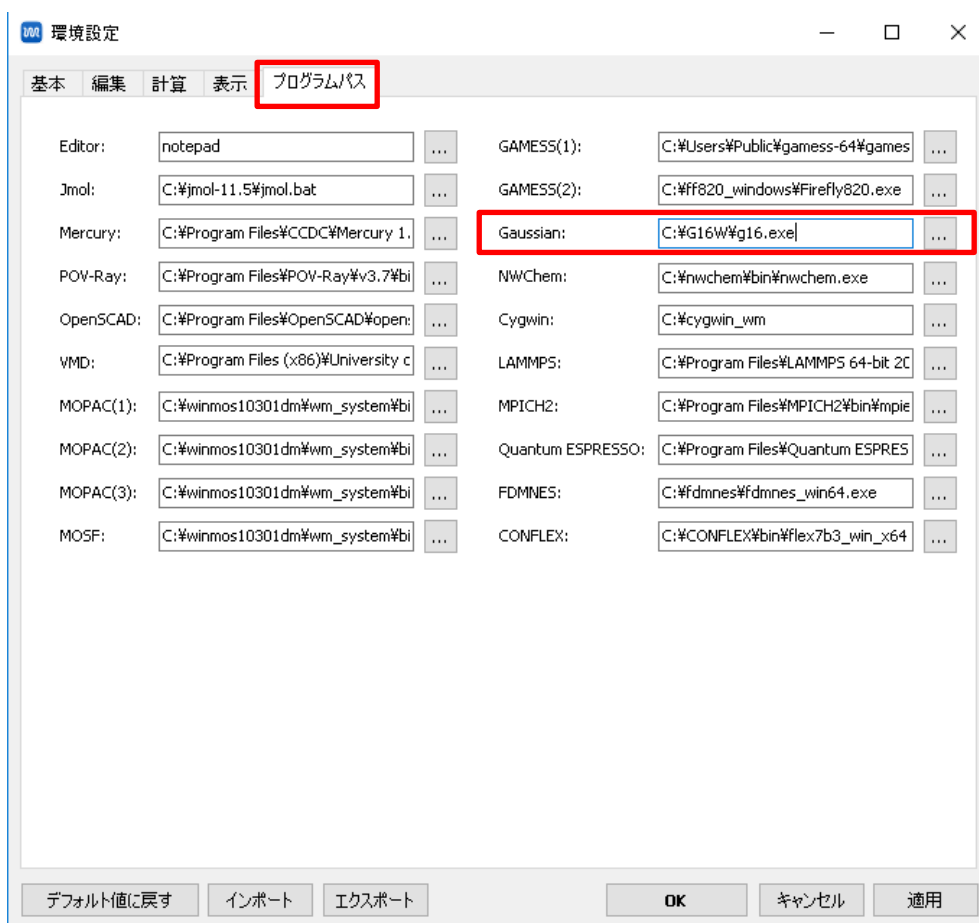


Windows 版 Gaussian セットアップマニュアル

2022 年 4 月 15 日

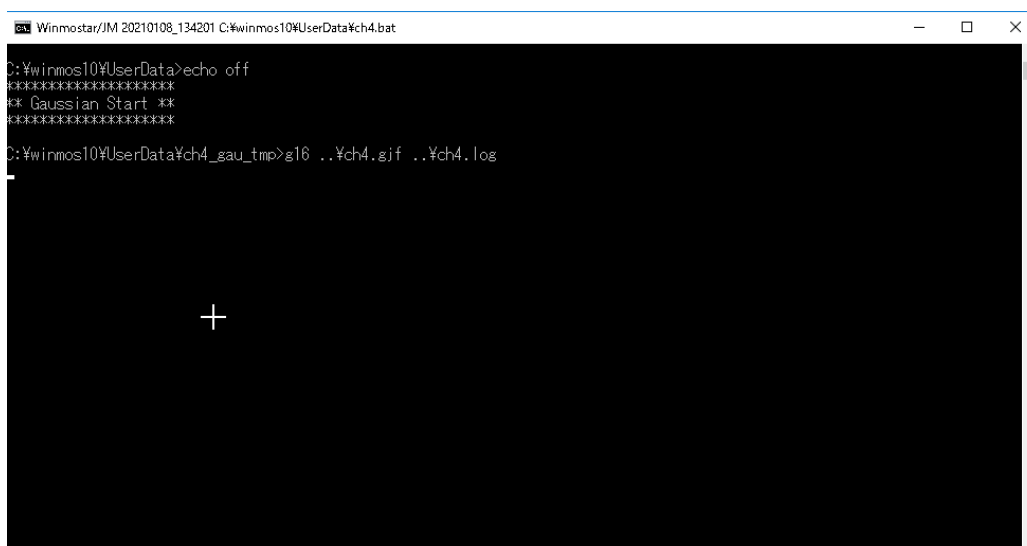
1. Gaussian の購入元・配布元から提供されるインストール方法に従い、Windows 版の Gaussian をインストールする。その際、Gaussian のインストーラ (setup.exe) において Destination Folder に指定したフォルダ (Gaussian16 の場合、デフォルトでは C:\G16W) を覚えておく。
2. Winmostar が Gaussian を呼び出せるようにパスを設定する。Winmostar のツール | 環境設定をクリックして環境設定ウィンドウを開く。プログラムパスタブを開き、Gaussian の[...]ボタンをクリックする。そして、1.で指定した Destination Folder の下にある g16.exe (Gaussian09 の場合は g09.exe) を選択し OK をクリックする。

