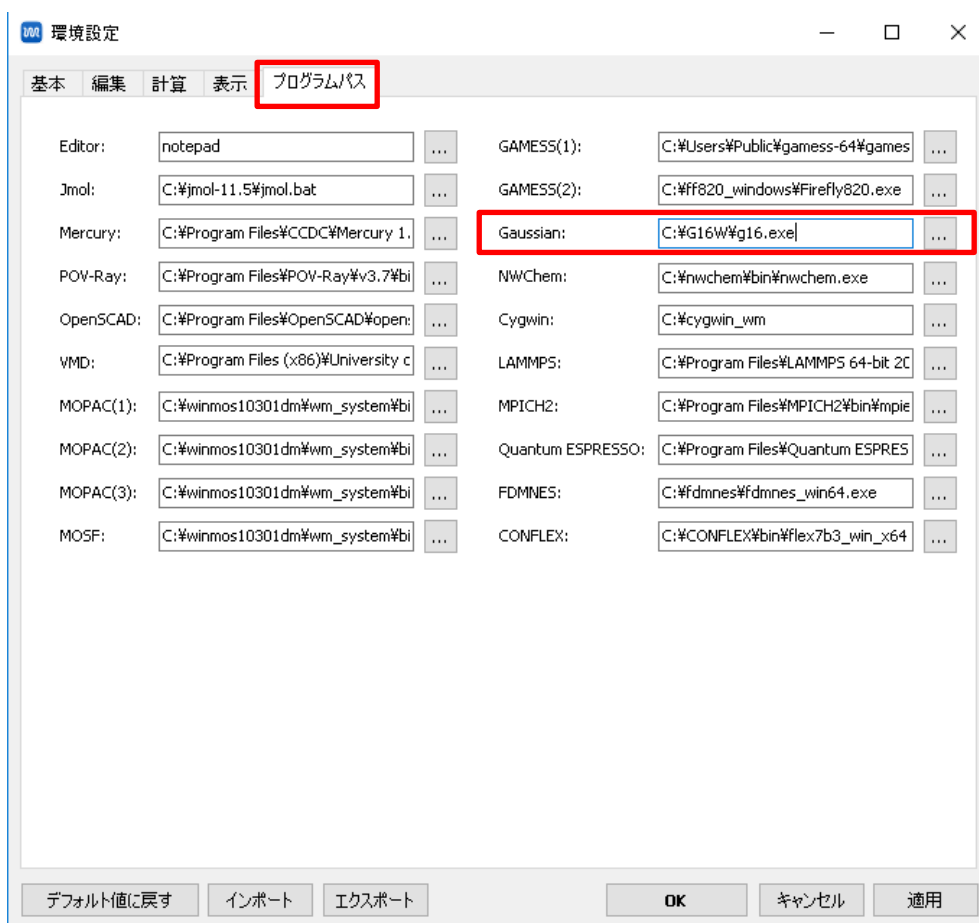


Windows 版 Gaussian セットアップマニュアル

2021/1/8

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パネルを開く。環境設定パネル[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]ボタンをクリックする。

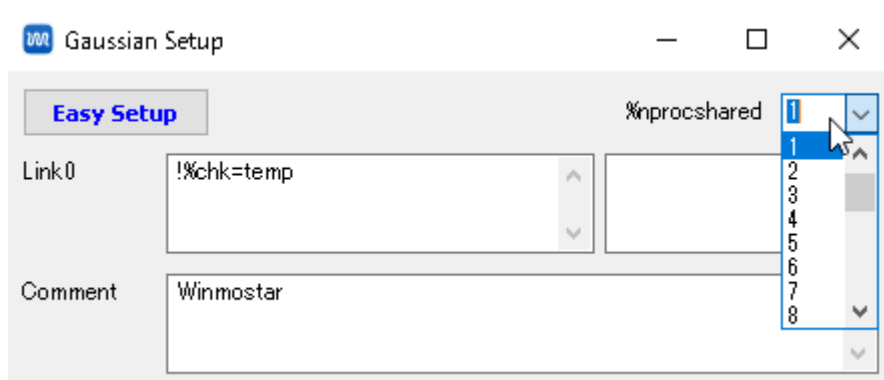
※ここで、ファイル名が似ている g16w.exe や g09w.exe を選択しないように注意する。



