のみ設定が有効となる。チェックが入っている場合は、メインウィンドウに表示された分子の周囲に *Distance* で指定された距離だけ離れた場所にシミュレーションセルを自動発生させる。

6.11.2 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、*Force Field* タブ → *Generate parameters* にチェックが入った座標ファイル (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ブを開始します。

- *Extending Simulation* にチェックがなく、*Force Field* タブ → *Load from existing file* にチェックが入っている場合
メインウインドウで開かれている座標ファイル (拡張子: gro) と、*Load from existing file*
のところ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 メインウイ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。
sh ファイル 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。
bat ファイル water.gro.bat	water.sh 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_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	説明
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。

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。
-

6.11.3 ログを表示 (out)

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。

6.11.4 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 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。

6.11.6 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。

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。

6.11.7 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。

6.11.8 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。

6.11.9 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。

6.11.10 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。動径分布関数は *Reference Group* と *Target Group* の間を計算されます。

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* → *Gromacs* → *ndx* ファイルにグループを追加 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。

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。

6.11.11 平均二乗変位

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。

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。

メインウイ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 → ndx ファイルにグループを追加 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。

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 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。

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。

メインウイ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 → ndx ファイルにグループを追加 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。

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。

6.11.13 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。

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。

メインウイ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 → ndx ファイルにグループを追加 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。

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。

6.11.14 比誘電率

Gromacs が出力した trr, tpr, ndx ファイルを選択し、比誘電率を表示します。内部的には **gmx dipoles** コマンドが実行されます。

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。

メインウイ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 → ndx ファイルにグループを追加 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。

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。

6.11.15 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。

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。

メインウイ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 → ndx ファイルにグループを追加 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。

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。

6.11.16 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。

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 → Gromacs → ndx ファイルにグループを追加 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。

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。

6.11.17 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。

6.11.18 χ /DPD パラメータ

Gromacs が出力した edr, gro ファイルから、 χ パラメータ・DPD a_{ij} 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。

6.11.19 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。*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 *reference* 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。

6.11.20 ndx ファイルにグループを追加

結果解析したい原子をメインウィンドウでグループ選択し、本機能を選択して既存の ndx を選ぶと、グループ選択された原子のグループが ndx ファイルに新たに追加されます。

6.11.21 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。

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* → *Gromacs* → *ndx* ファイルにグループを追加 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。

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。

6.11.22 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。

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。

メインウイ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 → *ndx* ファイルにグループを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。

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。

6.11.23 Ramachandoran 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 Ramachandoran 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。

Residue ここで選択した残基の Ramachandoran 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。

メインウイ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 → *ndx* ファイルにグループを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。

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。

6.11.24 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。

- 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。
 - Solution system (溶質分子 1 個 + 溶媒分子多数)
 - Solvent system (溶媒分子多数)
 - Solute system (溶質分子 1 個)
- ERmod* 実行 タブを選択します。
- 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。
- 同様に *Solvent* タブで B. Solvent system のファイルを選択します。

5. 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。
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。

6.11.25 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。

6.11.26 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。
3. *Integration Path* タブにて、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 ($\lambda=1$, 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 ($\lambda=1$) 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 λ 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。

6.11.27 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。*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の様子を示しています。

6.12 MD → LAMMPS メニュー

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 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。

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。プリセットの内容は、各キーワードから確認できます。

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。

Potential File 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 *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。

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

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。

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。

Pressure 目標圧力を指定します。

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

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

Advance

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。

Tdamp 温度制御の時定数パラメータを指定します。

Pdamp 圧力制御の時定数パラメータを指定します。

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

Random Seed 初速度発生時の擬似乱数の種を指定します。

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。

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

rigid 分子を剛体として扱います。

SHAKE tolerance SHAKE 法の打ち切り誤差を指定します。

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。

Calculate Thermal Conductivity 原子の流速の自己相関関数から算出する熱伝導率を出力します。

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。

Interaction

Cutoff(vdw) *vdw(LJ)* ポテンシャルのカットオフ半径を指定します。

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。

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。

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。

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。

Non-equilibrium (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せん。

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 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 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 Pull 計算時に、 **グループ選択** で Pull したい原子（複数可）を選択した上で *Set* ボタンをクリックすると、その原子が Pull のターゲットとなります。

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

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 拘束計算時に、2 原子を **グループ選択** し *Set* ボタンをクリックすると、その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。

Restrained Atoms 絶対座標を固定する原子を指定します。

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 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。

Force Field

Generate parameters メインウィンドウに表示された系に対し、新たに力場パラメータをアサインしたトポロジファイル (top ファイル) を作成します。

Force field

(General) 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、OPLS/AA-L の場合は **acpype** が、Dreiding の場合は内製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。