※ここで、ファイル名が似ている g16w.exe や g09w.exe を選択しないように注意する。



3. 簡易的な動作チェック

- 1) Winmostar のメインメニューの **ファイル | 新規ファイル** をクリックし、**QM | Gaussian | キーワード設定** をクリックする。
- 2) 「水素を付加し CH4 として計算しますか？」と聞かれたら **はい** をクリックする。
- 3) **Gaussian Keyword Setup** ウィンドウが開いたら、右下の **Run** をクリックする。
- 4) 保存ダイアログが開き、「ch4」（半角）と入力して保存すると黒いターミナルウィンドウが開き、Gaussian の計算が始まる。下図のような表示のまま数秒経過し、計算終了後ターミナルウィンドウが閉じる。




```
Winmostar/JM 20210108_134201 C:\winmos10\UserData\ch4.bat
C:\winmos10\UserData>echo off
*****
** Gaussian Start **
*****
C:\winmos10\UserData\ch4_gau_tmp>g16 ..\ch4.gjf ..\ch4.log
+

```

- 5) **QM | Gaussian | ログを表示** をクリックしてデフォルトで選ばれたファイルを開く。ファイルの末尾に「Normal termination of Gaussian...」と表示され、正常に計算が実行されたことを確認する。

(インストールした Gaussian のバージョンに応じて詳細なメッセージは若干変化する)



```
ch4.log - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
7016805||Version=1A32W-G16RevB.01|State=1-A1|HF=-40.5183832|RMSD=2.650
e-009|RMSF=6.935e-005|Dipole=0.0001327,0.,0.|Quadrupole=-0.0011869,0,0
005934,0.0005934,0.,0.,0.|PG=C03V [C3(H1C1),3SGV(H1)]||@

I WANT TO KNOW HOW GOD CREATED THE WORLD. I AM NOT INTERESTED IN
THIS OR THAT PHENOMENON, IN THE SPECTRUM OF THIS OR THAT ELEMENT.
I WANT TO KNOW HIS THOUGHTS, THE REST ARE DETAILS.
-- ALBERT EINSTEIN
Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 16.0 seconds.
Elapsed time: 0 days 0 hours 0 minutes 10.0 seconds.
File lengths (MByte): RWF= 5 Job= 0 D2E= 0 Chk= 1 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 16 at Fri Jan 08 13:31:38 2021.

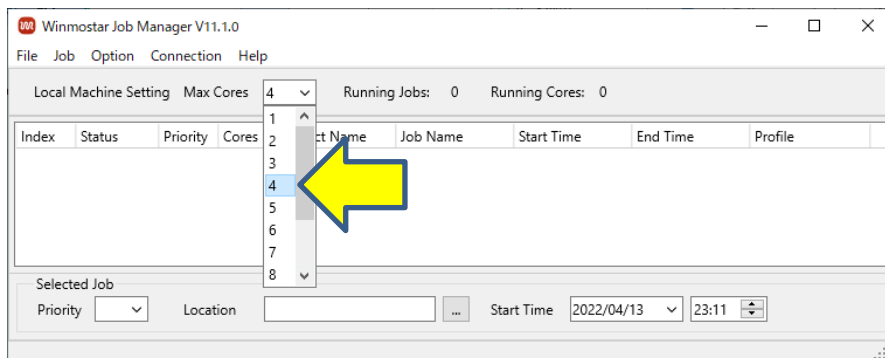
```

- ※ エミュレータなどを介して Mac 上で動作させる場合には不具合が出る可能性がある。
- ※ Gaussian を Windows 10 上に動作させる際に、Windows defender およびファイヤウォールの例外設定に、Gaussian の Destination Folder を指定しなければならない場合がある。

4. CPU コア数の設定

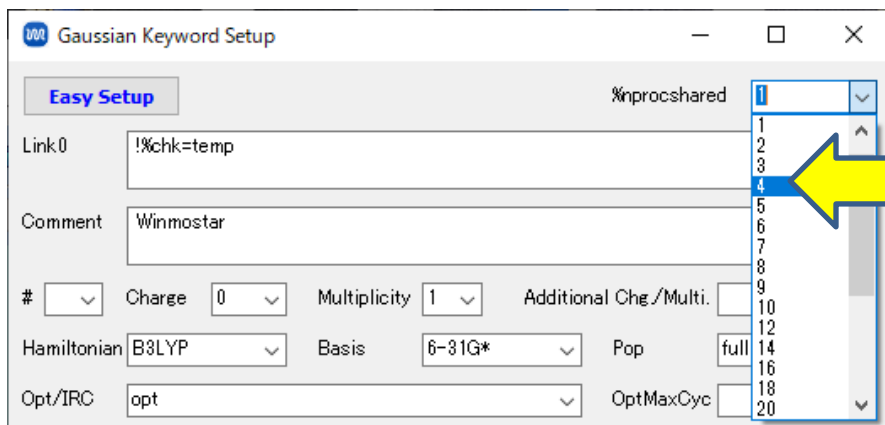
- 1) Winmostar の ツール | ジョブマネージャをクリックする。Max Cores にこのコンピュータで計算に割り当てられる最大のコア数を設定する。例えば Max Cores が「4」なら、並列数 2 のジョブを最大で同時に 2 個まで実行することができる。各ジョブの並列数は次に設定する。

※ インストールした Gaussian がシングルコア版の場合、MaxCores を 2 以上に設定して Gaussian を同時に複数実行すると、Gaussian が異常終了する。



- 2) ファイル | 新規ファイルをクリックした後、QM | Gaussian | キーワード設定をクリックして %nprocshared に個々のジョブの並列数 (使用 CPU コア数) を設定する。

※ インストールした Gaussian がシングルコア版の場合は、%nprocshared を 2 以上に設定すると Gaussian が異常終了する。



以上