3. CPU コア数の設定

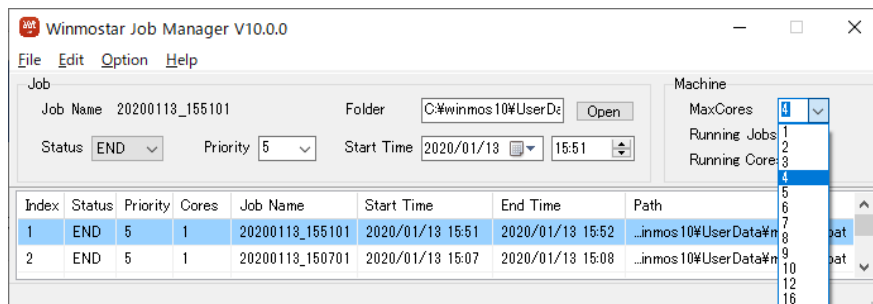
1) Winmostar のメニューから、[QM]-[Gaussian]-[キーワード設定]を選択し、[%nprocshared]の欄に計算に割り当てるコア数を設定してウインドウ下部の[OK]ボタンをクリックする。

※ インストールした Gaussian がシングルコア版の場合は、[%nprocshared]を 2 以上に設定しても正常動作せず Gaussian が異常終了します。



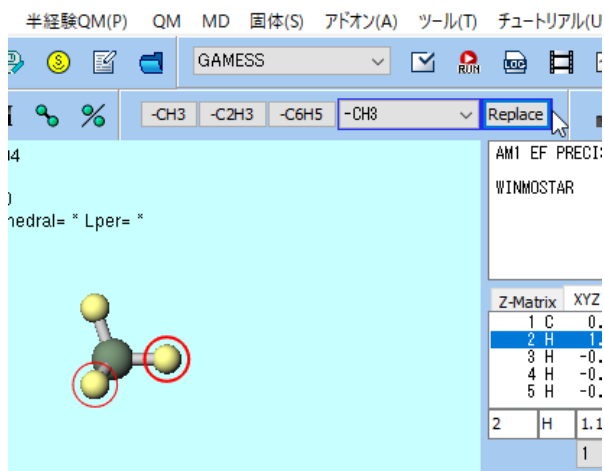
2) ローカルジョブでジョブマネージャを使用する場合（デフォルト）、Winmostar の [ツール]-[ジョブマネージャ]をクリックする。[MaxCores]に計算に割り当てるコア数を設定する。

※ インストールした Gaussian がシングルコア版の場合は、[MaxCores]を 2 以上に設定して Gaussian を同時に複数実行することがあると、Gaussian が異常終了します。

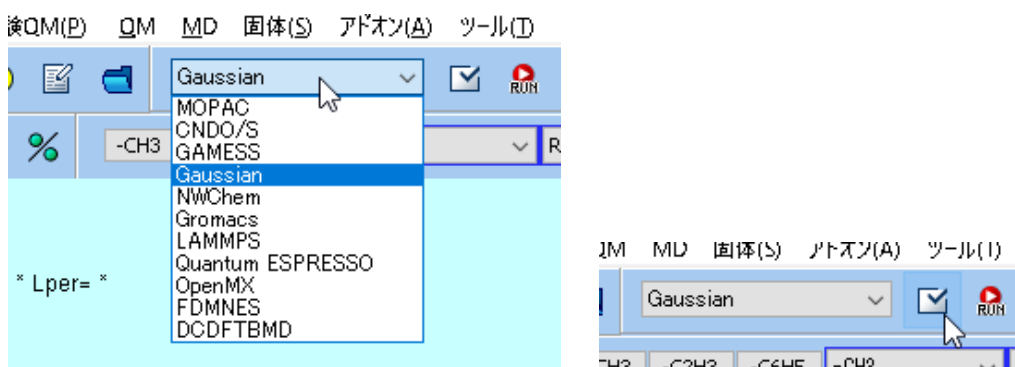


4. 簡易的な動作チェック

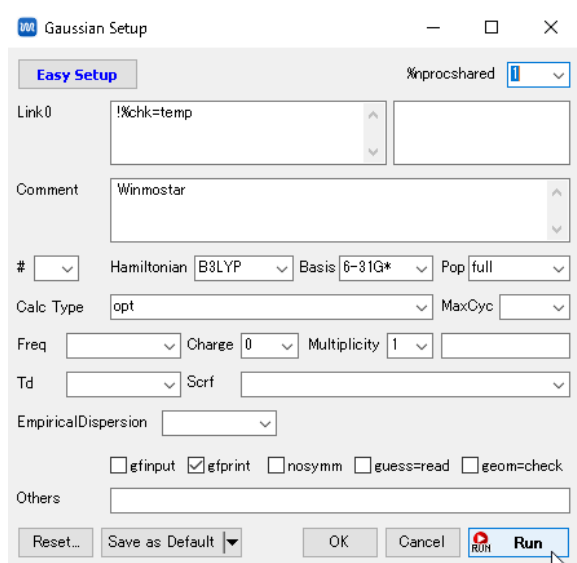
1) Winmostar のメインメニューの [ファイル]-[新規]をクリックし、メインウインドウ上部ツールバーの[Replace]ボタンをクリックすると、メタン分子が作成される。