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したい時などに使用します。

(Protein) タンパク質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。

(Water) 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。

Charge

Assign charges **acpype** により算出する電荷を用いてトポロジファイルを作成します。*Method* にはその方法を指定します。

警告: ポリマーの場合は **acpype** による電荷の算出に時間がかかるため、あらかじめポリマービルダを用いて系を作成し、*Use User-defined Charge* にチェックを入れてください。

Use user-defined charge メインウィンドウ上で設定されている各原子の点電荷の値を用いてトポロジファイルを作成します。

注釈: メインウィンドウ上で設定されている点電荷の値は、表示ボタンエリアのアノテーションボタンから *User Charge* などを選択するか、.mol2 形式で保存しテキストエディタで開く で開くことにより確認できます。

Add [position_restraints] for protein タンパク質が存在する場合は *Advance* 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。

Add [position_restraints] for selected atoms ユーザが指定する分子に対し、*Advance* 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。

Add [distance/angle/dihedral_restraints] for selected atoms ユーザが指定する分子に対し、*Advance* タブにおける *-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、トポロジファイルを生成します。

注釈:

- *Load from Existing File* を選択しない場合はソルバの実行時に自動的にトポロジファイルが生成されるため、この操作は必須ではありません。
- トポロジファイルをエディタ等で編集してカスタマイズしたい場合は、本機能を使用して保存した上で、*Load from Existing File* にて選択してください。

Load from existing file/Use parameters in displayed file 既に存在しているトポロジファイルを用いて MD 計算を実行する場合に選択します。LAMMPS の場合は、メインウィンドウで既に存在している 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。

Edit 選択されたトポロジファイルをテキストエディタで編集する。

Generate Simulation Cell メインウィンドウにおいてシミュレーションセルが定義されていない場合のみ設定が有効となる。チェックが入っている場合は、メインウィンドウに表示された分子の周囲に *Distance* で指定された距離だけ離れた場所にシミュレーションセルを自動発生させる。

6.12.2 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、*Force Field* タブ → *Generate parameters* にチェックが入った 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、*Force Field* タブ → *Use parameters in displayed file* にチェックが入っている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` 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.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。
bat ファイル 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す。
	gro 形式の座標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。

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。
-

6.12.3 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。

6.12.4 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。

6.12.5 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。

6.12.6 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。

6.12.7 平均二乗変位

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 [平均二乗変位](#) を参照してください。

6.12.8 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。

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ータをポテンシャルファイルに保存してウインドウを閉じます。

Close 設定内容を破棄してウインドウを閉じます。

6.13 MD → Amber メニュー

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 `cygwin_wm` 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** 温度スケール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。

Advance

- 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_in** 衝突頻度 γ 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。

6.13.5 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。

6.13.6 トラジェクトリ読み込み

mddcrd 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。

6.13.7 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。

6.14 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、wm0 という拡張子で保存されます。wm0 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。

[Polymerization Degree] 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イ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 Configuration]

[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] ウインドウを閉じます。

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。

[Polymerization Degree] 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イ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。

[Polymerization Degree] 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。

[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。

6.14.5 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 Configuration]

[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。

[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。

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。

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 軸方向のリピ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 Constraints

[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。

Enable 3D View OpenGL を用いて描画します。

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 → 元に戻る** 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。

View メニュー **結晶ビルダ** と同じです。

6.16.3 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。

6.16.4 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。

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。

OK 処理を実行します。

6.16.5 クラスタを作成

結晶構造からナノクラスタを切り出します。

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。

6.16.6 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。

6.16.7 Quantum ESPRESSO

固体 → *Quantum ESPRESSO* メニュー を参照してください。

6.16.8 OpenMX

OpenMX に関するメニューです。

6.16.9 FDMNES

固体 → *FDMNES* メニュー を参照してください。

6.16.10 BoltzTraP

BoltzTraP に関するメニューです。

6.17 固体 → *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。

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) (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。

Advance 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。

diagonalization 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よい場合があります。

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。

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。

lfcpopt 化学ポテンシャル一定 (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。

fc_mu 化学ポテンシャル一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。

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
pwout ファイル <code>si.pwout</code>	計算のログファイルです。
bat ファイル <code>si.bat</code>	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 <code>si_qe_data\</code>	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
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力ファイルです。
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 のログファイルです。

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。

6.17.3 ログを表示 (pwout)

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

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 アニメーション (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。

6.17.5 SCF エネルギー変化

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。

6.17.6 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。

6.17.7 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。

6.17.8 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。

6.17.9 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。

6.17.10 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。

6.17.11 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。

6.17.12 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。

6.17.13 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。

6.17.14 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。

6.17.15 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 $2\pi/a$ 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。

6.17.16 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。

6.17.17 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。

6.17.18 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。

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。

6.17.19 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。

6.17.20 CPMD アニメーション (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 [アニメーション](#) 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。

6.17.21 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。

6.17.22 NEB 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。

6.17.23 NEB 実行

neb.x を用いて NEB 計算を実行します。

6.17.24 遷移状態 (NEB)

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。

6.18 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。

6.18.1 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 XAFS 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 XAFS スペクトルの電子殻を選択します。

Range 取得したい XAFS 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します。

Definition for Energy XAFS 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。

6.18.2 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	説明
log ファイル cu.log	計算のログファイルです。
bat ファイル 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。

6.18.3 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。

6.18.4 XAFS スペクトル

conv ファイル (*_conv.txt) を選択し、XAFS スペクトルを表示します。

6.19 ツールメニュー

6.19.1 環境設定

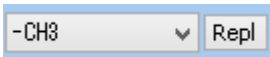
環境設定ウインドウを開きます。詳細は [ツール → 環境設定 メニュー](#) を参照してください。

6.19.2 フラグメントを登録/削除

フラグメントを登録

メインウイ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

ツールバーのフラグメントを選択プルダウンメニュー  で選ばれた部品の登録を削除します。

6.19.3 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。

6.19.4 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と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です。

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。

6.19.5 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)

6.19.6 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。

6.19.7 慣性半径

分子の慣性半径を計算します。

6.19.8 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。

6.19.9 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。

6.19.10 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。

6.19.11 Cygwin

cygwin_wm の端末画面 (ターミナル) を起動します。

6.19.12 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。

6.19.13 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。

6.19.14 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。

1. 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 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。

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。

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。V9 からは、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。

新しいリモートジョブ投入ウィンドウ (V9) を使用 V9 から採用されたりリモートジョブ投入ウィンドウを使用します。

表示タブ

標準色 配色を、Winmostar、GaussView、Jmol、Rasmol、旧 Winmostar、特許出願用モードから選択します。

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 (3D) 3D 表示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。

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。

3D 表示 チェックが入っている場合 (デフォルト) は、OpenGL を用いて分子表示エリアに描画します。入っていない場合は、V7 までの描画エンジンを使用します。

プログラムパス 各種プログラムのインストールパスを指定します。

6.21 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。

6.22 ヘルプメニュー

6.22.1 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。

6.22.2 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。

6.22.3 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。

6.22.4 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。

6.22.5 cygwin_wm を診断

Check Now ボタンをクリックすると、cygwin_wm 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。

一部のセキュリティ対策ソフトの動作環境下では、cygwin_wmをインストールする際に、cygwin_wm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。

6.22.6 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。

6.22.7 デバッグモード

デバッグモードに切り替えます。

6.23 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 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 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。

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** → *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

Distance/Angle Change トraj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。
2. *Target Atoms* にコ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。

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rajェクトリファイルを作成します。

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。

Dynamics 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。

Excel ボタン リストの内容を csv 形式で出力し、Excel を起動して読み込みます。

6.24 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。

6.25 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 → *Open* メニュー 描画したい cube ファイルを選びます。

File → *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 → *Open Jmol* メニュー Jmol で表示します。

File → *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。*ESP2* は Population 解析後の点電荷から算出する静電ポテンシャルのため、*ESP* よりも高速に動作します。*Surface* が付く場合は、分子表面上での物理量の分布を表示します。

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。

Draw (2D) ボタン ボリュームデータをメインウィンドウで描画します。(deprecated)

Close ボタン このウィンドウを閉じます。

6.26 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。

Y Scale 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。

6.27 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。

6.28 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。

6.29 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。

6.30 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。

6.31 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。

6.32 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。

6.32.1 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・左右に移動します。

6.32.2 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 Winmostar 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。

6.32.3 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 のウインドウの左上にアニメーション操作の 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。

6.32.4 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 本ウインドウ中部の 1 から 9 を各分子に割り当てます。

Composition 本ウインドウ中部の 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。

6.33 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ェアです。

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。

6.33.1 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 × (閉じる) ボタンか *File* → *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。