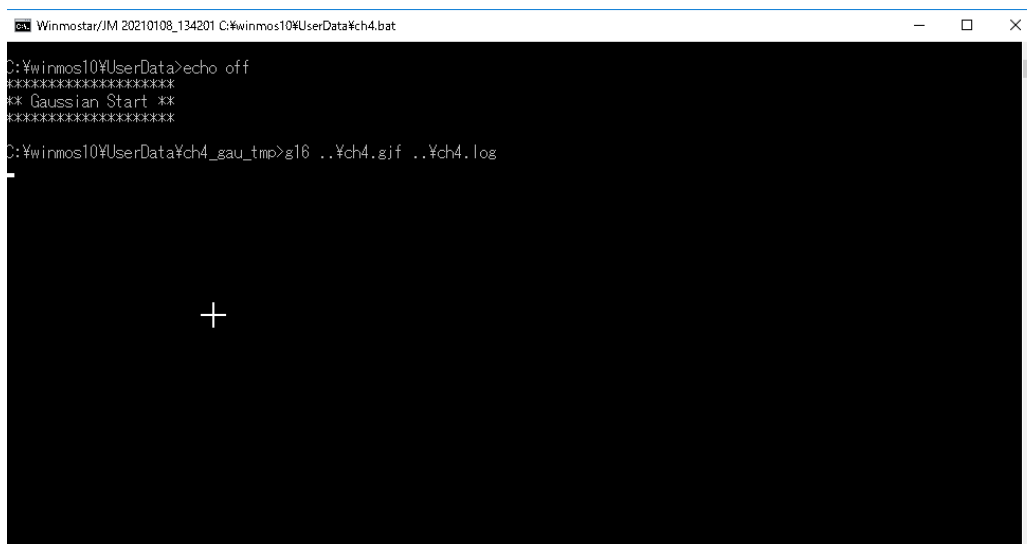
2) ツールバーの[ソルバを選択]プルダウンメニューで[Gaussian]を選択し、その横の[キーワード設定]ボタンをクリックする。

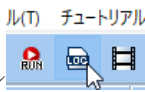


3) Gaussian Setup ウィンドウが開くので、右下の[Run]ボタンをクリックする。

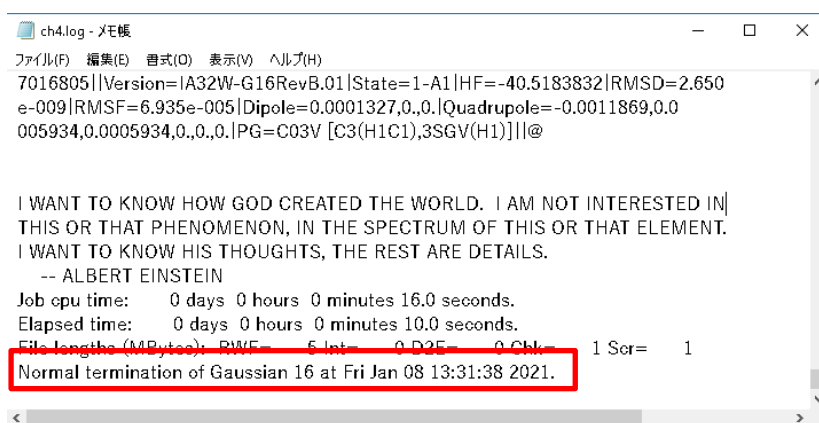


4) 保存ダイアログが開き、「ch4」（半角）と入力して保存すると黒いターミナルウインドウが開き、Gaussian の計算が始まる。下図のような表示のまま数秒経過し、計算終了後ターミナルウインドウが閉じる。



5) ツールバーの[ログを表示]ボタン  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)



- ※ エミュレーターなどを介して Mac 上で動作させる場合には不具合が出る可能性があります。
- ※ Gaussian を Windows 10 上に動作させる際に、Windows defender およびファイア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ります。

以上