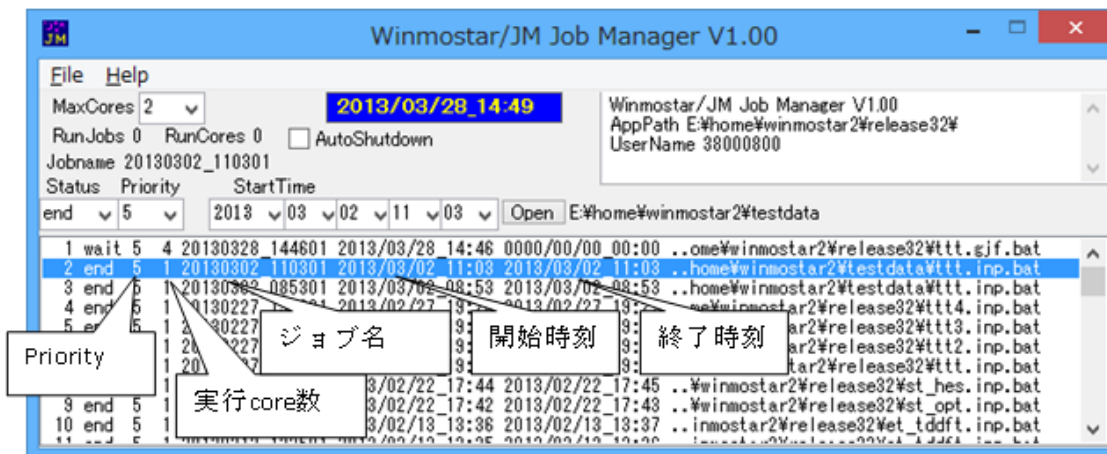
MaxCores は JM が使用できる最大コア数で、デフォルトではマシンのコア数に設定されます。この値が大きいと同時に多数のジョブが並列に実行されますが、ローカルマシンのコア数より多く設定しても効率は上がりません。

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。



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。

6.33.2 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 × (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* → *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。

6.33.3 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。)

6.33.4 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。

6.33.5 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

V8.027 時点で Winmostar が対応するジョブスケジューラは以下の通りです。カスタマイズサービス Winmostar for you 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。

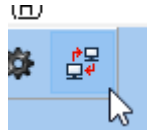
- TORQUE (PBS)
- SGE, UGE
- SLURM
- T2SUB
- llsbmit
- NQS
- NQS2
- ST
- NSUB
- Rescale

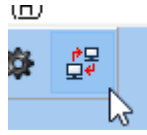
また、ジョブスケジューラがインストールされていない環境でも、直接ソルバを起動したり、`qsub`、`qstat` などのコマンドを模倣するコマンド、スクリプトを用意することで、一部機能を利用することができます。

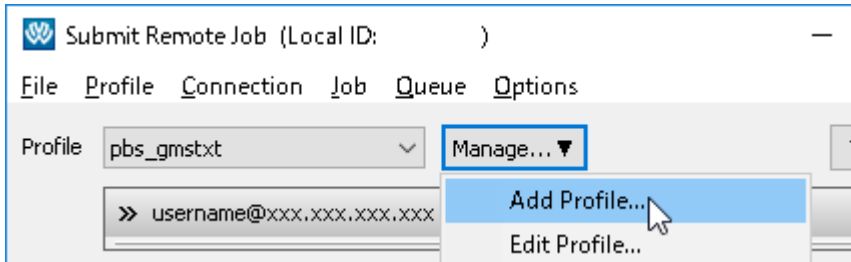
7.2 リモートジョブの実行手順

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。

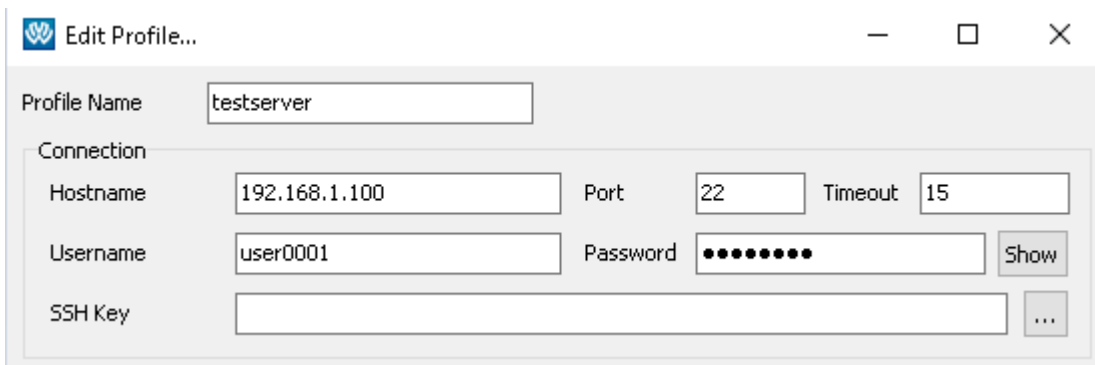
1. 計算を実行したいサーバに、ジョブスケジューラとソルバをセットアップしてください。
これからインストールする場合は、[こちら](#)を参考にしてください。
2. [基本的な操作の流れ](#)の1, 2の手順に従い初期条件の作成とキーワードの設定を行い、キーワード設定ウィンドウを *OK* ボタンを押して閉じます。



3. ツールバーのリモートジョブ投入 ボタン  をクリックします。
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... → Add Profile...* を選択します。

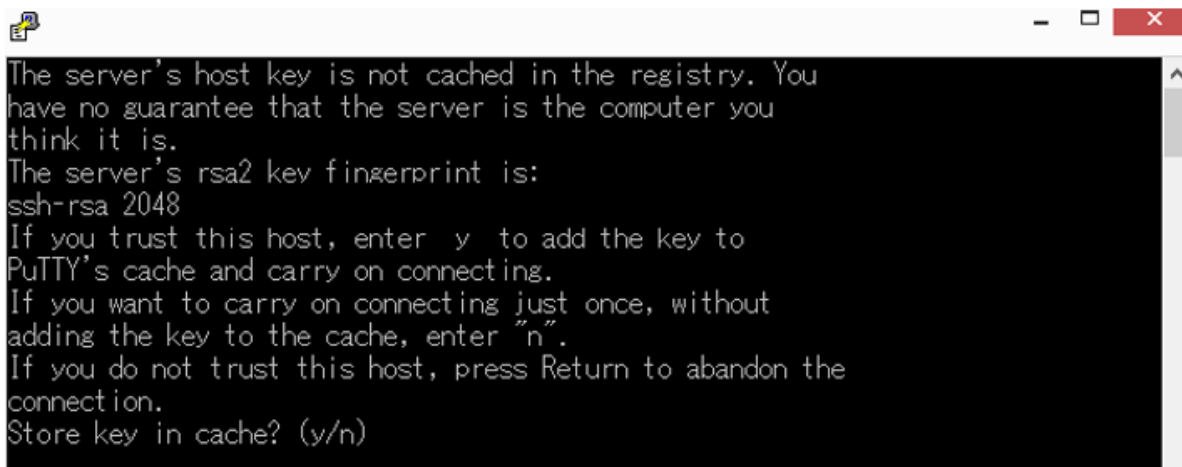


5. *Edit Profile* ウィンドウ上部にて、以下の内容を入力します。
 - Profile Name
 - Connection
 - Hostname
 - Port (通常は 22 を使用)
 - Timeout (わからない場合はデフォルト値を使用)
 - Username
 - Password
 - SSH Key (必要に応じて設定)

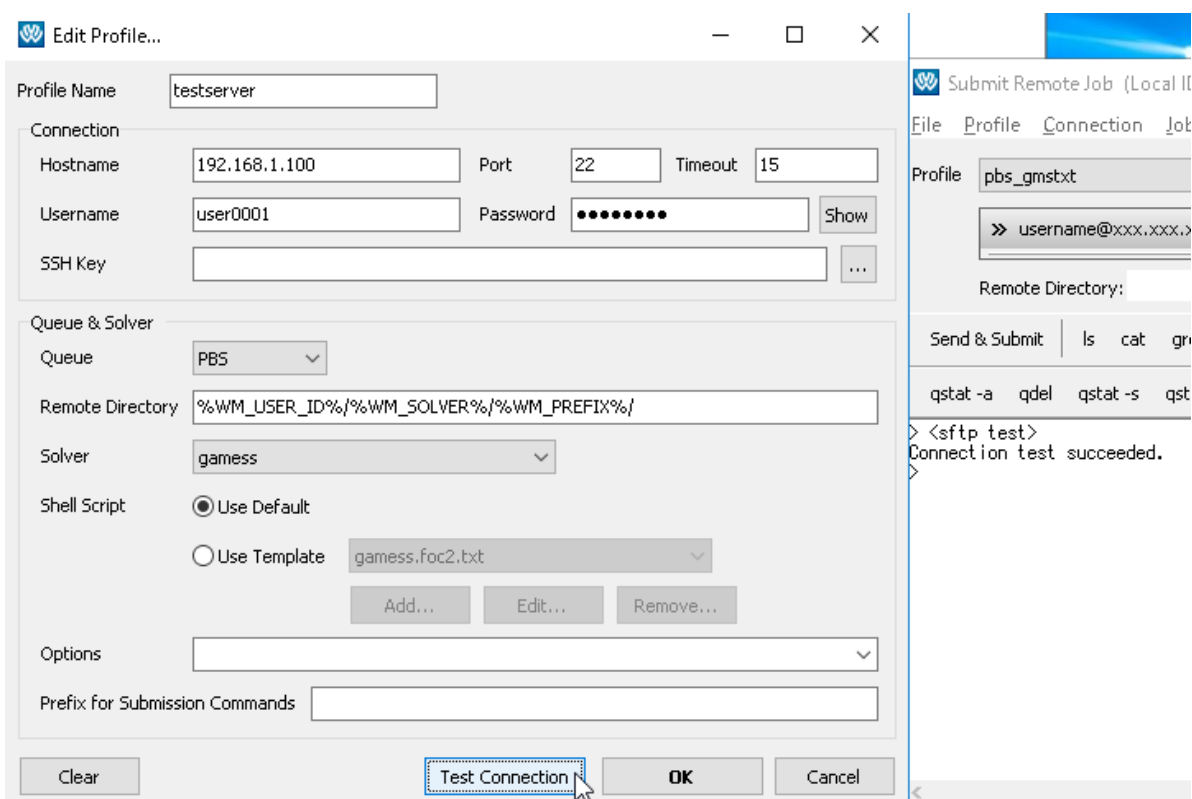


TSUBAME、FOCUS などに多段 SSH 接続する方法は https://winmostar.com/jp/manual_jp.html を参照してください。

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き、初回接続時は、`Store key in cache? (y/n)` と表示される。その場合は、`y` とキー入力する。



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。



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)

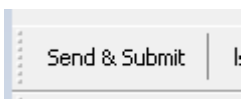
まず接続するサーバ上にインストールされたジョブスケジューラを *Queue* を選択し、その上で使用するソルバを *Solver* で選択します。次に、*Shell Script* の *Use Template* をクリックします。選択したソルバのテンプレートがない場合は、テンプレートの名前を入力すると、テンプレートがテキストエディタで開かれます。ある場合は、*Use Template* の横のプルダウンメニューで使用したいテンプレートファイルを選択し、その下の *Edit...* ボタンをクリックするとテンプレートファイルがテキストエディタで開きます。テンプレートファイルには、`module 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...* → *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。

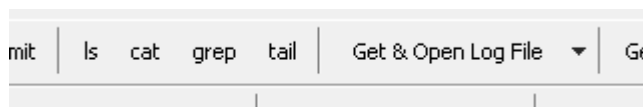
リモートサーバでジョブが実行されたディレクトリは、*Profile* → *Edit Profile* の *Remote Directory* で設定することができ、実際使用されたものは *Submit Remote Job* ウィンドウの *Remote Directory* 欄に表示されます。

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。

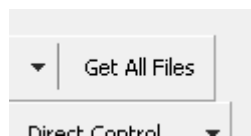
12. リモートサーバ上の特定のジョブの状況を確認するときは、以下の操作を行ってください。

- *ls* ボタン
- *cat* ボタン
- *grep* ボタン
- *tail* ボタン
- *Get & Open ...* ボタン



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。

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。

ウイ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。

ウイ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。

ウイ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 *IDdir*/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。'/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 *IDdir*/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 個ずつで囲むと、*IDdir* 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 Queuing 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。

ウインドウ内の *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、それ以降の操作が軽快になります。

Open Putty Putty の設定ウインドウを開き、接続に関する詳細な設定を行います。

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。

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。

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。

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ります。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

Chapter 8

アドオン

8.1 CONFLEX

CONFLEX の計算条件を設定し実行します。

8.2 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。

8.2.1 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, RunNAMD.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

Preference [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り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。

8.2.2 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 insertions 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。

8.2.3 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。

8.2.4 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。

8.2.5 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。

8.3 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。

8.4 Hansen SP 値

ハンセンの溶解度パラメータ (HSP) 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。

1. HSP 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、隣のレ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 が記された csv ファイルが作成されます。

計算される HSP は原子団寄与法により算出されていて、算出に対応している原子団 (官能基) は [こちら](#) 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。

Chapter 9

その他のトピック

9.1 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。

MOPAC の実行	-mopac1, -mopac2, -mopac3
分子表面積・体積の計算	-molsv
アスペクト比の計算	-aspect
ファイル形式の変換 (dat,gjf,mol,pdb 等)	-o (output filename)

使用例:

```
"C:\winmos7\winmostar.exe" "C:\winmos7\samples\dbt.dat" -mopac1  
"C:\winmos7\winmostar.exe" "C:\winmos7\samples\dbt.dat" -molsv 1 2.0 0.02  
"C:\winmos7\winmostar.exe" "C:\winmos7\samples\dbt.dat" -o pdb  
"C:\winmos7\winmostar.exe" "C:\winmos7\samples\dbt.dat" -o gjf adjust hadd clean
```

実行プログラム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。

-o オプションでファイル形式を変換する際に、「adjust」(座標調整)、「hadd」(水素付加)、「hdel」(水素削除)、「clean」(クリーン)を指定することもできます。

samples フォルダの wmjobs.bat に使用例があります。

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。

9.2 cygwin_wm

cygwin_wm 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 *cygwin_wm* のセットアップが必要です。

インストール方法は *cygwin_wm* 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、*cygwin_wm* 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 *cygwin_wm* 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 → *cygwin_wm* を診断 機能を使用することで、*cygwin_wm* 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。)
- *cygwin_wm* 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。

ツール → *cygwin_wm* 起動 を選択すると、*cygwin_wm* のコンソールを直接起動することが可能です。

Chapter 10

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。
- *Firefly* を使った時に *RESP* 電荷を計算できない。
- ローカルマシンで *Gromacs* を実行中に *Gromacs* がフリーズする。

10.1 *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)

10.2 *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 locale...]-[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)

10.3 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)

10.4 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)

10.5 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)

10.6 Firefly を使った時に RESP 電荷を計算できない。

Winmostar の RESP 電荷算出は GAMESS(US) 対象として開発されているため、現状では Firefly などを使って構造最適化をした後に、RESP 電荷算出時の計算のみ GAMESS(US) をお使いください。将来的には Firefly を使った RESP 電荷計算にも対応予定です。(2018年7月31日報告)

10.7 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りリモートジョブ投入機能をお使いください。(2018年7月31日報告)

Chapter 11

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。
- ライセンスに関して
 - Q. 講義での使用方法を教えてください。講義用ライセンスの使用条件を教えてください。
- ソフトウェア動作全般
 - 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. Winmostar の動かす PC の最小・推奨スペックを教えてください。
 - Q. 「*ERROR: I/O error 32*」と表示され処理に失敗します。
 - Q. 作製した分子モデル等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. Cygwin を使う処理が異常終了します。 / ツール → cygwin_wm 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 → cygwin_wm を診断 機能で *WARNING ... some files are missing* と表示されます。
- 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\SPMD\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. リモートジョブ関連操作時に PuTTY 関連のエラーが表示されます。sftp テストは成功するが、各種コマンドを実行できません。
- MOPAC, CNDO/S, GAMESS, NWChem, Gaussian に関して
 - 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. CNDO/S で Method=INDO を使用したときに計算できません。
 - Q. GAMESS で NMR 計算を実行できません。
 - 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. GAMESS において、1 原子だけの系の計算で「WARNING. NUMBER OF INTERNAL 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。
 - 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. 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. Gaussian の out ファイルを読み込んだのですが、軌道 (固有) エネルギーなどが標示されません。
 - 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. 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。
- Quantum ESPRESSO, OpenMX に関して
 - 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, 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 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 計算を実行する際に、ph.x の出力 (ph.out) に「The phonon code with US-PP and raman or elop not yet available」と表示され計算結果を取得できません。
- その他の機能に関して
 - Q. ハンセン溶解度 (HSP) パラメータを計算するとエラーが出ます。ログファイル (*_hsp_tmp\temp.out) に ... undefined ... と出力されます。

11.1 購入に関して

11.1.1 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。

11.1.2 Q. 当社から発行される書類の種類を教えてください。

A.

法人の場合は、請求書・納品書・見積書を発行いたします。

個人の場合は、PayPal にて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がありますのでご了承ください。

11.1.3 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.

代理店等、エンドユーザ以外の方が見積を依頼する場合は自由記入欄に以下の情報をご記入ください。

- ・エンドユーザの所属
- ・エンドユーザの氏名

なお、エンドユーザに直接納品いたしますので、ご注文の際はエンドユーザの送付先情報をお知らせいただきます。

11.2 ライセンスに関して

11.2.1 Q. 講義での使用方法を教えてください。講義用ライセンスの使用条件を教えてください。

A. 講義用ライセンスを教育機関での講義目的に限り、教員及び授業に参加する学生全員でお使いいただけます。

申請時には以下の注意点をご確認下さい。

- ・講義を行われる先生から直接問い合わせ下さい。
- ・自由記入欄に授業名・期間・おおよその学生数ご記入下さい。
- ・後日授業資料を共有いただけますと幸いです。

講義用ライセンスは [こちら](#) から申請することができます。

11.3 ソフトウェア動作全般

11.3.1 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。

1. 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、トライアル版、プロフェッショナル版のいずれに該当するか確認し、問題を起こしている機能は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 cygwin_wm 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が含まれている場合は、一部ソルバで不具合が出ることも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「log(out) ファイル編集」などをクリックし、ログの内容を確認する。

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、cygwin_wm 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。
- cygwin_wm を使用している場合は、ヘルプ → cygwin_wm を診断 で cygwin_wm の簡易的な診断を実行する。
- Winmostar、cygwin_wm 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、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。

11.3.2 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 をご確認ください。

11.3.3 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てください。

11.3.4 Q. 作製した分子モデル等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。

11.3.5 Q. Cygwin を使う処理が異常終了します。 / ツール → *cygwin_wm* を診断機能で ... **ERROR** ... と表示されます。 / **Cygwin** の黒いウインドウに *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
3. 使用している *cygwin_wm* 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 *cygwin_wm* 以外に *cygwin1.dll* が存在する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、各種フリーウェアなどに同梱されていることがあります。

4. 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 (cygwin_wm 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。

5. セキュリティ対策ソフトを一時的に無効する。

6. 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。

7. 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。

11.3.6 Q. ツール → *cygwin_wm* を診断 機能で **WARNING ... some files are missing** と表示されます。

A. *cygwin_wm* 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。

11.4 分子のモデリング・系の作成に関して

11.4.1 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。

1) 編集 → 結合 → 結合付加 またはメインウィンドウ上部の k 結合付加 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 → 結合 → 結合再生成 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 → クリーン により構造最適化しておく、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。

11.4.2 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

```
gmx insert-molecules -try 100 -f gmx_tmp_water.gro -o gmx_tmp_water_tmp.gro -ci mol0.
→gro -nmol 64
... (途中省略) ...
set +v
Error : Failed to solvate.
```

などと出力され処理が正常終了しません。

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。また、それでも実行できない場合は、内部的に使用している Gromacs の再インストールを、以下の手順で実施してください。

1. *cygwin_wm* のインストールフォルダの下の /etc/profile.d/winmostar.sh の中の

```
source /usr/local/gromacs_sse/bin/GMXRC
```

または

```
source /usr/local/gromacs_avx/bin/GMXRC
```

の行をコメントアウトまたは削除する

2. Winmostar の ツール → *cygwin_wm* 起動 をクリックし、起動した *cygwin* 上で 各種ソルバのインストール手順 (Cygwin) の「1-2. Gromacs」のインストール手順を試みる

3. ツール → `cygwin_wm` 起動で `gmx` と実行し `GROMACS: gmx, VERSION ...` などと Gromacs の起動を示すメッセージが表示されたら再ビルドは成功である

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 → 部分編集 → 部分複製 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。

11.5 ローカルマシンでの MPI・並列実行に関して

11.5.1 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。

11.5.2 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。

11.6 リモートジョブに関して

11.6.1 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。

詳しい手順は [リモートジョブ投入チュートリアル](#) をご確認ください。

11.6.2 Q. リモートジョブ関連操作時に PuTTY 関連のエラーが表示されます。sftp テストは成功するが、各種コマンドを実行できません。

——質問詳細——

sftp テストの結果は 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 sftp テスト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 に何らかの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 Putty ボタンから 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。)

11.7 MOPAC, CNDO/S, GAMESS, NWChem, Gaussian に関して

11.7.1 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。

11.7.2 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、使っている 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となります。

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。

11.7.3 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。

11.7.4 Q. GAMESS で NMR 計算を実行できません。

A. まずは 一般的な不具合 の対処を実施してください。

また、\$SCF の DIRSCF=.F. にすること、並列計算ができないので NCPUS=1 にすることが必要です。

(計算結果出力の最後の方に以下の様に詳細が記載されます。)

```
INCOMPATIBLE OPTION CHOSEN WITH RUNTYP=NMR ***
NMR MAY BE COMPUTED ONLY FOR SCFTYP=RHF,
NO CORRELATION OPTION (DFTTYP, CITYP, CCTYP, MPLEVEL) MAY BE CHOSEN
NO SEMI-EMPIRICAL OPTION (GBASIS=AM1/PM3/MNDO) MAY BE CHOSEN
DIRECT AO INTEGRAL CALCULATION (DIRSCF) IS NOT ENABLED,
AND/OR PARALLEL EXECUTION IS NOT ENABLED.
```

11.7.5 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。

A. GAMESS の実行時に割り当てられたメモリ容量が足りていないことを意味しています。

インプットファイル内の MWORDS= の数値を増やすことで、エラーを回避できます。

11.7.6 Q. GAMESS において、1原子だけの系の計算で「WARNING. NUMBER OF INTERNAL 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。

Winmostar の GAMESS キーワード設定ウインドウにおいて、COORD を UNIQUE に変更してください。

11.7.7 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。

11.7.8 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。

11.7.9 Q. Gaussian の out ファイルを読み込んだのですが、軌道 (固有) エネルギーなどが標示されません。

A. 実行した Gaussian の入力ファイルに pop=full または pop=regular が抜けている場合は表示されません。

11.7.10 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 ウインドウで [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。

11.8 Gromacs, LAMMPS に関して

11.8.1 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。

11.8.2 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 法実行ウインドウの [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 法実行ウインドウの [Options] で設定してください。

11.9 Quantum ESPRESSO, OpenMX に関して

11.9.1 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。

11.9.2 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いかチェックする。
- ・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。
- ・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。
- ・ 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）。
- ・ 波動関数の更新割合（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。

11.9.3 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 Winmostar マニュアル を参照）。

11.9.4 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。

11.9.5 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。

11.9.6 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「**The phonon code with US-PP and raman or elop not yet available**」と表示され計算結果を取得できません。

A. 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。

11.10 その他の機能に関して

11.10.1 Q. ハンセン溶解度 (HSP) パラメータを計算するとエラーが出ます。ログファイル (***_hsp_tmp\temp.out**) に **... undefined ...** と出力されます。

A. 同機能の原子数制限に引っかかったものと思われます。現在、総原子数は最大 250、水素以外の原子数は最大 120 という制限があります。繰り返し構造を持つオリゴマーの場合は、本来は溶解度パラメータが分子サイズで規格化された指数であることにご注意ください。